

*На правах рукописи*



**СТАРОСТИН Игорь Евгеньевич**

**НАУЧНЫЕ ОСНОВЫ  
ОЦЕНИВАНИЯ РАБОТОСПОСОБНОСТИ ПЕРСПЕКТИВНЫХ  
АВИАЦИОННЫХ ХИМИЧЕСКИХ ИСТОЧНИКОВ  
ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ ДЛЯ ПОДДЕРЖАНИЯ  
ЛЕТНОЙ ГОДНОСТИ ВОЗДУШНЫХ СУДОВ**

Специальность 05.22.14 – Эксплуатация воздушного транспорта

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени

доктора технических наук

Москва – 2021

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Московский государственный технический университет гражданской авиации» (МГТУ ГА) на кафедре электротехники и авиационного электрооборудования.

Научные консультанты:

Доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой электротехники и авиационного электрооборудования МГТУ ГА  
**Халютин Сергей Петрович**

Доктор технических наук, с.н.с., профессор кафедры электротехники и авиационного электрооборудования МГТУ ГА

**Давидов Альберт Оганезович**

Официальные оппоненты:

Доктор технических наук, профессор, профессор кафедры электроснабжения ракетных комплексов ФГКВОУ ВО «Военная академия Ракетных войск стратегического назначения имени Петра Великого»  
**Капелько Константин Васильевич**

Доктор технических наук, профессор, заместитель по эксплуатации директора ОКБ – главного конструктора АО «Уфимское агрегатное производственное объединение»

**Мусин Сергей Миргасович**

Доктор технических наук, профессор, профессор отделения электроэнергетики и электротехники Инженерной школы энергетики ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»

**Букреев Виктор Григорьевич**

Ведущая организации:

ФГКВОУ ВО «Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия имени профессора Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина»

Защита состоится «16» февраля 2022 года в 15-00 на заседании Диссертационного совета Д 223.011.01 в Московском государственном техническом университете гражданской авиации, 125993, г. Москва, Кронштадтский бульвар, д. 20, в аудитории 202Б.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Московского государственного технического университета гражданской авиации и на сайте [mstuca.ru](http://mstuca.ru)

Автореферат разослан «\_\_\_» ноября 2021 г.

Ученый секретарь диссертационного совета, д.т.н., профессор

Самойленко В.М.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы исследования** обусловлена тем, что современная гражданская авиация имеет тенденцию к существенному повышению уровня электрификации оборудования, мощности источников электроэнергии, их энергоэффективности и экологичности. Совершенствование воздушных судов видится в применении высокоэффективных литий-ионных аккумуляторных батарей, а также замене газотурбинной ВСУ на электрическую, питаемую от батареи топливных элементах (ТЭ). Электрическая ВСУ способна более эффективно выполнять основные функции (автономный запуск маршевых двигателей на любой высоте) за счёт лучших удельных показателей, в частности, вдвое более высокого КПД (около 50-70%, против КПД тепловых двигателей 25-45%), и более низкой стоимости её жизненного цикла, а также обеспечить существенное улучшение экологичности. Электрическая ВСУ на базе ТЭ независима от маршевых двигателей; масса ВСУ на базе ТЭ на 10-15% меньше приведенной массы традиционной газотурбинной ВСУ той же мощности. Последнее преимущество электрической ВСУ позволит снизить массу самолета и повысить мощность двигателей, увеличить дальность полета и снизить расход топлива.

Электрификация современных самолетов имеет следующие преимущества:

- экологические (обусловлены более высоким КПД и применением экологически чистых видов топлива), что приводит к уменьшению загрязнения окружающей среды, а также отсутствием вредных выбросов ТЭ и низким уровнем шума;
- энергетические (обусловлены более высоким КПД электрической ВСУ на основе батареи ТЭ по сравнению газотурбинной ВСУ, возможностью рекуперации энергии при использовании электроприводов, возможностью одновременного использования разных видов электрической энергии для питания потребителей);
- эксплуатационные (обусловлены низким уровнем шума, низкими температурами, а также простотой технического обслуживания электрооборудования);
- экономические (обусловленные, в первую очередь существенным снижением стоимости технического обслуживания электрооборудования и простотой его диагностирования).

В настоящее время наиболее перспективными для применения в авиации являются литий-ионные аккумуляторные батареи (ЛИАБ). Литий-ионные аккумуляторы (ЛИА) имеют по сравнению с никель-кадмиевыми и свинцово-кислотными более высокие удельные энергетические характеристики, что делает перспективным их применение на борту ВС.

На полностью электрическом самолете ЛИАБ может выполнять функцию основного источника электроэнергии или работать в паре с батареей ТЭ. На воздушных судах с двигателями внутреннего сгорания ЛИАБ может выполнять функции аварийного питания потребителей электрической энергии первой категории, запуска ВСУ или маршевых двигателей, буфера электрической энергии.

Перспективы применения на борту летательного аппарата ЛИА и ТПТЭ обусловлены также высоким уровнем технологической проработки и прогнозом их внедрения к 2025 году (рисунок 1).

Широкому применению ТПТЭ в ВСУ на основе ТЭ препятствуют ряд проблем, таких как необходимость вы-



**Рисунок 1 – Перспективы развития авиационных химических источников тока**

сокой очистки водорода, растворение платинового катализатора, испарение воды, набухание мембраны вследствие поглощения воды, пластическая деформация мембраны, диффузия водорода к катоду и кислорода к аноду, реакция водорода на катоде и кислорода на аноде, образование перекиси водорода с последующим химическим разрушением мембраны.

Литий-ионный аккумулятор, имея высокие удельные энергетические показатели, имеет достаточно узкий диапазон нормальной работы. Так при перезаряде ЛИА входит в тепловой разгон, обусловленный выделением металлического лития на отрицательном электроде и последующим химическим взаимодействием лития с органическим электролитом. Тепловой разгон может привести к пожару на борту ВС. Примерами являются пожары на борту ВС серии Боинг-787, вызванные ЛИАБ на борту этих ВС, а также пожары на борту электрического самолета Alice. При переразряде имеет место разрушение положительного электрода, что существенно снижает емкость ЛИА. Отсюда возникает необходимость недопущения перезаряда или переразряда с целью предотвращения описанных явлений.

Важное значение для решения проблем эксплуатации ТПТЭ и ЛИАБ является разработка новых материалов электродов и электролита. Помимо разработки новых материалов и выбора оптимального режима (в плане повышения энергоэффективности, надежности, безопасности и долговечности) работы батареи ТПТЭ, режимов разряда и заряда ЛИАБ, а также выбора оптимальных параметров этих химических источников электрической энергии (ХИЭЭ), немаловажное значение имеет совершенствование методов диагностики и прогнозирования технического состояния ХИЭЭ. Так, например, в процессе расследования инцидента на Boeing 787 в Бостоне, обусловленном тепловым разгоном ЛИАБ на борту этого ВС, экспертами отмечалось, что не было выявлено проблем, относящихся к качеству производства аккумуляторов; причем, как сообщалось NTSB, перенапряжение не было причиной этого инцидента, т.к. напряжение не превышало предельного значения батареи 32 В, и зарядный блок прошел испытания. Причины теплового разгона установить не удалось. Также не удалось определить причины теплового разгона ЛИАБ на Боинг-787, имевшему место 14 января 2014 года.

Для борьбы с последствиями теплового разгона ЛИА применялись меры по укреплению корпуса, а также использование систем охлаждения. Однако эти меры не решили основной проблемы – возникновения и развития теплового разгона. Как отметил Джефф Дан, профессор физики из Канадского университета Далхаузи, а также следователи NTSB, сбои в работе ЛИАБ являются признаком проблем внутри ячеек ЛИА, обусловленных физико-химическими процессами (ФХП) в них. Это приводит к необходимости диагностирования и прогнозирования технического состояния каждого ЛИА в батарее, исходя из особенностей протекания ФХП в каждой такой ячейке ЛИАБ.

Обеспечение упомянутых оптимальных режимов работы, диагностика и прогнозирование возникновения аварийных режимов работы ЛИАБ и батареи ТПТЭ должно осуществляться соответствующей системой управления батареями ТПТЭ и ЛИАБ. Задачи управления ЛИАБ включают в себя балансировку ЛИА в батарее с целью выравнивания степени близости каждого аккумулятора к перезаряду или переразряду (необходимость балансировки обусловлена тем, что каждый ЛИА в батарее, в силу своих «индивидуальных» свойств, разряжается и заряжается по-разному), отключение ЛИАБ в случае начала перезаряда или переразряда с целью предотвращения теплового разгона при перезаряде и падения емкости при переразряде, стабилизацию требуемого выходного напряжения или тока ЛИАБ.

Задачи управления батареями ТЭ включают в себя управление увлажнением мембраны, управление отдачей электроэнергии каждого ТПТЭ в батарее путем запасания электрической энергии с этих ТЭ и ее дальнейшей отдачи во внешнюю цепь (необходимо для повышения энергоэффективности батареи ТПТЭ, т.к. к каждому ТПТЭ топливо (водород) и окислитель (кислород, в том числе и в составе воздуха) поступают по-разному, то и токовую нагрузку тоже надо сбалансировать), управление подачей водорода и отводом воды.

Таким образом, совершенствование эксплуатационных режимов работы ЛИАБ и батареи ТПТЭ связано как с архитектурой систем управления, так и с алгоритмами управления.

Функционирование ХИЭЭ определяется ФХП в элементах, причем у каждого такого элемента «своя» динамика протекания этих процессов, поэтому алгоритм управления необходимо строить исходя из диагностирования и прогнозирования технического состояния каждого элемента ХИЭЭ, обусловленного особенностями динамики протекания ФХП в конкретном элементе. Для этого необходимы диагностические и прогностические модели элементов ХИЭЭ, получаемые из анализа динамики ФХП в них.

Так как в различных ХИЭЭ протекают ФХП различной природы, то необходима единая методология построения моделей ХИЭЭ, получаемых на основе анализа динамики их ФХП. Таким образом, задача разработки единой методологии построения диагностических и прогностических моделей авиационных ХИЭЭ различной природы на основе анализа динамики ФХП в этих источниках, является **актуальной**.

**Степень научной разработанности проблемы.** В России в НИЦ «Курчатовский институт», ОАО «Объединённая авиастроительная корпорация», ЗАО «АЭРОКОН», Институте проблем химической физики РАН (ИПХФ) были созданы энергоустановки для беспилотных летательных аппаратов (например, типа Inspector-401В) с твёрдополимерными ТЭ, имеющими рабочую температуру  $20 \div 80^\circ\text{C}$  (возможен запуск и при отрицательных температурах), с оптимизированным самоувлажнением мембраны и была проанализирована возможность использования ТЭ как резервного источника электропитания критических агрегатов самолета. В компании «Экспериментальная мастерская НаукаСофт» разрабатывается самолет АВФ-32НС, работающий на ЛИАБ, ТЭ и солнечных элементах.

Фирмами «Ballard Power System Company», «Ballard Advanced Materials» (Канада) были разработаны мембраны ВМЗГ, и мембраны на основе сульфированных поли(фенилхиноксалинов). Компаниями РЕМЕАС (Германия) и «Celanese» на основе разработок Лысовой А.А., Пономаревым И.И., Ярославцевым А.Б. выпускаются мембраны, модифицированные оксидом кремния. Авторами Li Q.F., He R.H., Jensen J.O., Bjerrum N.J. исследованы протонпроводящие свойства гибридных материалов на основе поливинилфосфорной кислоты и азот содержащих гетероциклов.

Среди компаний, выпускающих платиновые катализаторы на носителе из сажи наиболее известны: E-ТЕК и «Johnson Matthey» (марка «Hispek»), а также BASF (марка «Selectra Catalysts»). Фирмой ИАТ выпускаются катализаторы на носителе из углеродных нанотрубок. Фирма 3М (США) производит платиновые катализаторы, нанесенные на нановискеры. Авторами Kotaro S., Minhua S., Adzik R., Roen L.M., Paik C.H., Jarvi T.D., Gasteiger H.A. и др. показано, что легирующие металлы платины подавляют ее растворение, обладают более высокой толерантностью к монооксиду углерода.

Исследователями Gasteiger H.A., Markovic N., Ross P.N., Gairns E.J. Ivase M., Kawatsu S., Oetjen H.F., Schmidt V.M., Stimming U., Trila F., Brankovic S.R., Wang J.X., Adzi R.R. и др. исследован и предложен электрохимический бифункциональный механизм удаления с поверхности платины адсорбированного монооксида углерода с целью освобождения на поверхности платины участков для окисления водорода. Авторами Гутерманом В.Е., Беленовым С.В., Ластовиной Т.А., Фокиной Е.П., Пруцаковой Н.В., Константиновой Я.Б., Wang X., Li W., Chen Z., Waje M., Ya Y. и др. были исследованы платиновые катализаторы на основе наноструктурированных углеродных материалов. Исследователями Wang M., Guo D., Li H., Macak J.M., Barczuk P.J., Tsuchiya H., Nowakowska M.Z., Chicov A., Chojak M., Bauer S., Virtanen S., Kulesza P.J., Schmuki P. и др. были исследованы платиновые катализаторы, нанесенных на наноструктурированный диоксид титана. Авторами China H., Campbell S., Lesler O., Chang G., Oyama M., Hirao G., Kulprathipanja A., Falconer J.L., Ganesh V., Maheswari D.L., Berchmans S., Kim B.K. и др. исследовался оксид индия-олова в составе катализаторов. Авторами Chen A., Daniel J., Russa L., Miller B. и др. исследовался оксид иридия как индивидуального носителя платины. Авторами Chhina H., Campbell S., Kesler O., Zhang Z., Wang X., Cui Z., Liu C., Lu T., Xing W. и др. проводилось исследование катализаторов на основе оксидов вольфрама и молибдена. Авторами Maiyalagan T., Viswanathan B., Mazza F., Trassati S., Kim J.Y., Oh T.K., Shin Y., Bonnett J., Weil K.S. были исследованы карбид вольфрама, титана.

Авторами Барановым И.Е., Фатеевым В.Н., Порембским В.И., Калининковым А.А., Акелькиной С.В., Лютиковой Е.К. из НИЦ «Курчатовский институт» была исследована влажность мембраны, самоувлажнение мембраны. На базе НИЦ «Курчатовский институт» была исследована в качестве катализаторов смесь платинированной сажи и графена, что позволило повысить стабильность работы ТЭ, а также несколько увеличить его ресурс.

Авторами Ивасе Массайоши, Моги Сатоси (Япония), Джанолио Джузеппе, Керки Пьерпаоло, Педраццо Франческо (Италия), Бенсон Пол Алан, Грейндж Нэйтан, Дейвиз Дамиан Ко Сеунг-Тае, Парк Миунг-Сеок, Ким Тае-Вон, ГУ Бон-Гван, Ко Сеунг-Тае, Чой Хонг (Южная Корея) были предложены усовершенствованные системы управления топливными элементами, в том числе снижающие увлажнение мембраны, повышающие энергоэффективность топливного элемента.

Авторами Чирковым Ю.Г., Андреевым В.Н., Ростокиным В.И., Кузовым А.В., Станкевичем М.М., Василенко В.А., Тютиним А.О., Кольцовой Э.М., Богдановской В.А., Тарасевичем М.Р., Щербаковым А.И., Costamagna P., Титовым В.Г., Абрамовым С.В., Модестовым А.Д., Franco A.A., Temberly M., Darling R.M., Meyers J.P., Bi W., Fuller T.F., Holby E.F., Sheng W., Shao-Horn Y., Morgan D., Ferreira P.J., Mazumder S., Cole J.V., Springer T.E., Zavodzinski T.A., Gottesfeld S. и др. были получены модели ФХП в ТПТЭ основаны на электрохимической кинетике, законах диффузии. Также авторами Титовым В.Г., Абрамовым С.В. были получены схемы замещения ТПТЭ на основе уравнений электрохимической кинетики.

Гирке были предложены общие особенности строения ионообменных мембран ХИЭЭ, в том числе и ЛИА. Робсоном была предложена диаграмма, по которой можно судить о свойстве мембран, таких как газоразделение, проводимость. Авторами Wilson A.M., Dahn J.R. было исследовано внедрение ионов лития в различные материалы электродов ЛИА. Авторами Park M., Zhang X., Chung M., Less G.B., Sastry A.M., Чудиновым Е.А., Ткачуком С.А., Шишко В.С., Кедринским И.А., Бахваловым В.Г., Кокориным А.Н., Сангинов Е.А., Евщиком Е.Ю., Каюмовым Р.Р., Добровольским Ю.А. и др. были исследованы кинетические и транспортные характеристики различных электролитов.

Авторами Стениной И.А., Шайдулиным Р.Р., Десятовым А.В., Ярославцевым А.Б., Першиной С., Корниловым Д.Ю., Ильиной Е., Дружининым К., Мо М., Chen H., Hong X., Hui K., Ye C., Lai K., Chen W., Hsieh C., Weng Y., Li F., Wu H., Wu N., Ferrari A. C., Евщиком Е.Ю., Журавлевым В.Д., Шиховцевой А.В., Журавлевым В.Д., Ермаковой Л.В., Бушковой О.В., Зюбиным А.С., Зюбиной Т.С., Добровольским Ю.А., Волоховым В.М., Poizot P., Laruelle S., Grugeon S., Lee H.Y., Lee S.M., Wang C.S., Appleby A.J., Kamaya N., Homma K., Yamakawa Y., Kato Y., Kawamoto K., Kanno R., Hirayama M., Evshchik E., Levchenko A., Shikhovtseva A.V. и др. были исследованы различные материалы электродов и электролитов ЛИА, в том числе и с использованием квантово-химического моделирования.

Компаниями Texas Instruments (США), Linear Technology, а также авторами Рыковановым А.С., Isaacson M. J. и др. были предложены различные технологии активной балансировки ЛИАБ, позволяющие отключать ЛИАБ в случае ее полного разряда или полного заряда и имеющие интерфейс обмена данными с внешними устройствами.

Авторами Чирковым Ю.Г., Ростокиным В.И., Скундиным А.М., Venkatasailanathan Ramadesigan, Paul W. C. Northrop, Sumitava De, Shriram Santhanagopalan, Richard D. Braatz, Venkat R. Subramaniana, Klein R., Chaturvedi N.A., Christensen J., Ahmed J., Findeisen J., Kojic A., Fang H., Wang Y., Sahinoglu Z., Wada T., Hara S., Smith K., Wang C.Y. были получены математические модели электрохимических процессов в ЛИА, основанные на электрохимической кинетике. В работе Бахаревой И.Ф. и Полака Л.С. показано, как усовершенствовать эти модели в дальнейшем.

Авторами Smith K., Wang C.Y., Zhao J., Wang L., He X., Wan C., Jiang C., Jiang Y., Zhang C., Zhang W., Shi Wei, Liu Q., Rahmoun A., Biechl H., He H., Xiong R., Fan J., Hu X., Li S., Peng H., Rahimian S.K., Rayman S., White R.E. были получены различные схемы замещения ЛИА.

Ланцовым В.Н. был предложен метод численно-аналитического преобразования сложных систем уравнений, при котором уменьшается порядок систем уравнений, применимый в том числе и для упрощения уравнений динамики ФХП в ЛИА и ТПТЭ.

Л. Онзагером была разработана теория, применимая в общем случае для описания физико-химических процессов различной природы в окрестности состояния равновесия. Вопросы дальнейшего развития математических моделей ФХП различной природы методами современной неравновесной термодинамики, в частности путем введения кинетической матрицы, зависящей от состояния системы и в околоравновесном состоянии вырождающейся в онзагеровскую матрицу, рассматривались в работах И.Ф. Бахарева, В.А. Эткина, Грмелы и др. Термодинамический анализ моделей химической кинетики (в том числе и корректность задания моделей химической кинетики) был выполнен Горбанем А.Н.

Авторами А. А. Нечитайлов, Н. В. Глебова, А. А. Томасов, Н. К. Зеленина был разработан метод диагностики активности катализатора и диффузионных свойств каталитических слоев. Также авторами Wu J., Yuan X.Z., Wang H. и др. были разработаны алгоритмы диагностики ТПТЭ, в основу которых также были положены электрохимические процессы. Авторами Timmons J.V., Koss E.F., Кадигроб Т.С., Безручко К.В., Давидов А.О., Ченина Е., Гасанова В., Лазненко В.И., Ширинский С.В. были сформулированы диагностические параметры аккумуляторов и методики диагностики и прогнозирования их технического состояния.

Авторами Барзиловичем В.Ю., Каштановым В.А., Гнеденко Б.В., Соловьевым А.Д., Барлоу Р., Прошаном Ф., Беляевым Ю.К., Чинючиным Ю.М., Воробьевым В.Г., Герасимовой Е.Д., Смирновым Н.Н., Ойдовым Н., Кузнецовым С.В., Шаровым В.Д., Колодежным Л.П., Чернодаровым А.В. были разработаны математические модели и методики технического обслуживания авиационных систем и компонентов.

Из описанного видно, что для успешной реализации методик технического обслуживания перспективных авиационных ХИЭЭ (в том числе и алгоритмов диагностики и прогнозирования технического состояния этих ХИЭЭ) необходимы адекватные и достаточно точные математические модели требуемых режимов работы перспективных авиационных ХИЭЭ (как следствие, вбирающие в себя все определяющие особенности протекания ФХП в заданных режимах работы, в том числе и нелинейные эффекты). Эти модели могут быть получены методами современной неравновесной термодинамики (с использованием положительно-определенной кинетической матрицы, зависящей от состояния системы) с последующим численно-аналитическим преобразованием полученной модели динамики ФХП к модели рассматриваемого ХИЭЭ. Такая модель представляет собой связь контролируемых параметров с наблюдаемыми параметрами рассматриваемых ХИЭЭ. Далее на основе имеющихся статистических данных результатов испытаний различных экземпляров рассматриваемых ХИЭЭ методами теории вероятностей и математической статистики строится вероятностная модель этих ХИЭЭ, используемая непосредственно для решения задач технической эксплуатации, задач диагностики и прогнозирования технического состояния рассматриваемых ХИЭЭ.

**Обоснование научной проблемы.** Описанные выше тенденции повышения уровня электрификации и связанные с ними перспективы внедрения на борт летательных аппаратов новых высокоэффективных источников тока – ЛИАБ и батарей водородных ТПТЭ, являются причиной снижения общего уровня безопасности полетов и увеличения вероятности отказов и аварий.

Таким образом, существует противоречие между жесткими требованиями к безопасности полетов воздушных судов, стремлением к снижению эксплуатационных затрат и нестабильностью физико-химических процессов в перспективных ХИЭЭ, а также отсутствием методов оценивания их работоспособности. Это противоречие порождает **научную проблему** – разработки научных основ оценивания работоспособности перспективных авиационных бортовых ХИЭЭ (рисунки 2).



Рисунок 2 – Обоснование научной проблемы

Учитывая нестабильность физических и химических процессов, протекающих в рассматриваемых ХИЭЭ, для синтеза законов управления необходимо использовать математические модели ЛИА и ТПТЭ, которые получаются из уравнений ФХП, лежащих в основе функционирования этих элементов. Уравнения ФХП получаются методами современной неравновесной термодинамики, в том числе и потенциально-поточным методом, полученным автором в рамках современной неравновесной термодинамики.

**Цель и задачи исследования.** Целью настоящей диссертационной работы является сохранение летной годности воздушных судов в процессе их эксплуатации путем своевременного выявления предотказных состояний новых бортовых химических источников электроэнергии на основе непрерывного контроля и прогнозирования их технического состояния.

Для достижения поставленной цели в настоящей диссертационной работе решены следующие задачи:

- проведен анализ влияния новых химических источников электроэнергии на сохранение летной годности ВС;
- сделан обзор методов диагностирования, прогнозирования и моделирования химических источников электроэнергии;
- выполнен обзор физико-химических процессов в химических источниках электрической энергии, а также обоснование допущений при моделировании этих процессов;
- разработан потенциально-поточный метод синтеза уравнений динамики физико-химических процессов, основанный на современной неравновесной термодинамике;
- произведена адаптация уравнений динамики физико-химических процессов в химических источниках электроэнергии, полученных потенциально-поточным методом, для решения задач оценки их работоспособности;
- сформирована математическая модель динамики физико-химических процессов в литий-ионных аккумуляторах;

- проведена апробация применения научных основ оценивания работоспособности химических источников электрической энергии на примере литий-ионных аккумуляторов.

**Область исследования.** Работа выполнена в соответствии с паспортом специальности 05.22.14 – «Эксплуатация воздушного транспорта»: 5.9. «Разработка методов и средств диагностирования и прогнозирования технического состояния авиационной техники и метрологического обеспечения», 5.11. «Разработка научных основ и методов обеспечения и сохранения летной годности воздушных судов в процессе эксплуатации» и 5.12. «Разработка моделей и методов анализа и оценки уровня эксплуатационно-технических характеристик авиационной техники», 5.13. «Разработка методов повышения надежности, контроля пригодности, эксплуатационной и ремонтной технологичности авиационной техники».

**Объект исследования** – процессы поддержания летной годности воздушных судов путем своевременного выявления предотказных состояний новых бортовых химических источников электроэнергии.

**Предметом исследования** являются научные основы оценивания работоспособности новых бортовых химических источников электроэнергии для сохранения летной годности воздушных судов в процессе их эксплуатации.

**Теоретико-методологическая основа исследования.** Моделирование различных динамик ФХП в системах, характеризующихся протеканием ФХП в них различной физической и химической природы, осуществляется на основе потенциально-поточного метода, разработанного автором в рамках современной неравновесной термодинамики. Функциональные разложения для свойств веществ и процессов задаются на основе теоремы Вейерштрасса о равномерном приближении функции полиномами. Диапазоны значений коэффициентов, входящих в систему потенциально-поточных уравнений, оцениваются из экспериментальных данных с использованием методов наименьших квадратов. Численно-аналитическое преобразование потенциально-поточных уравнений (в общем случае с использованием упрощения этих уравнений методами) в диагностические и прогностические модели осуществляется с использованием методов Монте-Карло, методов аппроксимации, методов символьной регрессии, методов классического машинного обучения, нейронных сетей, методов теории вероятностей и математической статистики.

**Научная новизна** выполненного исследования состоит в следующем:

- впервые разработаны научные основы оценивания работоспособности перспективных авиационных ХИЭЭ, включающие в себя единый подход получения диагностических и прогностических моделей авиационных ХИЭЭ различной физической и химической природы;
- впервые сформулирована и доказана кинетическая теорема современной неравновесной термодинамики, которая явилась основой потенциально-поточного метода моделирования физико-химических процессов в авиационных химических источниках электрической энергии;
- на основе современной неравновесной термодинамики разработан новый потенциально-поточный метод формирования математических моделей неравновесных физико-химических процессов в перспективных авиационных химических источниках электрической энергии;
- получена полная математическая модель литий-ионных аккумуляторов, являющаяся основой для создания диагностических и прогностических моделей, в которой в отличие от известных моделей учитывается динамика физико-химических процессов.

**Практическая значимость работы.** Практическая значимость диссертационной работы:

- разработана методика диагностики и прогнозирования технического состояния авиационных литий-ионных аккумуляторов, позволяющая выявлять их предотказные состояния в процессе эксплуатации в составе авиационной аккумуляторной батареи;

- выполнена программная реализация методов современной неравновесной термодинамики с использованием модельно-ориентированного подхода (свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2018666596, № 2019616182);
- выполнена программная реализация методов численно-аналитического преобразования (свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2021614958, № 2021614877);
- на примере экспериментальных исследований типовых литий-ионных аккумуляторов серии Sony US18650VTC6 продемонстрирована технология получения математических моделей для диагностирования и прогнозирования фактической емкости, напряжения и температуры каждого элемента авиационных литий-ионных аккумуляторных батарей в процессе их эксплуатации с учетом старения.

**Апробация работы и использование результатов.** Результаты работы докладывались на:

- международной конференции «Инфо», г. Сочи, 2010 – 2014 гг, 2019 – 2021 гг.
- I международном симпозиуме «Компьютерные измерительные технологии», г. Москва, 2015 г.
- международном симпозиуме «Надежность и качество», г. Пенза, 2011, 2012, 2014, 2015, 2018, 2020 гг.
- всероссийской научно-технической конференции «Научные чтения по авиации, посвященные памяти Н.Е. Жуковского», г. Москва, 2013 – 2015 гг, 2019 г.
- научно-технической конференции «Электрификация летательных аппаратов», г. Москва, 2016 г.
- научном семинаре по проблемам авиационно-космической электроэнергетики им. академика В.С. Кулебакина, г. Москва, ИПУ РАН, 2017 г.
- семинаре по синергетике, г. Москва, МГУ им. М.В. Ломоносова, 2013 г.
- международной конференции молодых специалистов по микро/нанотехнологиям и электронным приборам «EDM», г. Новосибирск, 2019, 2021 гг.
- международной конференции «ПИЭР 2020», г. Новосибирск, 2020 г.
- международной конференции «Информационные технологии и инновации на транспорте», г. Орел, 2021 г.

**Публикации.** По теме исследования опубликовано 95 работ, отражающих основные положения исследования, среди которых – 3 монографии общим объемом 34,625 п.л. (из них 24,284 п.л. – лично автора), 30 публикаций в журналах, рекомендованных ВАК Минобрнауки России общим объемом 13,2505 п.л. (из них 9,45 п.л. – лично автора), 81 публикация в журналах и сборниках научных трудов общим объемом 39,625 п.л. (из них 25, 3 п.л. – лично автора).

**Структура и содержание работы** обусловлены концептуальной идеей, отражают поставленную цель и задачи исследования. Диссертационная работа состоит из введения, 6 глав, заключения, списка использованных источников из 355 наименований. Основной текст работы изложен на 293 страницах, включая 21 таблицу, 215 рисунков.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

В первой главе «Анализ существующих проблем эксплуатации авиационных химических источников электрической энергии» рассматриваются проблемы эксплуатации используемых и перспективных авиационных химических источников электрической энергии.

Разработка и внедрение новых видов химических источников электроэнергии (литий-ионных аккумуляторных батарей, водородных электрохимических генераторов, проточных батарей и др.), обладающих высокими удельными энергетическими свойствами, характери-

зуются более нестабильными физико-химическими процессами, являющимися причиной существенного снижения уровня безопасности полётов, что напрямую влияет на лётную годность ВС. Примером того является серия воспламенений литий-ионных аккумуляторных батарей на самолетах серии Боинг-787. Так, например, 16 января на Dreamliner, принадлежащем авиакомпании All Nippon Airways, все 8 элементов ЛИАБ были уничтожены вследствие теплового разгона, что привело к экстренной посадке самолета. На Boeing 787 в Бостоне были выявлены признаки аналогичного явления в загоревшемся аккумуляторе. Эксперты сообщили, что не выявили проблем, относящихся к качеству производства аккумуляторов; также NTSB сообщалось, перенапряжение не было причиной инцидента в Бостоне, поскольку напряжение не превышало предельного значения батареи 32 В, и зарядный блок прошел испытания. Причины теплового разгона установить не удалось. Аналогичные инциденты, обусловленные перегревом ЛИАБ, произошли 13 ноября 2017 года в самолете Boeing 787 United Airlines при подлете к аэропорту Шарль-де-Голль, 12 июля в самолете Boeing 787 Dreamliner в лондонском аэропорту Хитроу, в самолетах ANA в Японии, где ЛИАБ достигла максимального напряжения 31 В (ниже предела 32 В, как у Boston JAL 787), а затем у нее произошло внезапное необъяснимое падение напряжения почти до нуля.

Одним из путей решения описанных проблем возгорания аккумуляторов является использование более прочного корпуса, благодаря чему ЛИАБ стала на 84 кг тяжелее, что сводит на нет потенциал легкой батареи. Корпус не меняет характеристики батареи, и событие на рейсе United является явным признаком того, что он все еще летает с не диагностированной и нерешенной проблемой. Также использовались системы охлаждения (вентиляционные системы). Однако это тоже не помогло предотвратить тепловой разгон литий-ионных аккумуляторных батарей (инцидент 13 ноября 2017 года самолета Boeing 787 United Airlines при подлете к аэропорту Шарль-де-Голль).

Джефф Дан, профессор физики из Канадского университета Далхаузи, отметил, что сбои в работе батарей являются признаком проблемы внутри ячеек ЛИА. К этому же выводу пришли следователи NTSB, отметившие, что короткое замыкание в одной из ячеек аккумулятора, обслуживавшего вспомогательную силовую установку, привело к сильному перегреву и возникновению неконтролируемых химических реакций, которые каскадом перекинулись на другие ячейки аккумулятора и привели к его возгоранию.

Из вышеописанного возникает необходимость непрерывного контроля технического состояния литий-ионных аккумуляторов с целью предотвращения аварийных режимов.

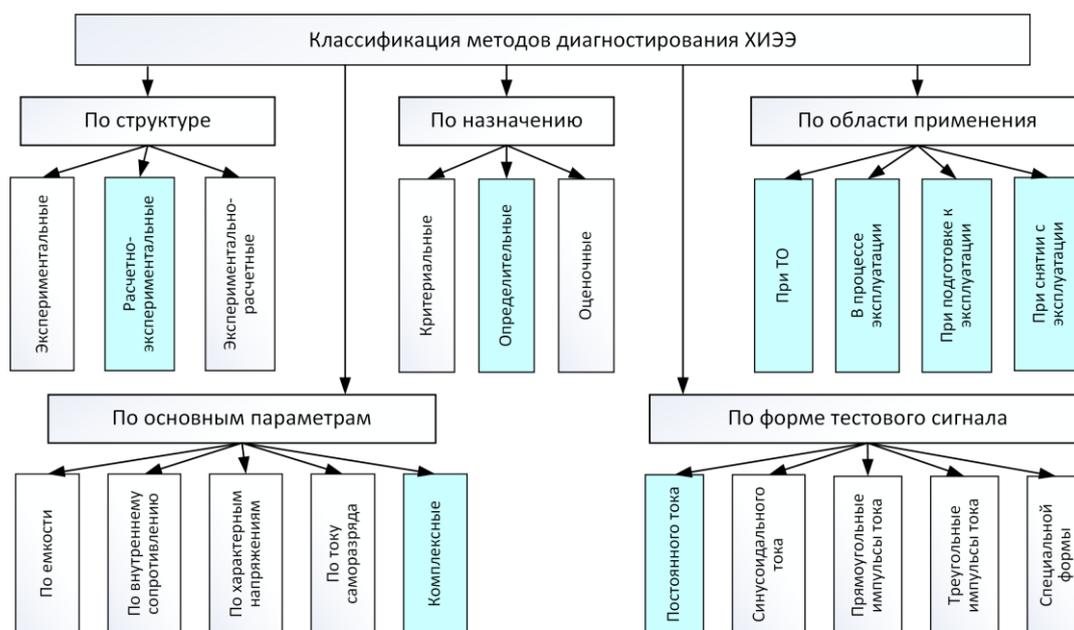
Аналогичное касается и водородно-воздушных топливных элементов. Проблемами эксплуатации водородно-воздушных топливных элементов с протонообменной мембраной являются: растворение катализатора, выделение перекиси водорода с последующим разрушением мембраны, набухание мембраны, высыхание мембраны, и т.д. Это также приводит к необходимости контроля технического состояния таких топливных элементов.

Для непрерывного контроля необходимы методы диагностики (рисунок 3), основанные на определении контрольных величин по наблюдаемым (выделены на рисунке 3).

Представленные методы диагностики химических источников электрической энергии подразумевают использование математической модели этих источников, позволяющей по наблюдаемым параметрам (в большинстве случаев напряжению, току и температуре) определять контрольные параметры, показанные на рисунке 3. В настоящее время существуют следующие методы построения моделей химических источников тока:

- эмпирический подход, основанный на использовании статистических данных по каждому режиму работы;
- подход, основанный на моделировании физико-химических процессов;
- подход, основанный на электрических схемах замещения.

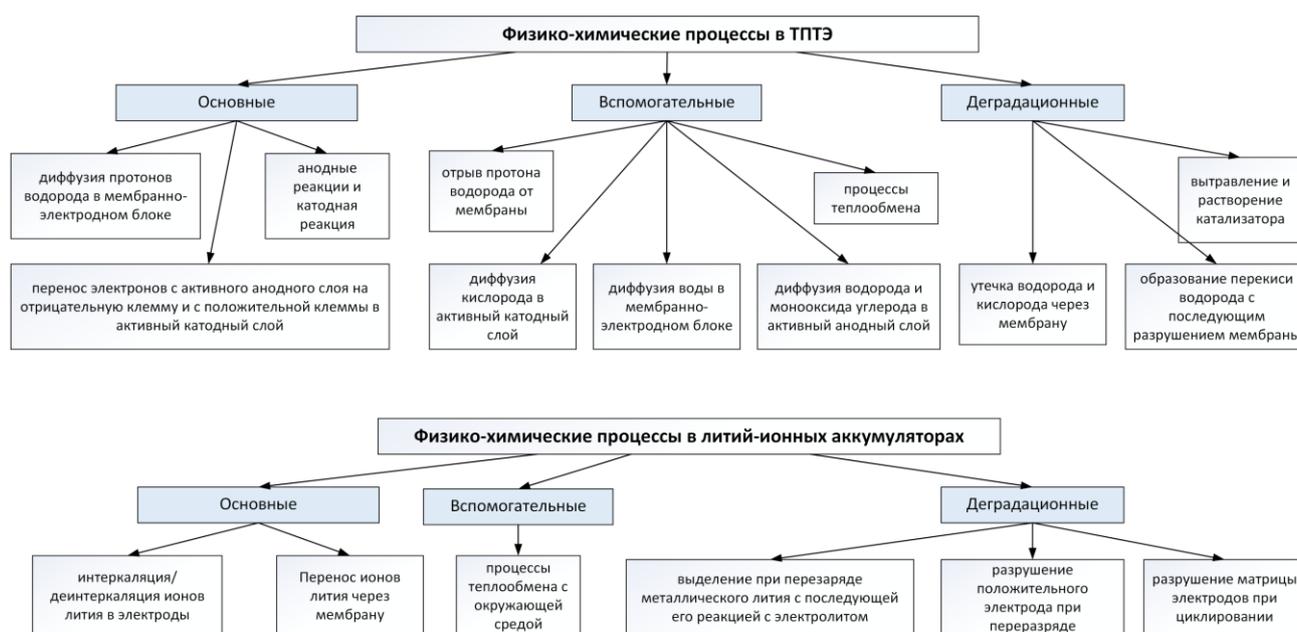
Основным достоинством эмпирического подхода, рассматривающего ХИЭЭ как черный ящик, является простота. Однако экстраполяция таких статистических моделей на другие режимы работы в общем случае некорректна. Описанного недостатка лишен подход, основанный на моделировании ФХП в ХИЭЭ, в соответствии с которым, определив из экспериментальных данных коэффициенты, входящие в уравнения ФХП в ХИЭЭ, мы получаем модель ХИЭЭ для любого режима его работы. В подавляющем большинстве случаев число таких параметров велико, и эти параметры сложно однозначно получить из экспериментальных данных.



**Рисунок 3 – Методы диагностики химических источников электрической энергии**

Отсюда возникает необходимость преобразования системы уравнений динамики ФХП в модель рассматриваемых ХИЭЭ, представляющую собой связь контролируемых параметров с наблюдаемыми. Метод, основанный на схемах замещения, заключается в построении электрических схем замещения, описывающих динамику наблюдаемых параметров ХИЭЭ.

Предлагаемый потенциально-поточковый метод, разработанный в рамках современной неравновесной термодинамики и применимый для моделирования физико-химических процессов различной природы, является развитием методов моделирования ХИЭЭ, основанных на электрохимической кинетике. Этот метод позволит учесть различные возможные нелинейные эффекты, сопровождающие процессы в ХИЭЭ различной природы (в том числе и в ЛИА и ТПТЭ (рисунок 4)).



**Рисунок 4 – Физико-химические процессы в перспективных химических источниках электрической энергии**

На основе потенциально-поточкового метода и предложенных Ланцовым методов численно-аналитического упрощения и преобразования сложной системы уравнений

автором разработан единый подход построения математических моделей перспективных ХИЭЭ на основе анализа процессов в них различной физической и химической природы и различной сложности.

Во второй главе «**Кинетическая теорема современной неравновесной термодинамики и потенциально-потокосый метод**» рассматривается получение модели физико-химических процессов в различных системах, в том числе и в перспективных авиационных ХИЭЭ, на основе экспериментальных данных методами современной неравновесной термодинамики, которая в отличие от молекулярно-кинетической теории, основывающейся на молекулярных моделях, базируется на экспериментально исследуемых свойствах веществ и процессов, а также на известных началах термодинамики (рисунок 5).

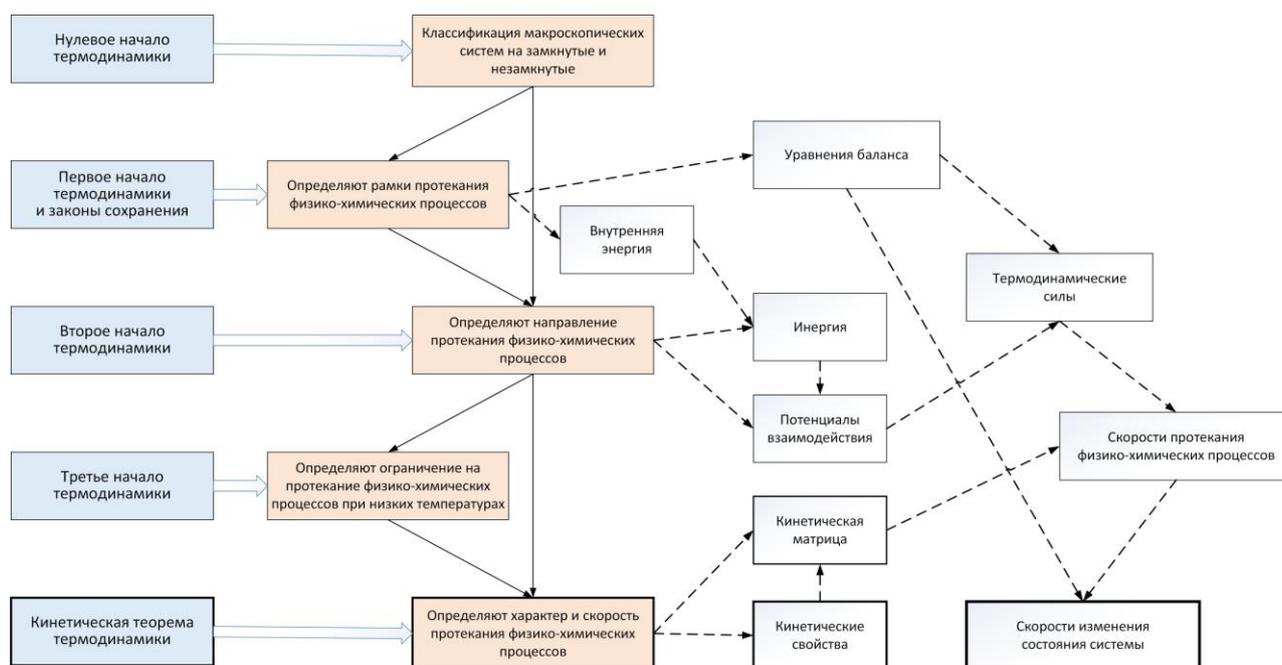


Рисунок 5 – Начала термодинамики

Так нулевое начало термодинамики постулирует, что любая физико-химическая система, находящаяся при фиксированных внешних условиях (например, изолированная система, изобарно-изотермическая система, изохорно-изотермическая система, и т.д.), приходит в состояние равновесия, из которого самопроизвольно выйти не может. В рамках современной неравновесной термодинамики состояние системы характеризуется параметрами состояния – физическими величинами, однозначно характеризующими состояние системы независимо от ее предыстории. Подклассом параметров состояния являются координаты состояния – такие параметры состояния, каждый отдельный физический процесс изменяет только один из этих параметров состояния. Первое начало термодинамики и прочие законы сохранения дают связь между координатами состояния системы (рисунок 5). Второе начало термодинамики указывает направление, в котором протекают физико-химические процессы в рамках законов сохранения и первого начала термодинамики (рисунок 5). Оно определяет функцию состояния энтропии, которая возрастает в замкнутой системе в результате протекания процессов в ней, функции состояния свободной энергии Гельмгольца, которая убывает в изохорно-изотермической системе, свободной энергии Гиббса, которая убывает в изобарно-изотермической системе в результате протекания процессов в ней. Отсюда, эти функции состояния, наряду с законами сохранения дают возможность определить термодинамические силы – причины и необходимые условия протекания физико-химических процессов. Помимо физико-химических процессов изменение параметров системы определяется и внешними потоками. Третье начало термодинамики дает точку начала отсчета энтропии или свободной энергии, через которую и определяются термодинамические силы, движущие физико-химические процессы в системе (рисунок 5). Однако термодинамические силы, как и внешние потоки, однозначно не определяют динамики протекания физико-химических процессов в системе; помимо последних факторов динамику этих процессов, движимых термодинами-

ческими силами в рамках законов сохранения энергии, определяют независимо от термодинамических сил и внешних потоков еще и кинетические свойства (рисунок 5).

К кинетическим свойствам относятся, например, энергии активации, определяющая протекание химических превращений, эффективных диаметр молекул, частота столкновений, пористость мембраны, определяющие процессы диффузии, и т.д. «Шкалой» кинетических свойств является положительно определенная кинетическая матрица, произведение которой на вектор столбец термодинамических сил дает вектор-столбец скоростей протекания физико-химических процессов – потенциально-потоковые уравнения физико-химических процессов:

$$\frac{\delta Q_{l,g}^{(nep)}}{dt} = \sum_{i=1}^{m_U} \sum_{j=i+1}^{m_U} \Delta A_{Ql,g}^{Ql,j} (\Delta X_{Ql,j} + \Delta X_{Ql,j}^{(cl)}) + \sum_{k=1}^{m_{\Delta z}} \Delta A_{Ql,g}^{\Delta z k} (\Delta X_{\Delta z k} + \Delta X_{\Delta z k}^{(cl)}), \quad g = l+1, m_U, \quad l = 1, m_U - 1, \quad (1)$$

$$\frac{\delta \Delta z_r}{dt} = \sum_{i=1}^{m_U} \sum_{j=i+1}^{m_U} \Delta A_{\Delta z r}^{Ql,j} (\Delta X_{Ql,j} + \Delta X_{Ql,j}^{(cl)}) + \sum_{k=1}^{m_{\Delta z}} \Delta A_{\Delta z r}^{\Delta z k} (\Delta X_{\Delta z k} + \Delta X_{\Delta z k}^{(cl)}), \quad r = 1, m_{\Delta z}, \quad (2)$$

где  $\delta Q^{(nep)}$  с индексами – перенесенные теплоты;  $\frac{\delta \Delta z}{dt}$  с индексами – скорости протекания ФХП (кроме процессов переноса теплоты);  $\Delta X$  с индексами – термодинамические силы;  $\Delta A$  с индексами – коэффициенты кинетической матрицы. Определив в силу потенциально-потоковых уравнений (1) и (2) скорости протекания ФХП, мы затем на основе законов сохранения (в том числе и первого начала термодинамики), которые можно записать в виде:

$$dz_k = \sum_{r=1}^{m_{\Delta z}} b_{k,r} \delta \Delta z_r + d^{(e)} z_k + (d^{(e)} z_k)_{cl}, \quad k = 1, m_z, \quad dU_i = \delta Q_i - \sum_{k=1}^{m_z} Z_{i,k} dz_k, \quad i = 1, m_U, \quad (3)$$

$$\delta Q_i = \sum_{j=i+1}^{m_U} \delta Q_{i,j}^{(nep)} - \sum_{j=1}^{i-1} \delta Q_{i,j}^{(nep)} + \sum_{k=1}^{m_{\Delta z}} \beta_{i,k} \delta Q_k^{(нек)} + \delta Q_i^{(e)} + (\delta Q_i^{(e)})_{cl}, \quad i = 1, m_U, \quad (4)$$

$$\delta Q_k^{(нек)} = \left( \sum_{j=1}^{m_z} \left( \sum_{l=1}^{m_U} Z_{l,j} + \sum_{l=m_U+1}^{m'_U} Z_{l,j} \right) b_{j,k} \right) \delta \Delta z_k, \quad k = 1, m_{\Delta z}, \quad (5)$$

определим скорости изменения координат состояния в соответствие с:

$$\frac{dz_k}{dt} = \sum_{r=1}^{m_{\Delta z}} b_{k,r} \frac{\delta \Delta z_r}{dt} + \frac{d^{(e)} z_k}{dt} + \left( \frac{d^{(e)} z_k}{dt} \right)_{cl}, \quad k = 1, m_z, \quad \frac{dU_i}{dt} = \frac{\delta Q_i}{dt} - \sum_{k=1}^{m_z} Z_{i,k} \frac{dz_k}{dt}, \quad i = 1, m_U, \quad (6)$$

$$\frac{\delta Q_i}{dt} = \sum_{j=i+1}^{m_U} \frac{\delta Q_{i,j}^{(nep)}}{dt} - \sum_{j=1}^{i-1} \frac{\delta Q_{i,j}^{(nep)}}{dt} + \sum_{k=1}^{m_{\Delta z}} \beta_{i,k} \frac{\delta Q_k^{(нек)}}{dt} + \frac{\delta Q_i^{(e)}}{dt} + \left( \frac{\delta Q_i^{(e)}}{dt} \right)_{cl}, \quad i = 1, m_U, \quad (7)$$

$$\frac{\delta Q_k^{(нек)}}{dt} = \left( \sum_{j=1}^{m_z} \left( \sum_{l=1}^{m_U} Z_{l,j} + \sum_{l=m_U+1}^{m'_U} Z_{l,j} \right) b_{j,k} \right) \frac{\delta \Delta z_k}{dt}, \quad k = 1, m_{\Delta z}, \quad (8)$$

где  $U$  с индексами – внутренние энергии фаз в системе, веществ в одной фазе, имеющих разные температуры (в общем случае неравновесные), внутренние энергии имеющих разные температуры (в общем случае неравновесные) поступательной, вращательной и колебательной степеней свободы молекул вещества (внутренние энергии тоже являются координатами состояния);  $z$  с индексами – прочие координаты состояния (кроме внутренних энергий);  $Q$  с индексами – количества теплот, полученных фазами, веществами в одной фазе, имеющими разные температуры, внутренние энергии имеющих разные температуры (неравновесные) поступательной, вращательной и колебательной степеней свободы молекул вещества;  $Z$  с верхними и нижними индексами – потенциалы взаимодействия;  $\delta Q^{(нек)}$  с индексами – некомпенсированные теплоты, выделившиеся в результате протекания физико-химических процессов;  $\delta Q^{(e)}$  с индексами – поступившие извне теплоты фазам в системе, веществам в одной фазе, имеющим разные температуры, а также имеющим разные температуры поступательной, вращательной и колебательной степеням свободы молекул вещества;  $\beta$  с индексами – распределение выделенных теплот по фазам в системе, веществам в одной фазе, имеющим разные температуры, а также имеющим разные температуры поступательной, враща-

тельной и колебательной степеням свободы молекул вещества;  $b$  с индексами - коэффициенты баланса. Температуры (в общем случае неравновесные) фаз в системе, веществ в одной фазе, имеющих разные температуры, температуры имеющих разные температуры поступательной, вращательной и колебательной степеней свободы молекул вещества также относятся к потенциалам взаимодействия.

Введя функцию состояния инергии:

$$F = U - T^* S,$$

где  $U$  - внутренняя энергия системы, а  $S$  - энтропия (в общем случае нелинейная) системы, имеющую смысл работы, которую можно извлечь из системы, в том числе и с использованием гипотетических машин Карно, берущих тепло от фаз в системе, веществ в одной фазе, имеющих разные температуры, температуры имеющих разные температуры поступательной, вращательной и колебательной степеней свободы молекул вещества в рассматриваемой физико-химической системы и отдающих теплоту резервуару, имеющему температуру  $T^*$ , термодинамические силы определим, учитывая определение термодинамических сил:

$$dF = - \sum_{i=1}^{m_U} \sum_{j=i+1}^{m_U} \Delta X_{Q_{i,j}} \delta Q_{i,j}^{(nep)} - \sum_{r=1}^{m_{\Delta z}} \Delta X_{z,r} \delta \Delta z_r;$$

отсюда, учитывая (3) – (5), термодинамические силы определяются через потенциалы взаимодействия в соответствие с:

$$\Delta X_{Q_{i,j}} = \frac{T^*}{T_i} - \frac{T^*}{T_j}, \quad j = i+1, m_U, \quad i = 1, m_U - 1, \quad (9)$$

$$\Delta X_{z,r} = \left( \sum_{i=1}^{m_U} \beta_{i,r} \frac{T^*}{T_i} \right) \sum_{k=1}^{m_z} \left( \sum_{i=1}^{m_U} Z_{i,k} + \sum_{i=m_U+1}^{m'_U} Z_{i,k}^\circ \right) b_{k,r}, \quad r = 1, m_{\Delta z}, \quad (10)$$

где  $T$  с индексами – температуры (в общем случае неравновесные) фаз в системе, веществ в одной фазе, имеющих разные температуры, температуры имеющих разные температуры поступательной, вращательной и колебательной степеней свободы молекул вещества.

Наличие упомянутых кинетических свойств, определяющих динамику протекания физико-химических процессов, движимых термодинамическими силами в рамках первого начала термодинамики и законов сохранения в направлении, указываемом вторым началом термодинамики, не вытекает из известных первого, второго, третьего и нулевого начал термодинамики. Соответственно это относится к некоторому дополнительному положению неравновесной термодинамики – кинетической теореме современной неравновесной термодинамики (рисунок 5). Потенциально-потокковые уравнения (1) и (2) – математическая форма записи кинетической теоремы современной неравновесной термодинамики.

Для доказательства кинетической теоремы современной термодинамики было выполнено:

1. Обзор особенностей динамики физико-химических процессов различной природы.
2. На основе этого обзора сделан вывод, что любая физико-химическая система обладает свойствами, называемыми кинетическими, которые определяют динамику этих процессов, движимых термодинамическими силами, независимо от последних.
3. Математически доказана возможность введения положительно определенной кинетической матрицы, произведение которой на вектор-столбец термодинамических сил дает вектор-столбец скоростей протекания физико-химических процессов в системе.

Также было показано, что в частных случаях потенциально-потокковые уравнения (1) и (2) сводятся к соответствующим моделям динамики физико-химических процессов (при задании соответствующих функций состояния для обратимых и необратимых составляющих кинетической матрицы), в частности:

- к закону действующих масс, кинетике Марселино-де-Донде в случае химических превращений;
- законам диффузии, термодиффузии в случае процессов диффузии;
- закону теплопроводности Фурье, закону теплопередачи Ньютона-Рихмана в случае процессов передачи теплоты;

- законам кинетики фазовых переходов в случае фазовых переходов;
- теории Онзагера в случае линейной неравновесной термодинамики.

Из сказанного вытекает (схематично показано на рисунке 5), что начала термодинамики, а также кинетическая теорема современной неравновесной термодинамики определяют факторы протекания физико-химических процессов и соответственно динамики параметров системы, имеющие практическое значение, показанные на рисунке 6.

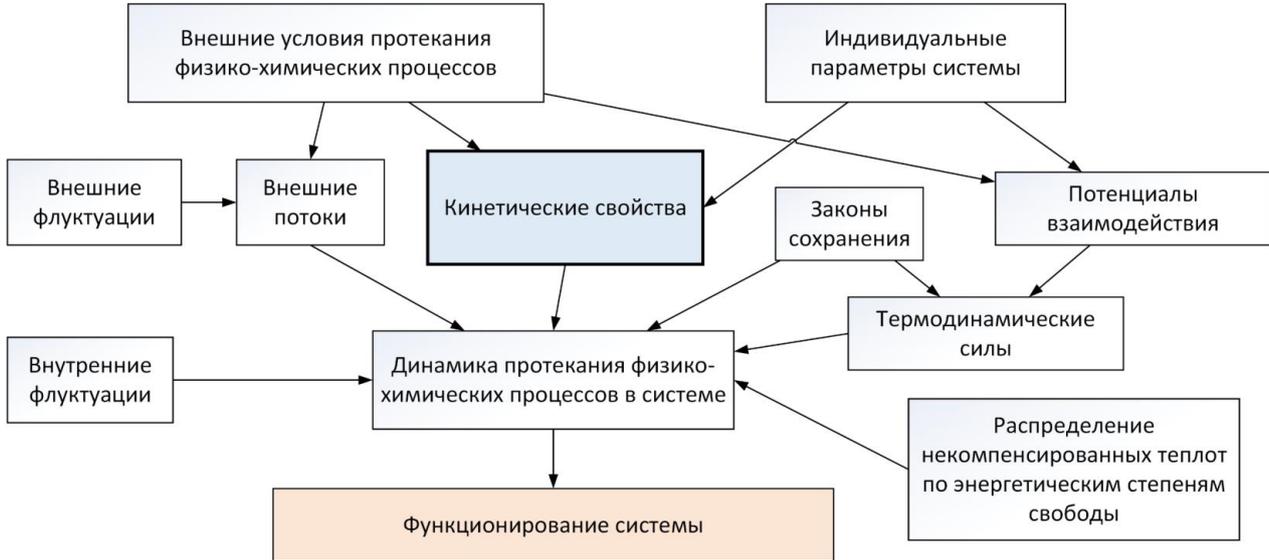


Рисунок 6 – Факторы, определяющие протекание физико-химических процессов в системе (с позиций современной термодинамики)

Кинетическая матрица определяется через ее обратимую и необратимую составляющие согласно алгоритму:

1. кинетическая матрица  $\Delta \mathbf{A} = \Delta \mathbf{A}(\{U_k\}_{k=1}^{m_U}, \{z_k\}_{k=1}^{m_z})$  представляется в блочном виде:

$$\Delta \mathbf{A} = \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{A}_1 & \boldsymbol{\alpha}_1 \Delta \mathbf{A}_{m_{\Delta z}-1} \\ \Delta \mathbf{A}_{m_{\Delta z}-1} \boldsymbol{\gamma}_1 & \Delta \mathbf{A}_{m_{\Delta z}-1} \end{pmatrix},$$

где  $\Delta \mathbf{A}_{m_{\Delta z}-i} = \Delta \mathbf{A}_{m_{\Delta z}-i}(\{U_k\}_{k=1}^{m_U}, \{z_k\}_{k=1}^{m_z})$ ,  $i = 1, m_{\Delta z} - 2$

$$\Delta \mathbf{A}_{m_{\Delta z}-i} = \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{A}_{i+1} & \boldsymbol{\alpha}_{i+1} \Delta \mathbf{A}_{m_{\Delta z}-i-1} \\ \Delta \mathbf{A}_{m_{\Delta z}-i-1} \boldsymbol{\gamma}_{i+1} & \Delta \mathbf{A}_{m_{\Delta z}-i-1} \end{pmatrix}, i = 1, m_{\Delta z} - 2, \Delta \mathbf{A}_1 = \Lambda_{m_{\Delta z}},$$

где  $\boldsymbol{\alpha}_i$ ,  $i = 1, m_{\Delta z} - 1$  - обратимые составляющие кинетической матрицы, характеризующие увлечение одного процесса другим процессом;  $\boldsymbol{\gamma}_i$ ,  $i = 1, m_{\Delta z} - 1$  - обратимые составляющие кинетической матрицы, характеризующие эквивалентность одной термодинамической силы другой;  $\Lambda_i > 0$ ,  $i = 1, m_{\Delta z}$  - необратимые составляющие кинетической матрицы, характеризующие скорости протекания физико-химических процессов.

2. Определяем приведенную обратимую составляющую КМ простых подсистем  $\bar{\boldsymbol{\alpha}}_i = \bar{\boldsymbol{\alpha}}_i(\{U_k\}_{k=1}^{m_U}, \{z_k\}_{k=1}^{m_z})$ ,  $i = 1, m_{\Delta z} - 1$ :

$$\bar{\boldsymbol{\alpha}}_i = (\boldsymbol{\alpha}_i \Delta \mathbf{A}_{m_{\Delta z}-i} + \boldsymbol{\gamma}_i^T \Delta \mathbf{A}_{m_{\Delta z}-i}^T (\Delta \mathbf{A}_{m_{\Delta z}-i} + \Delta \mathbf{A}_{m_{\Delta z}-i}^T)^{-1}), i = 1, m_{\Delta z} - 1.$$

3. Определяем диагональные коэффициенты  $\Delta \bar{\mathbf{A}}_i = \Delta \bar{\mathbf{A}}_i(\{U_k\}_{k=1}^{m_U}, \{z_k\}_{k=1}^{m_z})$ ,  $i = 1, m_{\Delta z} - 1$ , кинетической матрицы  $\Delta \mathbf{A}$  системы:

$$\Delta \bar{\mathbf{A}}_i = \Lambda_i + \bar{\boldsymbol{\alpha}}_i \Delta \mathbf{A}_{m_{\Delta z}-i} \bar{\boldsymbol{\alpha}}_i^T, i = 1, m_{\Delta z} - 1.$$

4. Применяя итерационно для  $i = 1, m_{\Delta z} - 1$  пп. 1 – 3, получим кинетическую матрицу (функциональное разложение для кинетической матрицы)  $\Delta \mathbf{A}$  системы.

Обратимые составляющие кинетической матрицы  $\boldsymbol{\alpha}_i$ ,  $\boldsymbol{\gamma}_i$ ,  $i = 1, m_{\Delta z} - 1$  характеризуют перекрестные эффекты, в случае отсутствия перекрестных эффектов соответствующие обрати-

мые составляющие равны нулю, а необратимые составляющие  $\Lambda_i > 0$ ,  $i = 1, m_{\Delta_z}$  – скорости протекания физико-химических процессов.

Из рисунка 6 и (1) – (10) нетрудно видеть, что для получения численного решения потенциально-поточных уравнений (1) – (10) необходимо задать функциональные разложения (в соответствие с теоремой Вейерштрасса о равномерном приближении функции полиномами) для:

- потенциалов взаимодействия  $Z_{i,k}$ ,  $i = 1, m_U$ ,  $Z_{i,k}^\circ$ ,  $i = m_U + 1, m'_U$ ,  $k = 1, m_z$  удовлетворяющие условию полного дифференциала:

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial}{\partial U_j} \frac{1}{T_i} \right)_z &= \left( \frac{\partial}{\partial U_i} \frac{1}{T_j} \right)_z, \quad j = i + 1, m_U, \quad i = 1, m_U - 1; \\ \left( \frac{\partial}{\partial z_k} \frac{1}{T_i} \right)_U &= \left( \frac{\partial}{\partial U_i} \left( \sum_{j=1}^{m_U} \frac{Z_{j,k}}{T_j} \right) \right)_z, \quad i = 1, m_U, \quad k = 1, m_z; \\ \left( \frac{\partial}{\partial z_q} \left( \sum_{j=1}^{m_U} \frac{Z_{j,k}}{T_j} \right) \right)_U &= \left( \frac{\partial}{\partial z_k} \left( \sum_{j=1}^{m_U} \frac{Z_{j,q}}{T_j} \right) \right)_U, \quad q = k + 1, m_z, \quad k = 1, m_z; \\ \frac{\partial Z_{i,k}^\circ}{\partial z_q} &= \frac{\partial Z_{i,q}^\circ}{\partial z_k}, \quad q = k + 1, m_z, \quad k = 1, m_z, \quad i = m_U + 1, m'_U; \end{aligned}$$

температура (абсолютная, в общем случае неравновесная) всегда положительная;

- обратимых составляющих кинетической матрицы  $\alpha_i$ ,  $\gamma_i$ ,  $i = 1, m_{\Delta_z} - 1$ ; в случае отсутствия соответствующих перекрестных эффектов обратимые составляющие тождественно равны нулю;
- необратимых составляющих кинетической матрицы  $\Lambda_i > 0$ ,  $i = 1, m_{\Delta_z}$ ;
- распределения некомпенсированных теплот  $\beta_{i,k} > 0$ ,  $i = 1, m_U$ ,  $k = 1, m_{\Delta_z}$ , удовлетворяющих условию положительности и нормировки:

$$\sum_{i=1}^{m_U} \beta_{i,k} = 1, \quad k = 1, m_{\Delta_z}.$$

Причем, если какие-то составляющие вышеуказанных функций состояния для свойств веществ и процессов известны (из ранее проводившихся экспериментальных исследований, из микроскопической теории), то эти составляющие должны быть включены в вышеуказанные функциональные разложения. Также необходимо знать коэффициенты баланса  $b_{k,r}$ ,  $k = 1, m_z$ ,  $r = 1, m_{\Delta_z}$ . Из сказанного выше следует, что система потенциально-поточных уравнений динамики физико-химических процессов в рассматриваемой системе формируется в соответствие с алгоритмом, показанном на рисунке 7.

Записав в соответствии с алгоритмом, показанном на рисунке 7, уравнения динамики физико-химических процессов, выполнив наложенные на функциональные разложения для свойств веществ и процессов описанные выше ограничения, мы получим класс моделей динамики физико-химических процессов, гарантированно не противоречащих законам термодинамики, а также вбирающих в себя некоторые физические особенности протекания этих процессов. Такие модели максимально полно моделируют различные аспекты динамик физико-химических процессов в различных экземплярах рассматриваемой системы (в том числе и все возможные нелинейные эффекты). Далее из имеющихся экспериментальных данных оцениваем в общем случае диапазоны этих коэффициентов с использованием методов Монте-Карло. Использование методов Монте-Карло обусловлено большим числом исследуемых параметров. Затем в полученных диапазонах коэффициентов выполняем численно-аналитическое преобразование системы уравнений динамики процессов. Так мы получим модель рассматриваемой системы, позволяющую по наблюдаемым параметрам определять ее контролируемые параметры.

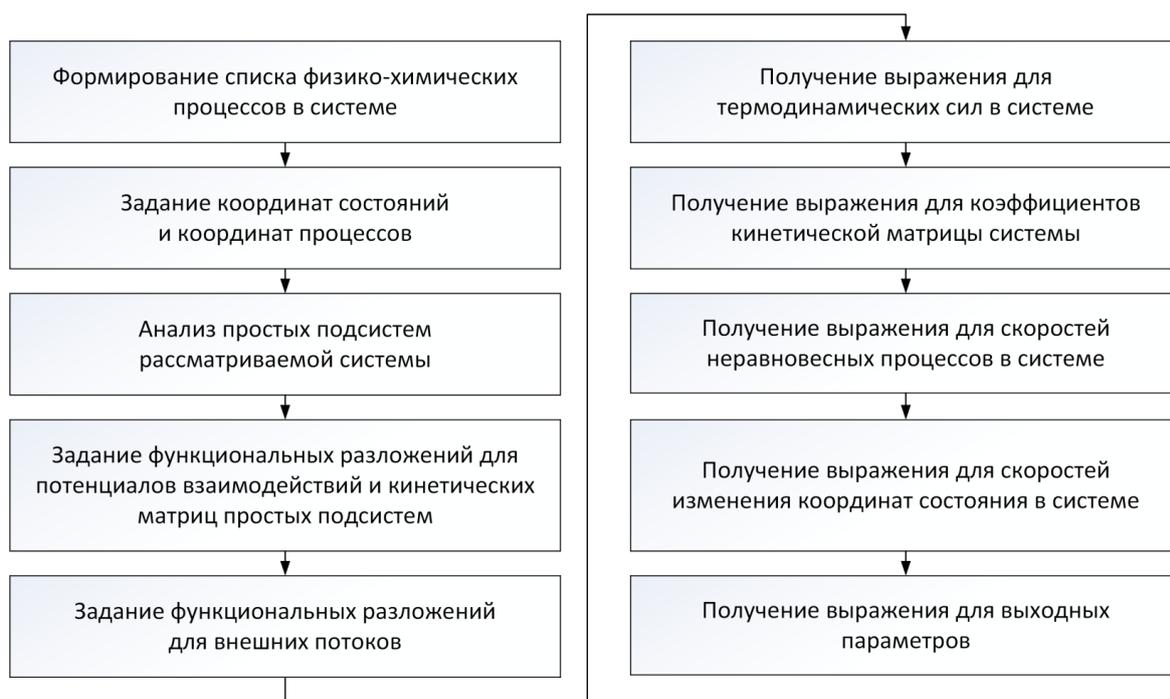


Рисунок 7 – Формирование уравнений динамик физико-химических процессов потенциально-потоковым методом

Такой подход позволяет строить модели систем, в том числе и перспективных авиационных химических источников электрической энергии (литий-ионных аккумуляторов и твердополимерных топливных элементов с протонообменной мембраной), на основе имеющихся экспериментальных данных с максимальным учетом различных особенностей протекания физико-химических процессов в этих системах.

В третьей главе «**Численно-аналитическое построение модели из уравнений, полученных потенциально-потоковым методом, для решения задач диагностики и прогнозирования**» рассматривается преобразование системы потенциально-потоковых уравнений большой размерности к моделям, представляющим собой связь контролируемых величин с наблюдаемыми; в общем случае эти модели строятся с точностью до параметров, определяемых из экспериментальных исследований лабораторных систем. И контролируемые, и наблюдаемые величины определяются координатами состояния, свойствами веществ и процессов (рисунок 8).

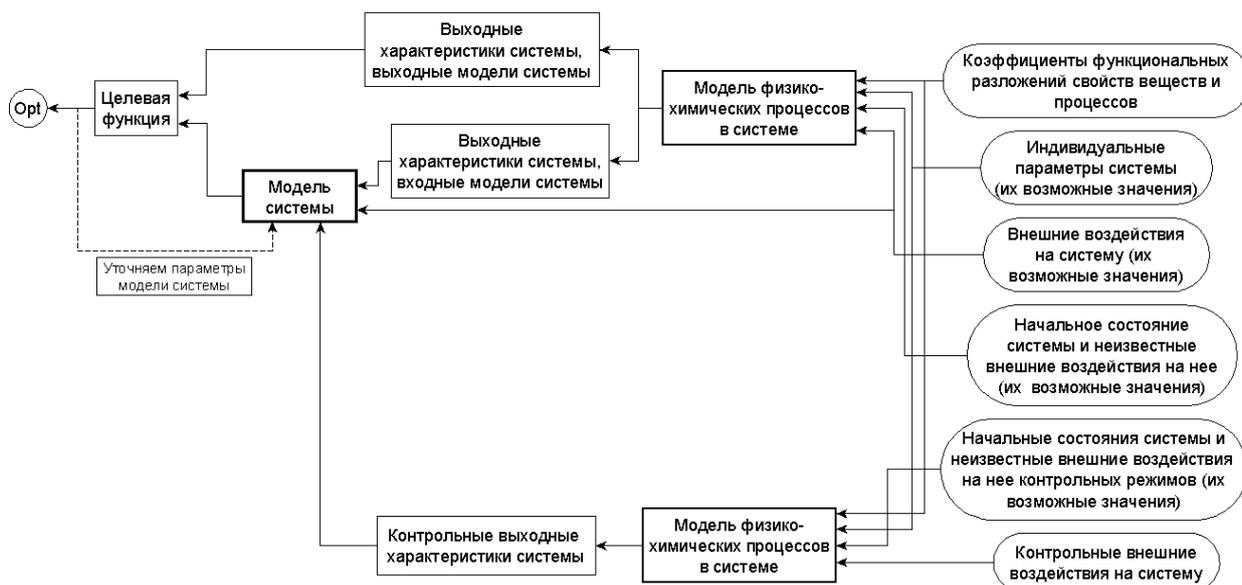


Рисунок 8 – Численно-аналитическое преобразование системы потенциально-потоковых уравнений

Описанное преобразование потенциально-поточковых уравнений осуществляется методами Монте-Карло. В результате этого преобразования модели динамики физико-химических процессов в системе (рисунок 8) в полученную модель исследуемой системы не входят коэффициенты функциональных разложений, координаты состояния, а входят только наблюдаемые и контролируемые параметры.

Перед таким численно-аналитическим преобразованием системы потенциально-поточковых уравнений необходимо также методами Монте-Карло оценить диапазоны коэффициентов функциональных разложений свойств веществ и процессов (рисунок 9).

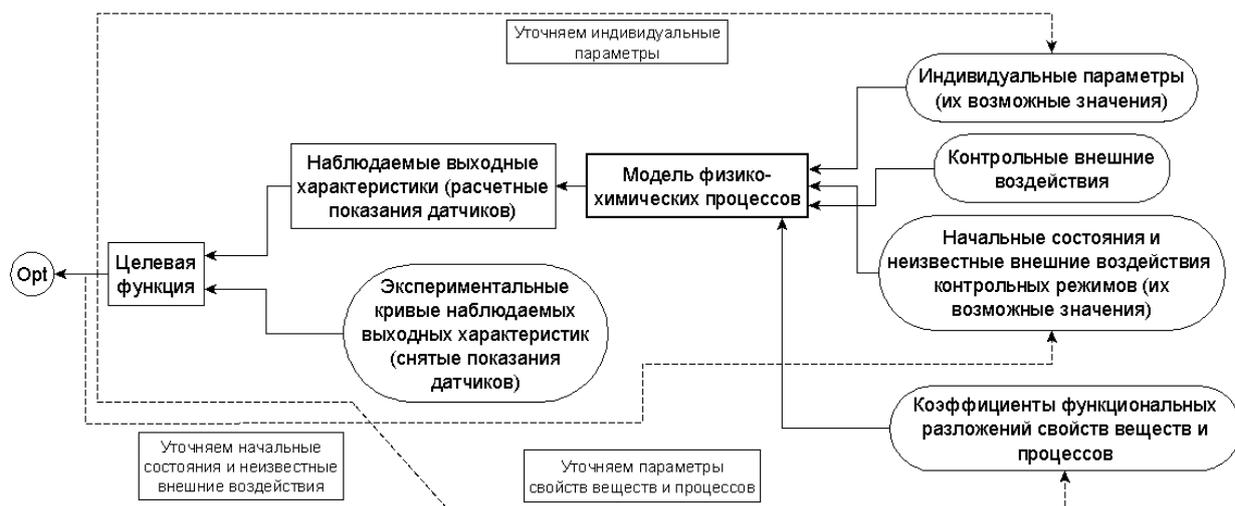


Рисунок 9 - Оценка из экспериментальных данных коэффициентов функциональных разложений

В результате численно-аналитических преобразований потенциально-поточковых уравнений динамики физико-химических процессов получают модели рассматриваемой системы (в том числе и перспективных ХИЭЭ), которые в общем случае запишутся в виде:

$$\mathbf{v}_y(t) = \mathbf{g}(\mathbf{x}_y(t), \mathbf{x}_z(t), \mathbf{x}_s(t), \mathbf{q}) + \mathbf{e}_y(t), \quad \mathbf{x}_y(t_0) = \tilde{\mathbf{g}}(\mathbf{x}_z(t_0), \mathbf{x}_s(t_0), \mathbf{q}) + \mathbf{e}_y, \quad (11)$$

$$\mathbf{v}_z(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}_z(t), \mathbf{x}_s(t), \mathbf{q}) + \mathbf{e}_z(t), \quad (12)$$

где  $\mathbf{v}_y(t)$  – старшие производные ненаблюдаемых характеристик системы  $\mathbf{y}(t)$  рассматриваемой ФХС;  $\mathbf{x}_z(t)$  – наблюдаемые характеристики системы  $\mathbf{z}(t)$  и их младшие производные по времени;  $\mathbf{x}_y(t)$  – ненаблюдаемые характеристики системы  $\mathbf{y}(t)$  и их младшие производные;  $\mathbf{x}_s(t)$  – известные внешние воздействия  $\mathbf{s}(t)$  и их производные;  $\mathbf{q}$  – параметры математической модели рассматриваемой физико-химической системы, имеющие фиксированное значение для конкретного экземпляра этой системы и различны для разных экземпляров системы (определяются из контрольных испытаний системы и из испытаний лабораторных систем);  $\mathbf{v}_z(t)$  – старшие производные наблюдаемых параметров системы  $\mathbf{z}(t)$ ;  $\mathbf{e}_y(t)$ ,  $\mathbf{e}_z(t)$  – составляющие шума, причем:

$$\|\mathbf{e}_y(t)\| \ll \|\mathbf{v}_y(t)\|, \quad \|\mathbf{e}_y\| \ll \|\mathbf{x}_y(t_0)\|, \quad \|\mathbf{e}_z(t)\| \ll \|\mathbf{v}_z(t)\|,$$

где  $\|\cdot\|$  – евклидова норма. Производные по времени наблюдаемых и контролируемых характеристик системы, входящие в (11) и (12), могут быть конечно-разностными; сами эти параметры могут быть также как непрерывными, так и дискретными. Соответственно в (11) и (12) могут также входить и параметры динамик наблюдаемых и контролируемых характеристик рассматриваемой системы.

Затем, получив модель (11) и (12) рассматриваемой системы (в частности, авиационных перспективных ХИЭЭ) мы, используя статистику испытаний различных образцов этих ХИЭЭ рассматриваемой марки, получаем методами теории вероятностей из полученной модели в общем случае вероятностную модель ХИЭЭ рассматриваемой марки.

Необходимость получения вероятностной модели обусловлена тем, что не всегда в условиях эксплуатации возможно измерить величины, являющиеся входными полученной модели из потенциально-потокowych уравнений. Эти вероятностные модели непосредственно используются для решения задач управления, технической эксплуатации, выбора оптимальных параметров и т.д.

Для построения модели из потенциально-потокowych уравнений осуществляется в общем случае упрощение потенциально-потоковой модели путем ее декомпозиции, а также построение модели рассматриваемой системы по частям.

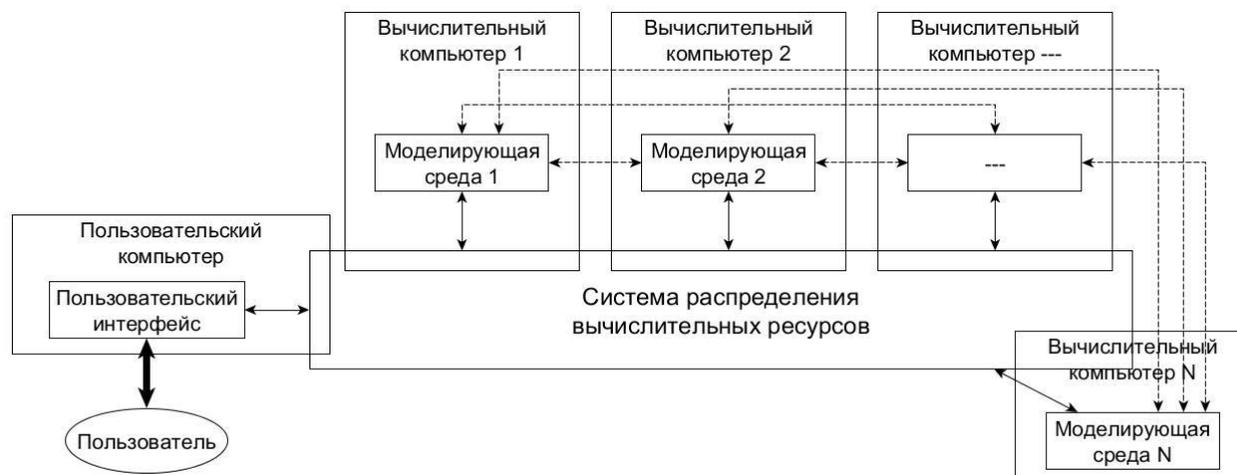
В четвертой главе «**Программная реализация методов построения диагностических и прогностических математических моделей физико-химических систем**» рассматривается распределенная программная реализация потенциально-потокowego метода в виде модельно-ориентированного подхода, а также методов численно-аналитического преобразования потенциально-потокowych уравнений, расчета вероятностных характеристик (на основе имеющейся статистики испытаний различных экземпляров объектов рассматриваемой системы), построения модели для этих вероятностных характеристик.

Функционал распределенной программной реализации:

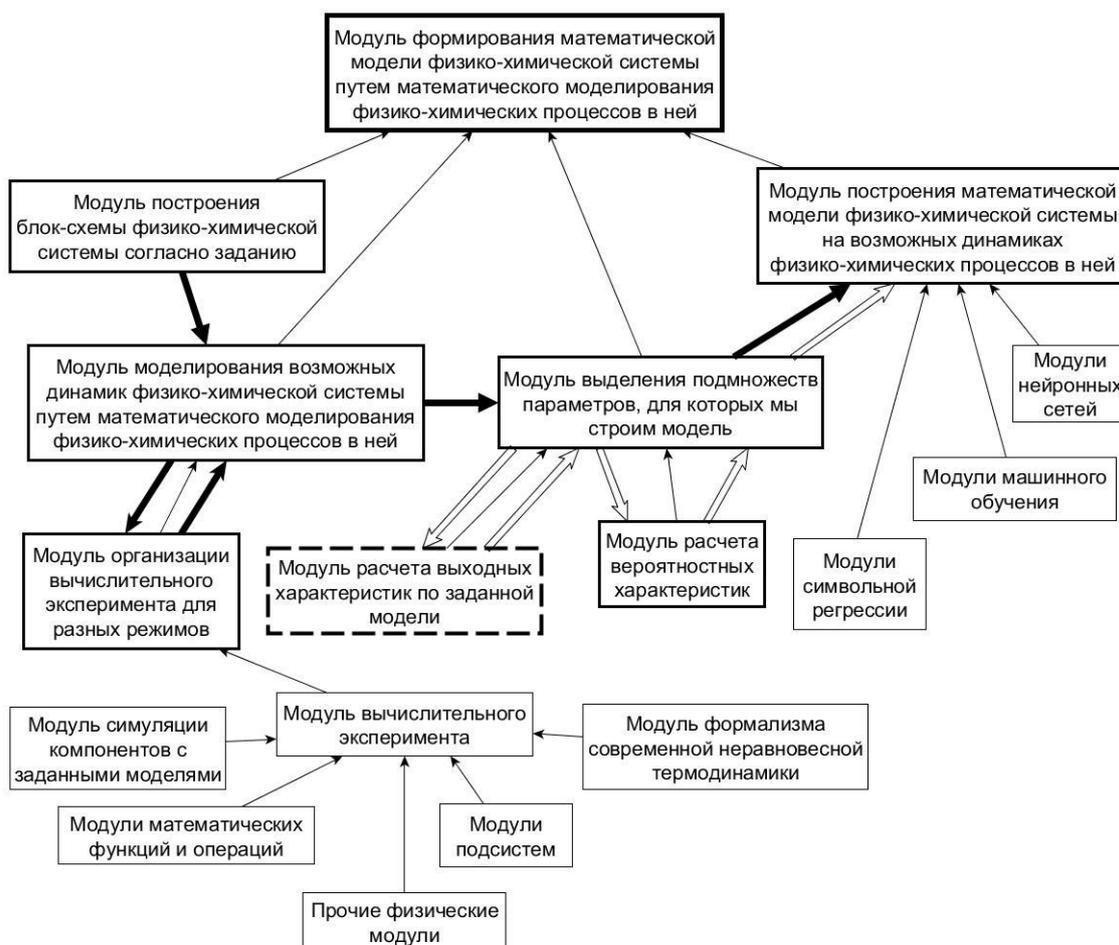
- построение диагностических и прогностических моделей заданных пользователем систем различной физической и химической природы (в том числе и химических источников электрической энергии);
- расчет вероятностных характеристик и построение модели для этих характеристик заданных пользователем систем различной физической и химической природы (в том числе и химических источников электрической энергии);
- управление базами данных (в общем случае распределенных, интеллектуальных):
  - базой данных диаграмм ФХП (в подсистемах) на основе блоков, реализующих формализм современной неравновесной термодинамики;
  - базой данных аналитических выражений, с использованием которых задаются с точностью до определяемых коэффициентов модели систем и функциями состояния для свойств веществ и процессов;
  - базой данных статистик результатов испытаний экземпляров конкретной пользовательской системы.

Использование распределенных и интеллектуальных баз данных дает возможность, например, формировать список процессов, а также задавать свойства веществ и процессов в зависимости от химического состава системы.

С целью распределенной программной реализации представленной методологии необходимо последнюю разбить на подзадачи, каждая из которых выполняется на отдельном вычислительном узле (рисунок 10). С этой целью на каждом вычислительном узле устанавливается вычислительная среда; каждый вычислительный узел контролирует система распределения вычислительных ресурсов (рисунки 10). Решение каждой такой подзадачи осуществляется с использованием библиотек (рисунок 11), а постановка и распределение подзадач по вычислительным узлам – с использованием библиотек (рисунок 12).



**Рисунок 10 – Распределенная программная реализация методологии построения математической модели системы из потенциально-потокowych уравнений**



**Рисунок 11 – Библиотеки для решения подзадач задачи построения модели системы на основе моделирования процессов в ней потенциально-потоквым методом.**  
Стрелками указано направление вызова библиотек



**Рисунок 12 – Библиотеки для постановки и распределения подзадач.**  
Стрелками указано направление вызова библиотек

Согласованное решение подзадач на вычислительных узлах осуществляется благодаря обмену сообщениями (MPI-интерфейс), обеспечиваемому связующим программным обеспечением и возможно вычислительной средой на каждом вычислительном узле. В роли вычислительных сред могут выступать, например, MatLab, Scilab, поддерживающие блочное моделирование динамики (модельно-ориентированный подход). За обмен сообщениями отвечает связующее программное обеспечение.

Из рисунка 10 нетрудно видеть, что такая распределенная программная реализация является горизонтально масштабируемой. Отсюда следует, что чем больше вычислительных узлов, тем более трудоемкую задачу (в плане числа физико-химических процессов и числа координат состояния) можно решить.

Реализация методов современной неравновесной термодинамики осуществляется с использованием модельно-ориентированного подхода в виде блочной диаграммы. В нее входят блоки физико-химических процессов, реализующие потенциально-потокосые уравнения, блоки термодинамических сил, реализующие вычисление термодинамических сил через потенциалы взаимодействия, блоки потенциалов взаимодействия, блоки координат состояния, реализующие уравнения баланса. Также входят математические блоки, реализующие математические функции, с помощью которых синтезируются уравнения состояния.

В пятой главе «Технология формирования и применения рабочей диагностической модели литий-ионного аккумулятора» рассматривается технология построения модели физико-химических процессов в ЛИА серии Sony US18650VTC6 и оценка диапазонов параметров этой модели на основе характерных разрядных кривых этого ЛИА (рисунок 13), основанная на вышеописанной методике построения математических моделей различных систем путем анализа физико-химических процессов в них.

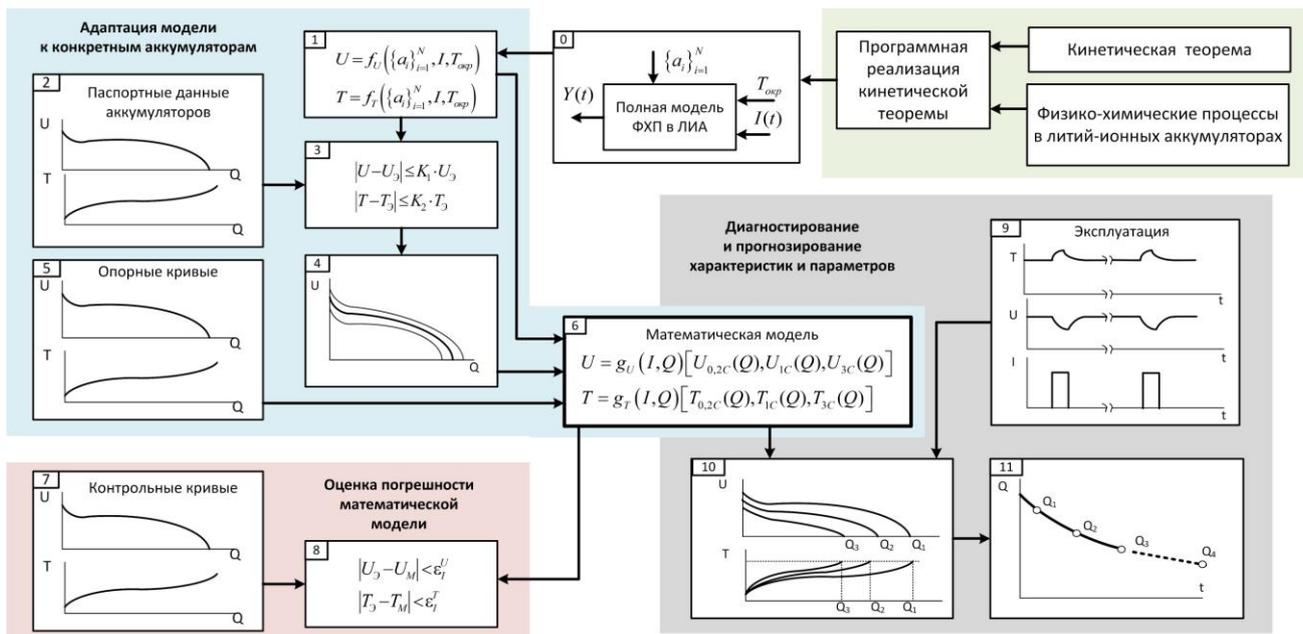


Рисунок 13 - Технология построения математической модели литий-ионного аккумулятора

Технология состоит из последовательности ряда этапов, которые в общем случае должны выполняться автоматизированной системой ввиду большого объема данных и преобразований. В данной работе этапы технологии реализованы в полуавтоматическом режиме и опираются на разработанные автором программные модули.

*Нулевой этап* посвящен получению полной математической модели физико-химических процессов в ЛИА, которая в программном комплексе формируется в виде блочной диаграммы (рисунок 14). В такой модели динамики физико-химических процессов в ЛИА учитываются основные токообразующие процессы в ЛИА:

- интеркаляция/деинтеркаляция ионов лития в электроды;
- перенос ионов лития через электролит.

Также учитываются процессы тепловыделения, контактные ЭДС между активными массами электродов и клеммами. В диаграмму (рисунок 14) в виде суперблоков входят функции состояния для:

- ЭДС двойных слоев;
- коэффициента интеркаляции ионов лития в электроды;
- коэффициента диффузии ионов лития через мембрану;
- температуры ЛИА, заданной в дифференциальном виде, используя тепловые эффекты ФХП в ЛИА, а также теплоемкость ЛИА.

Емкости двойных слоев, теплоемкость аккумулятора, берем постоянными. Составляющие ЭДС, обусловлены перераспределением электролита, не учитываем. Также не учитываем зависимость коэффициента диффузии ионов лития через мембрану от перераспределения концентраций ионов лития в мембране. Аналогично не учитывается зависимость ЭДС двойных слоев от чисел молей ионов лития в электролите (в приэлектродных областях электролита).

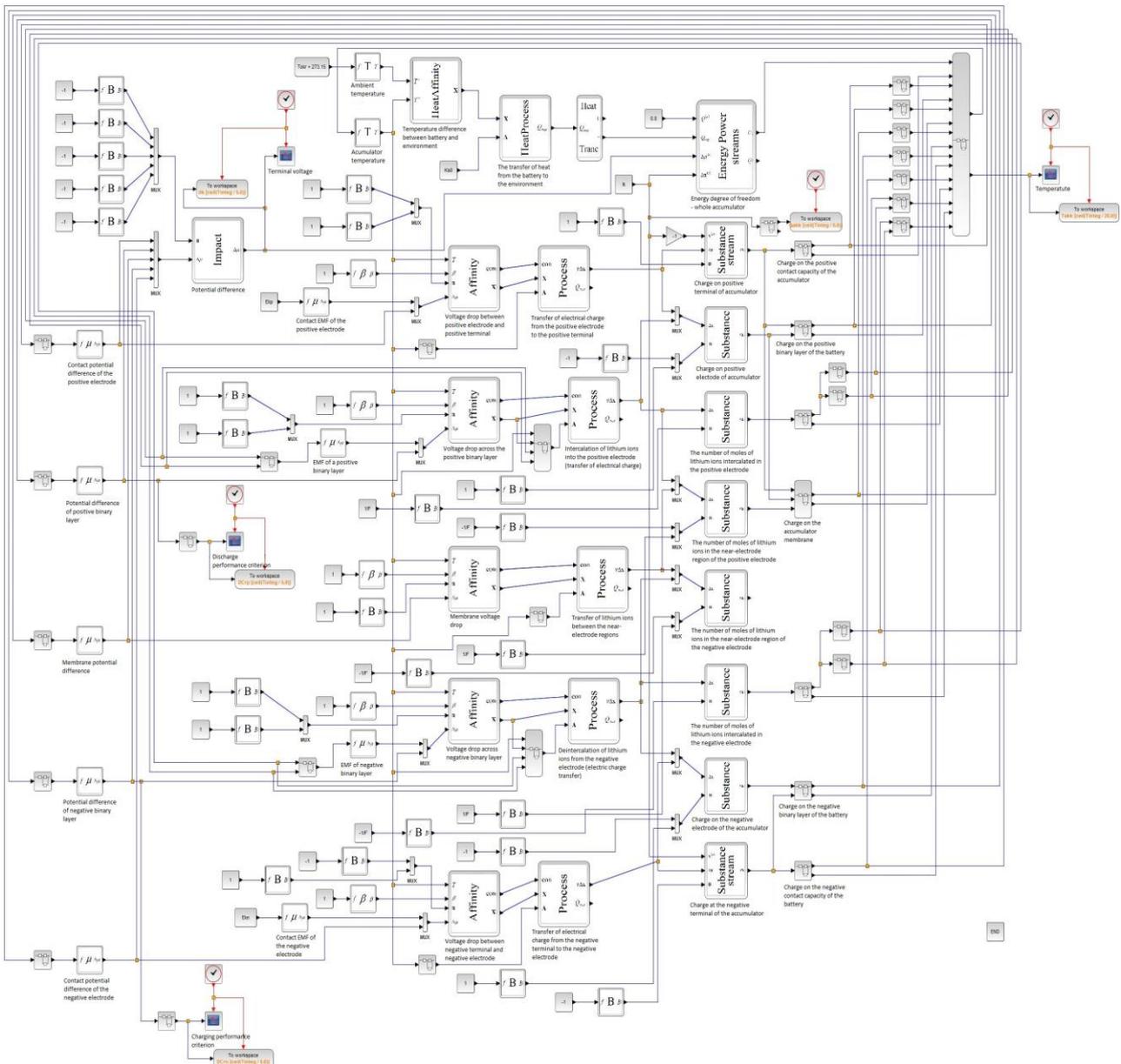


Рисунок 14 – Блок-схема физико-химических процессов в литий-ионном аккумуляторе серии Sony US18650VTC6

На *первом этапе* полная математическая модель преобразуется в модель с заданными конкретными исходными данными и ограничениями. Последняя математическая модель дает

зависимость кривой напряжения и температуры от параметров модели ФХП в ЛИА (показанной на рисунке 14), а также от его тока разряда постоянным током.

*Второй этап* технологии посвящён определению диапазонов изменения коэффициентов моделей на основе паспортных данных. Эти диапазоны в силу большого числа таких параметров определяются методами Монте-Карло путем сопоставления расчетных кривых напряжения и температуры с соответствующими кривыми напряжения и температуры, приведенных в паспортных данных рассматриваемой марки ЛИА. Расчетные кривые должны отличаться от экспериментальных в диапазонах разброса соответствующих кривых различных экземпляров ЛИА рассматриваемой марки ЛИА. Эти диапазоны определяются разбросом параметров реальных аккумуляторов выбранной марки, определяемых на *третьем этапе* (таблица 1).

Таблица 1 – Оцененные параметры модели динамики физико-химических процессов в литий-ионном аккумуляторе марки Sony US18650VTC6

Параметр	Значение параметра	Девияция параметра	Параметр	Значение параметра	Девияция параметра
Cnom, А·ч	3.003	0.0	Qep, А·ч	1.23·Cnom	3·Cnom·10 <sup>-4</sup>
Qen, А·ч	1.17·Cnom	3·Cnom·10 <sup>-4</sup>	Qop, А·ч	0.09·Cnom	3·Cnom·10 <sup>-4</sup>
Qon, А·ч	0.09·Cnom	3·Cnom·10 <sup>-4</sup>	Ks0, ВТ/К	8.13·Cnom	0.24·Cnom
Cv, Дж/К	34.5·Cnom	2.7·Cnom	Rpek, МОм	0.5	0.1
Rnek, МОм	1.0	0.1	Rp, МОм	63	15
Rn, МОм	15	5.1	Rm, МОм	9	1.5
ap, В <sup>-1</sup>	4.5	0.9	an, В <sup>-1</sup>	4.5	0.81
np	0.63	0.09	nn	0.51	0.063
opq	4.5·10 <sup>-3</sup>	3·10 <sup>-4</sup>	ornq	4.5·10 <sup>-3</sup>	3·10 <sup>-4</sup>
rAlphaTp, 1/°C	0.15	3·10 <sup>-2</sup>	rAlphaTn, 1/°C	1.5·10 <sup>-3</sup>	1.5·10 <sup>-4</sup>
rAlphaTm, 1/°C	0.03	2.1·10 <sup>-3</sup>	Ekp, В	0.45	0.0153
Ekn, В	0.3	0.0147	Ep, В	2.5	0.51
Epmi, В	1.5	0.33	En, В	1.5	0.21
Enmi, В	1.4	0.21	Ckp, нФ	10.0	1.5
Ckn, нФ	15.0	1.5	Cp, Ф	900	21
Cn, Ф	50	10	Cm, Ф	80	15
EDegr, В	1.0	2.1·10 <sup>-4</sup>	EMeLin, В	3.0	2.1·10 <sup>-4</sup>
cEp11	0.0	1.5·10 <sup>-3</sup>	cEp22	0.0	1.5·10 <sup>-3</sup>
cEn11	0.0	4.5·10 <sup>-3</sup>	cEn22	0.0	4.5·10 <sup>-3</sup>
cEp12	0.0	9·10 <sup>-4</sup>	cEn12	0.0	9·10 <sup>-4</sup>
cEp111	0.0	1.5·10 <sup>-5</sup>	cEp222	0.0	4.5·10 <sup>-5</sup>
cEp112	0.0	1.83·10 <sup>-5</sup>	cEp122	0.0	3.3·10 <sup>-5</sup>
cEn111	0.0	5.1·10 <sup>-3</sup>	cEn222	0.0	4.5·10 <sup>-5</sup>
cEn112	0.0	1.83·10 <sup>-5</sup>	cEn122	0.0	3.3·10 <sup>-5</sup>
cRp1	0.0	5.1·10 <sup>-3</sup>	cRn1	0.0	4.5·10 <sup>-3</sup>
cRp2	0.0	4.5·10 <sup>-3</sup>	cRn2	0.0	6.3·10 <sup>-3</sup>
cRp3	0.0	6.3·10 <sup>-3</sup>	cRn3	0.0	5.1·10 <sup>-3</sup>
cRp11	0.0	1.5·10 <sup>-5</sup>	cRn11	0.0	1.5·10 <sup>-5</sup>
cRp22	0.0	1.5·10 <sup>-5</sup>	cRn22	0.0	1.5·10 <sup>-5</sup>
cRp33	0.0	1.5·10 <sup>-5</sup>	cRn33	0.0	1.5·10 <sup>-5</sup>
cRp12	0.0	1.5·10 <sup>-5</sup>	cRn12	0.0	1.5·10 <sup>-5</sup>
cRp13	0.0	1.5·10 <sup>-5</sup>	cRn13	0.0	1.5·10 <sup>-5</sup>
cRp23	0.0	1.5·10 <sup>-5</sup>	cRn23	0.0	1.5·10 <sup>-5</sup>
cRm2	0.0	5.1·10 <sup>-10</sup>	cRm3	0.0	5.1·10 <sup>-10</sup>

На *четвертом этапе* с учетом рассчитанных диапазонов параметров рассчитываются семейства динамик разрядных характеристик (рисунки 15 – 26).

Пятый этап необходим для формирования опорных разрядных кривых (базиса) для аппроксимации коэффициентов математической модели аналитическими функциями. Эти кривые получаются из экспериментальных данных.

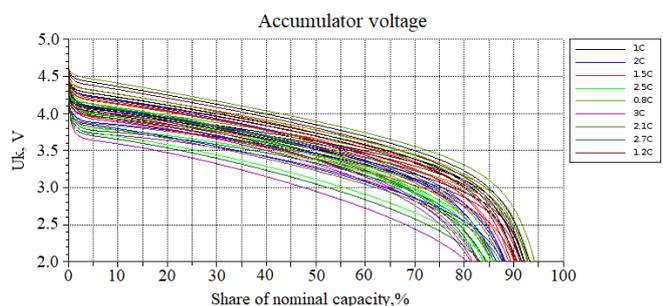


Рисунок 15 – Разрядные постоянным током кривые напряжения литий-ионного аккумулятора при температуре окружающей среды 25°C

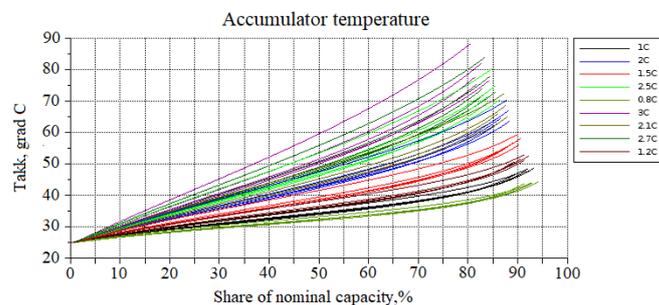


Рисунок 16 – Разрядные постоянным током кривые температуры литий-ионного аккумулятора при температуре окружающей среды 25°C

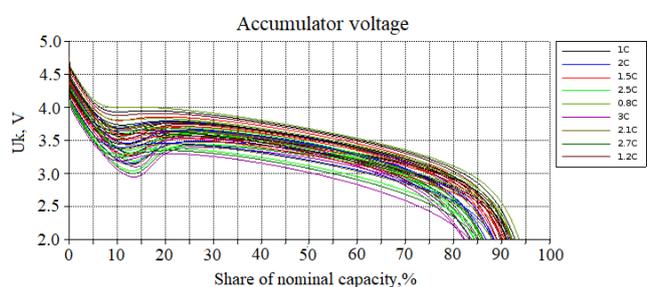


Рисунок 17 – Разрядные постоянным током кривые напряжения литий-ионного аккумулятора при температуре окружающей среды 0°C

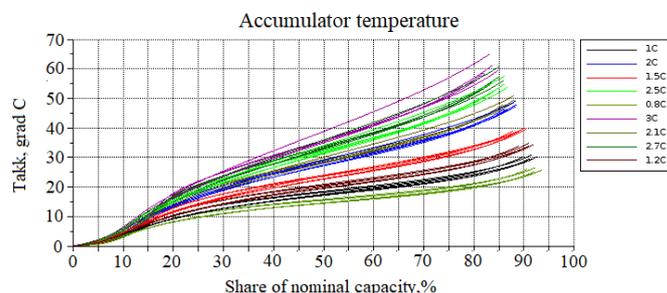


Рисунок 15 – Разрядные постоянным током кривые температуры литий-ионного аккумулятора при температуре окружающей среды 0°C

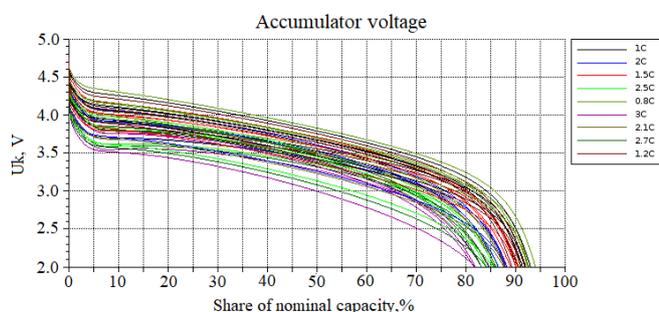


Рисунок 19 – Разрядные постоянным током кривые напряжения литий-ионного аккумулятора при температуре окружающей среды 15°C

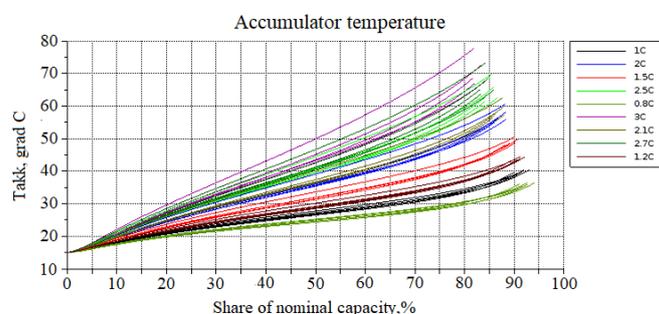


Рисунок 20 – Разрядные постоянным током кривые температуры литий-ионного аккумулятора при температуре окружающей среды 15°C

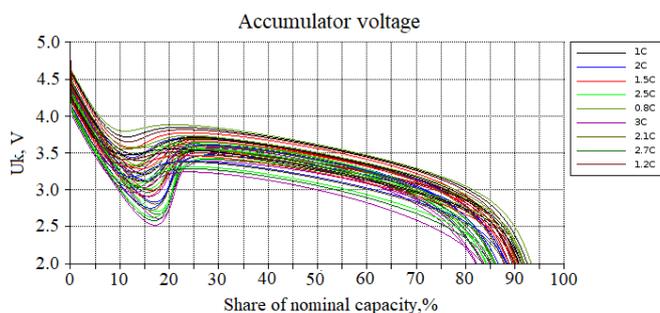


Рисунок 21 – Разрядные постоянным током кривые напряжения литий-ионного аккумулятора при температуре окружающей среды -5°C

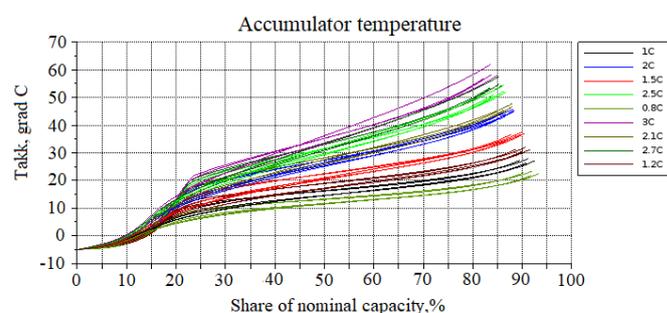


Рисунок 22 – Разрядные постоянным током кривые температуры литий-ионного аккумулятора при температуре окружающей среды -5°C

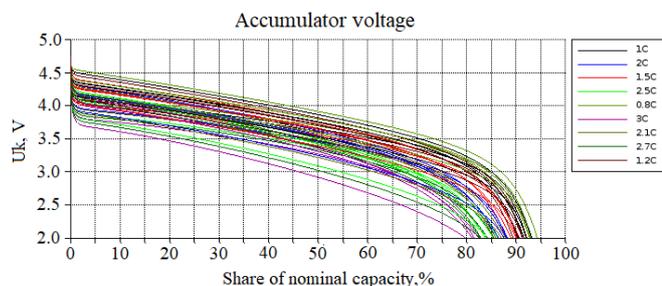


Рисунок 23 – Разрядные постоянным током кривые напряжения литий-ионного аккумулятора при температуре окружающей среды 30°C

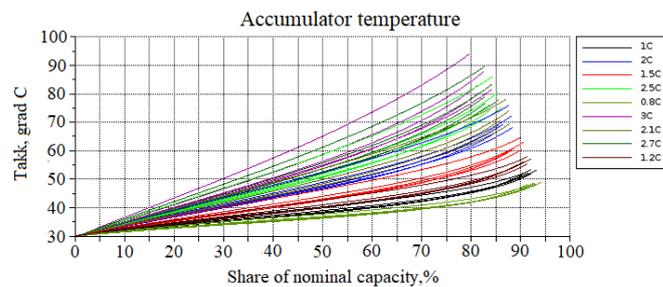


Рисунок 24 – Разрядные постоянным током кривые температуры литий-ионного аккумулятора при температуре окружающей среды 30°C

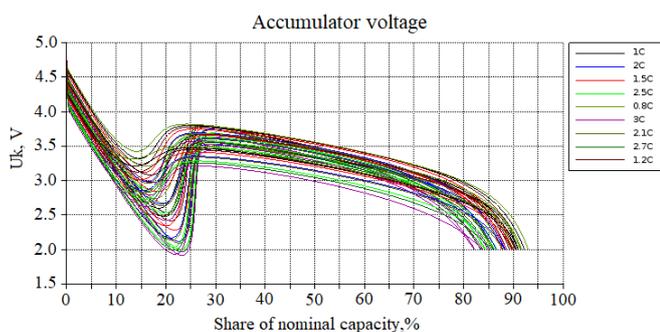


Рисунок 25 – Разрядные постоянным током кривые напряжения литий-ионного аккумулятора при температуре окружающей среды -10°C

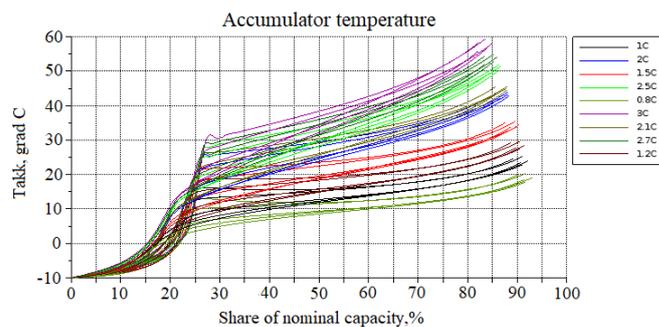


Рисунок 26 – Разрядные постоянным током кривые температуры литий-ионного аккумулятора при температуре окружающей среды -10°C

Используя опорные кривые, рассчитанные семейства динамик разрядных характеристик и адаптированную математическую модель, полученную на 1 этапе, с помощью численно-аналитических преобразований на *шестом этапе* получаем рабочую математическую модель, приспособленную для диагностирования и прогнозирования характеристик и параметров литий-ионных аккумуляторов. Перед этим из рассчитанного семейства динамик разрядных характеристик выделяем тестовые разрядные кривые, на которых оцениваем погрешность численно-аналитического преобразования модели динамики ФХП в ЛИА в вышеупомянутую рабочую модель ЛИА. Для подтверждения достоверности полученной рабочей модели ЛИА на *восьмом этапе* проводится оценка ее погрешностей на основе экспериментально снятых на *седьмом этапе* разрядных кривых.

*Девятый этап* – это этап практической эксплуатации аккумуляторов, на котором выбираются разрядные режимы, используемые для восстановления разрядных характеристик (*этап 10*). По восстановленным разрядным характеристикам вычисляется текущая фактическая емкость аккумулятора. Полученные в каждом вылете значения фактической емкости на *11 этапе* экстраполируются для получения прогноза работоспособности конкретного аккумулятора в батарее.

В шестой главе «**Апробация применения научных основ оценивания работоспособности химических источников электрической энергии на примере литий-ионных аккумуляторов**» строится математическая модель ЛИА путем численно-аналитического преобразования потенциально-потокковой модели динамики ФХП в ЛИА.

В общем виде преобразованная модель представляется в виде:

$$U_i^p = \hat{U}_i^p \left( \frac{I_k}{K_I C_{ном}}, \frac{Q}{C_{ном}}, \mathbf{a}_U \right), \mathbf{a}_U = \mathbf{a}_U [U_{0.2C}^{(ref)}(Q), U_{1.0C}^{(ref)}(Q), U_{3.0C}^{(ref)}(Q)], \quad (13)$$

$$T_i^p = \hat{T}_i^p \left( \frac{I_k}{K_I C_{ном}}, \frac{Q}{C_{ном}}, \mathbf{a}_T \right), \mathbf{a}_T = \mathbf{a}_T [T_{0.2C}^{(ref)}(Q), T_{1.0C}^{(ref)}(Q), T_{3.0C}^{(ref)}(Q)], \quad (14)$$

где  $U_{0.2C}^{(ref)}(Q)$ ,  $U_{1.0C}^{(ref)}(Q)$ ,  $U_{3.0C}^{(ref)}(Q)$  - разрядные кривые напряжения при опорных токах разряда (0.2C, 1.0C, 3.0C);  $K_I$  - некоторый токовый коэффициент, зависящий от системы единиц измерения (далее возьмем  $K_I = 1 \text{ ч}^{-1}$ );  $T_{0.2C}^{(ref)}(Q)$ ,  $T_{1.0C}^{(ref)}(Q)$ ,  $T_{3.0C}^{(ref)}(Q)$  - разрядные кривые

температуры при опорных токах разряда (0.2С, 1.0С, 3.0С);  $U_i^p$  и  $T_i^p$  - напряжение и температура ЛИА;  $I_k$  - разрядный ток ЛИА;  $C_{ном}$  - номинальная емкость ЛИА;  $Q$  - текущая отданная зарядовая емкость. Правая часть модели (13) и (14) задается по всем аргументам в виде степенного полинома (таблица 2).

Таблица 2 – Разрядные постоянным током модели литий-ионного аккумулятора

	Разрядные модели		
	Напряжение	Температура	Разрядная емкость
Степень полинома по отданному заряду	3		-
Степень полинома по контрольным кривым	2		
Степень полинома по разрядному току	4, и обратная пропорциональность	5	4
Погрешность преобразования модели ФХП	1%	1.4%	0.7%

Коэффициенты модели ЛИА серии Sony US18650VTC6 рассчитываются из разрядных кривых динамики напряжения и температуры при различных постоянных токах разряда, полученных из потенциально-потокосвой модели динамики ФХП в ЛИА в диапазонах параметров этой модели динамики ФХП, приведенных в таблице 1. В процессе построения моделей напряжения и температуры строится модель разрядной постоянным током емкости ЛИА.

Затем полученная разрядная модель ЛИА серии Sony US18650VTC6 верифицируется на экспериментальных данных, собранных с 4-х экземплярах ЛИА серии Sony US18650VTC6 в установке, схема которой показана на рисунке 27. С этой целью рассчитываются по этой модели динамики разрядных напряжений на основе опорных кривых, показанных на рисунке 28, а затем сопоставляются с соответствующими экспериментальными, показанными на рисунке 29. Погрешности полученной модели напряжения и емкости приведены на рисунках 30 и 31 соответственно.

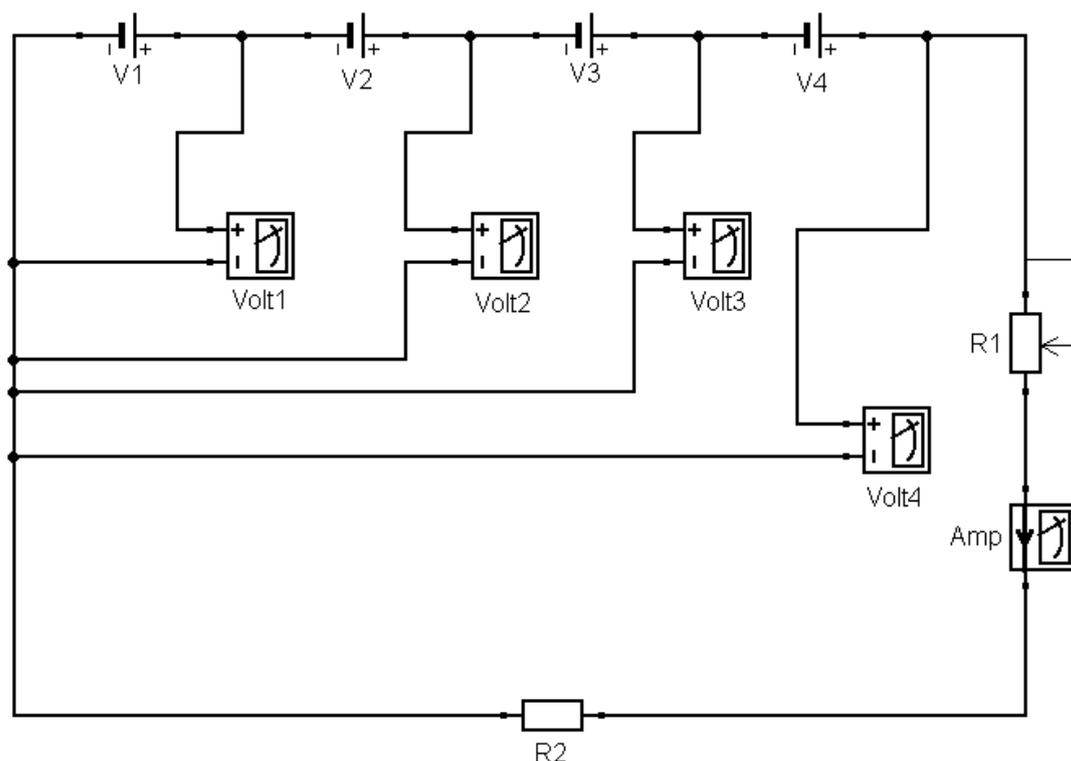
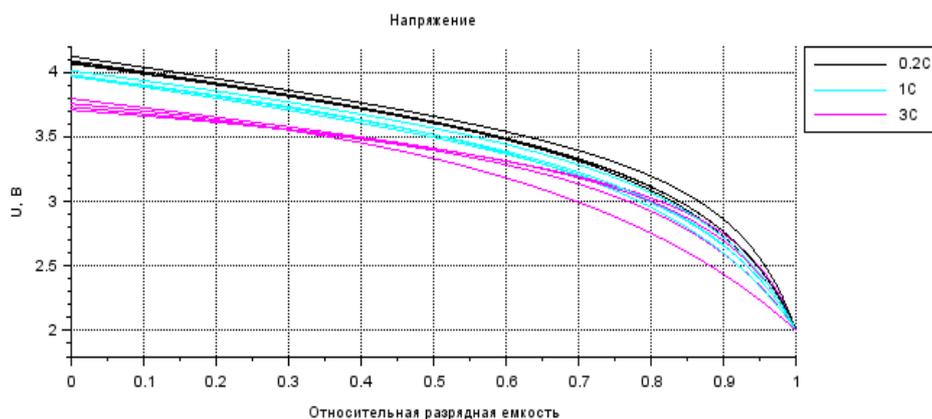
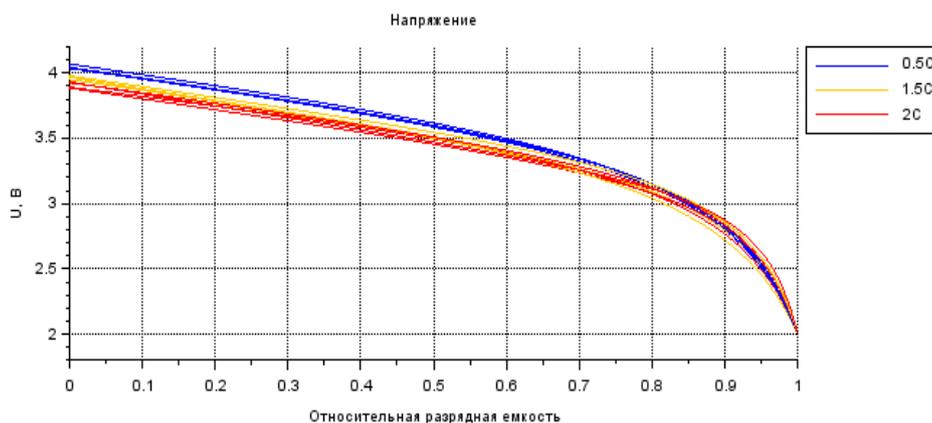


Рисунок 27 – Схема установки для испытаний литий-ионных аккумуляторов серии Sony US18650VTC6 в ручном режиме поддержки разрядного тока постоянным

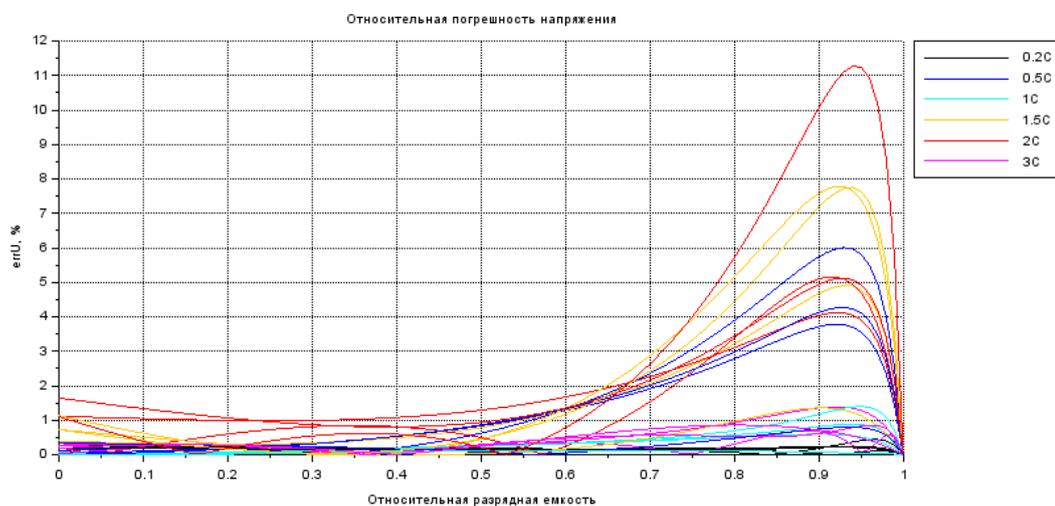


**Рисунок 28 – Полученные экспериментально опорные разрядные постоянным током кривые напряжения литий-ионного аккумулятора серии Sony US18650VTC6**

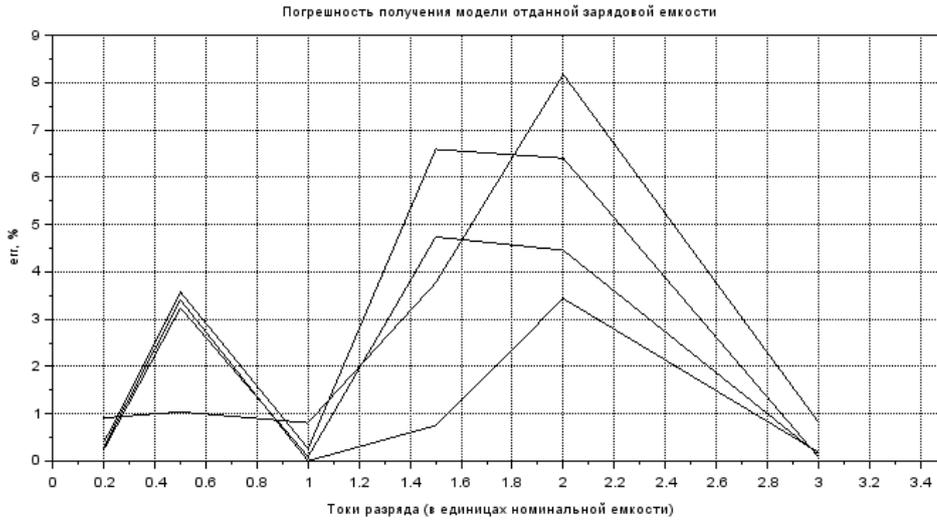
Из рисунков 28 и 29 видно, что относительная погрешность полученной модели напряжения не превышает 11.5%, разрядной емкости – 8.5%. Эти погрешности возрастают по мере приближения ЛИА к концу разряда, т.к. в экспериментальной установке ток поддерживался постоянным вручную, соответственно по мере приближения к концу его труднее контролировать.



**Рисунок 29 – Полученные экспериментально прочие разрядные постоянным током кривые напряжения литий-ионного аккумулятора серии Sony US18650VTC6**



**Рисунок 30 – Относительные погрешности разрядной модели напряжения литий-ионного аккумулятора серии Sony US18650VTC6**



**Рисунок 31 – Относительные погрешности разрядной модели емкости литий-ионного аккумулятора серии Sony US18650VTC6**

Затем в силу (1) и (2) строится разрядная модель ЛИА с учетом процессов старения:

$$\tilde{U}_{0.2C}^{(ref)}(Q) = U_{0.2C}^{(ref)}(0) - \alpha_{0.2}^U (U_{0.2C}^{(ref)}(0) - U_{0.2C}^{(ref)}(Q)), \quad \tilde{U}_{1.0C}^{(ref)}(Q) = U_{1.0C}^{(ref)}(0) - \alpha_{1.0}^U (U_{1.0C}^{(ref)}(0) - U_{1.0C}^{(ref)}(Q)), \quad (15)$$

$$\tilde{U}_{3.0C}^{(ref)}(Q) = U_{3.0C}^{(ref)}(0) - \alpha_{3.0}^U (U_{3.0C}^{(ref)}(0) - U_{3.0C}^{(ref)}(Q)), \quad \tilde{T}_{0.2C}^{(ref)}(Q) = T_{0.2C}^{(ref)}(0) + \alpha_{0.2}^T (T_{0.2C}^{(ref)}(Q) - T_{0.2C}^{(ref)}(0)), \quad (16)$$

$$\tilde{T}_{1.0C}^{(ref)}(Q) = T_{1.0C}^{(ref)}(0) + \alpha_{1.0}^T (T_{1.0C}^{(ref)}(Q) - T_{1.0C}^{(ref)}(0)), \quad \tilde{T}_{3.0C}^{(ref)}(Q) = T_{3.0C}^{(ref)}(0) + \alpha_{3.0}^T (T_{3.0C}^{(ref)}(Q) - T_{3.0C}^{(ref)}(0)), \quad (17)$$

$$U_i^p = \hat{U}_i^p \left( \frac{I_k}{K_I C_{ном}}, \frac{Q}{C_{ном}}, \tilde{\mathbf{a}}_U \right), \quad \tilde{\mathbf{a}}_U = \mathbf{a}_U [\tilde{U}_{0.2C}^{(ref)}(Q), \tilde{U}_{1.0C}^{(ref)}(Q), \tilde{U}_{3.0C}^{(ref)}(Q)], \quad (18)$$

$$T_i^p = \hat{T}_i^p \left( \frac{I_k}{K_I C_{ном}}, \frac{Q}{C_{ном}}, \tilde{\mathbf{a}}_T \right), \quad \tilde{\mathbf{a}}_T = \mathbf{a}_T [\tilde{T}_{0.2C}^{(ref)}(Q), \tilde{T}_{1.0C}^{(ref)}(Q), \tilde{T}_{3.0C}^{(ref)}(Q)], \quad (19)$$

где коэффициенты  $\alpha_{0.2}^U \geq 1$ ,  $\alpha_{1.0}^U \geq 1$ ,  $\alpha_{3.0}^U \geq 1$ ,  $\alpha_{0.2}^T \geq 1$ ,  $\alpha_{1.0}^T \geq 1$ ,  $\alpha_{3.0}^T \geq 1$  определяют степень износа электродов. Таким образом, используя (15) – (19), мы по начальному участку разрядной кривой ЛИА определим эти коэффициенты, а по этим коэффициентам спрогнозируем разрядную емкость, напряжение и температуру каждого ЛИА в батарее.

**В заключении** диссертации автором излагаются новые научные и практические результаты, которые подтверждают, что научная проблема, сформулированная в диссертации решена:

1. Разработаны научные основы оценивания работоспособности перспективных авиационных ХИЭЭ, представляющие собой единый подход получения диагностических и прогностических моделей авиационных ХИЭЭ различных физико-химических систем.
2. Впервые сформулирована и доказана кинетическая теорема современной неравновесной термодинамики.
3. Разработан на базе начал и кинетической теоремы современной неравновесной термодинамики новый потенциально-поточный метод формирования системы уравнений динамики неравновесных термодинамических процессов в перспективных авиационных ХИЭЭ, в частности в ЛИА.
4. Разработана методика адаптации моделей динамики ФХП для решения задач диагностики и прогнозирования путем численно-аналитического преобразования этих моделей динамики ФХП.
5. Выполнена программная реализация методов современной неравновесной термодинамики с использованием модельно-ориентированного подхода и методов численно-аналитического преобразования потенциально-поточных моделей для решения задач диагностики и прогнозирования.

6. Разработана концепция и структура распределенной информационной системы построения модели исследуемого объекта из объектно-ориентированной модели процессов этой системы. При условии максимального распараллеливания подзадач такая информационная система ускорит построение модели объекта в 50 – 90 раз.
7. Впервые получена полная математическая модель динамики ФХП в ЛИА, являющаяся основой для создания диагностических и прогностических моделей, которая учитывает 7 степеней свободы и включает в себя 5 функций состояния для свойств веществ и процессов.
8. Из полной математической модели динамики процессов в ЛИА были получены модели напряжения (с погрешностью 1%), температуры (с погрешностью 1.4%), разрядной емкости (с погрешностью 0.7%).
9. На примере экспериментальных исследований типовых ЛИА Sony US18650VTC6 продемонстрирована технология получения математических моделей для диагностирования и прогнозирования фактической емкости и температуры аккумуляторов в процессе эксплуатации с учетом эффекта старения. Относительная погрешность модели напряжения не превышает 11%, модели емкости – 8% .

Дальнейшие исследования должны быть направлены на:

1. Разработку автоматизированной системы получения диагностических и прогностических моделей для любых типов новых ХИЭЭ по экспериментальным данным, которые должны стать составной частью цифровых портретов ХИЭЭ.
2. Синтез усовершенствованных систем управления новыми ХИЭЭ на основе различных параллельных процессоров для реализации вышеупомянутых (более сложных алгоритмов управления) этими ХИЭЭ.

**Основные положения диссертационной работы изложены  
в следующих публикациях:**

**Монографии**

1. *Халютин С.П., Жмуров Б.В., Тюляев М.Л., Старостин И.Е.* Моделирование сложных электроэнергетических систем летательных аппаратов: монография. - М.: Изд. ВУНЦ ВВС «ВВА им. Проф. Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина», 2010. 11.75 п.л. (И.Е. Старостин – Раздел 4, Раздел 5, 4.7 п.л.).
2. *Starostin I.E., Bykov V.I.* Kinetic theorem of modern non-equilibrium thermodynamic. - Raleigh (North Carolina, USA): Open Science Publishing, 2017. 14.3125 п.л. (И.Е. Старостин – Введение, Раздел 1, Раздел 2, п. 2.1, п. 2.3, п. 2.5, Раздел 3, Заключение, 10.8 п.л.)
3. *Старостин И.Е., Степанкин А.Г.* Программная реализация методов современной неравновесной термодинамики. И система симуляции физико-химических процессов SimulationNonEqPrpsSS v. 0.1.0. - Бо Бассен, Маврикий: Lambert academic publishing, 2019. 7.9375 п.л. (И.Е. Старостин – Введение, Раздел 1, Раздел 2, Раздел 3, §§3.3 – 3.5, Заключение, 7.3125 п.л.)

**Статьи в рецензируемых изданиях**

4. *Быков В.И., Старостин И.Е.* Квазиградиентные модели динамики закрытых химических систем // Химическая физика, 2012, Т. 31, № 1. 0.25 п.л. (И.Е. Старостин – 0.18 п.л.)
5. *Халютин С.П., Старостин И.Е.* Потенциально-потокосый квазиградиентный метод моделирования неравновесных процессов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки, 2012, № 2 (22). 0.75 п.л. (И.Е. Старостин – 0.5 п.л.)
6. *Халютин С.П., Старостин И.Е.* Анализ неравновесных процессов в авиационных системах потенциально-потокосым методом // Научный вестник Московского государственного технического университета гражданской авиации, 2012, № 185. 0.31 п.л. (И.Е. Старостин – 0.21 п.л.)
7. *Быков В.И., Старостин И.Е.* Описание динамики закрытых химических систем квазиградиентными моделями // Журнал физической химии, 2013, Т. 87, № 5. 0.375 п.л. (И.Е. Старостин – 0.3 п.л.)

8. Быков В.И., Старостин И.Е., Халютин С.П. Качественный анализ динамики процессов в неравновесных системах на основе потенциально-потокowego метода методом обратной связи // Информатика и системы управления, 2013, № 3 (37). 0.875 п.л. (И.Е. Старостин – 0.65 п.л.)
9. Быков В.И., Старостин И.Е. Квазиградиентные модели динамики процессов горения в закрытых системах // Доклады академии наук, 2013, Т. 451, № 1. 0.1875 п.л. (И.Е. Старостин – 0.11 п.л.)
10. Старостин И.Е. Алгоритм численного интегрирования потенциально-потокowych уравнений в сосредоточенных параметрах с контролем корректности приближенного решения // Компьютерные исследования и моделирование, 2014, Т. 6, № 4. 0.875 п.л.
11. Быков В.И., Старостин И.Е. Модели традиционной химической кинетики и потенциально-потокowe уравнения для закрытой системы // Вестник МИТХТ им. М.В. Ломоносова, 2014, Т. 9, № 2. 0.375 п.л. (И.Е. Старостин – 0.3 п.л.)
12. Старостин И.Е. К проблеме синтеза кинетических матриц простых подсистем на основе экспериментальных данных // Надежность и качество сложных систем, 2014, № 1 (5). 0.5 п.л.
13. Старостин И.Е., Халютин С.П., Быков В.И. Кинетические свойства неравновесных систем и связь их с уравнениями потенциально-потокowego метода // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки, 2014, № 4 (32). 0.75 п.л. (И.Е. Старостин – 0.7 п.л.)
14. Халютин С.П., Жмуров Б.В., Старостин И.Е. Математическое моделирование электрохимических процессов в литий-ионных аккумуляторах потенциально-потокowym методом // Научный вестник московского государственного технического университета гражданской авиации, 2014, № 201. 0.5 п.л. (И.Е. Старостин – 0.3 п.л.)
15. Быков В.И., Старостин И.Е. Моделирование процессов горения и взрыва потенциально-потокowym методом // Горение и взрыв, 2014, Т. 7, № 7. 0.25 п.л. (И.Е. Старостин – 0.2 п.л.)
16. Старостин И.Е., Давидов А.О. Анализ и моделирование физико-химических процессов в литий-ионных аккумуляторах // Электропитание, 2017, № 1. 0.813 п.л. (И.Е. Старостин – 0.75 п.л.)
17. Старостин И.Е., Быков В.И. К проблеме программной реализации потенциально-потокowego метода описания физико-химических процессов // Компьютерные исследования и моделирование, 2018, Т. 10, № 6. 0.9375 п.л. (И.Е. Старостин – 0.9 п.л.)
18. Старостин И.Е. Получение потенциально-потокowym методом системы уравнений физико-химических процессов в водородно-воздушном топливном элементе с протонообменной мембраной // Электропитание, 2018, № 4. 0.875 п.л.
19. Starostin I.E., Khalyutin S.P. Identification of system models from potential-stream equations of the basis of deep learning on experimental data // Civil Aviation High Technologies, 2020, V. 23(2). 0.75 п.л. (И.Е. Starostin – 0.6 п.л.)
20. Старостин И.Е. Получение моделей надежности технических объектов из потенциально-потокowych уравнений физико-химических процессов в этих объектах // Надежность и качество сложных систем, 2020, № 1(29). 0.5 п.л.
21. Старостин И.Е. Программная реализация решения потенциально-потокowym методом задач построения моделей систем из результатов испытаний этих систем // Надежность и качество сложных систем, 2020, № 3(31). 0.5 п.л.
22. Starostin I.E., Khalyutin S.P. Obtaining robotic objects model from the equations of the potential-flow method // 20th international conference of younger specialists on micro/nanotechnologies and electron devices EDM 2019, 2019. 0.438 п.л. (И.Е. Starostin – 0.2 п.л.)
23. Starostin I.E., Khalyutin S.P., Davidov A.O., Levin A.V., Trubachev A.T. Obtaining a lithium-ion battery discharge characteristics mathematical model from the numerical analysis of physical and chemical processes in it // 2019 International Conference on

- Electrotechnical Complexes and Systems (ICOECS), Ufa, 22 – 25 October, 2019. 0.25 п.л. (*I.E. Starostin* – 0.18 п.л.)
24. *Starostin I.E., Khalyutin S.P., Altukhov A.V., Davidov A.O.* Parallelization Applied to the Synthesis Methodology and Operation of Complex Systems Based on the Analysis and Modelling of their Physical and Chemical Processes // 2020 1st International Conference Problems of Informatics, Electronics, and Radio Engineering (PIERE), Novosibirsk, 11, 12 December, 2020. 0.44 п.л. (*I.E. Starostin* – 0.37 п.л.)
  25. *Starostin I.E., Khalyutin S.P., Pavlova V.I., Punt E.A.* Distributed computing system for creating digital portraits of complex systems // The VII International Scientific and Practical Conference “Information Technologies and Management of Transport Systems” (ITMTS 2021). - 2021. - V. 341. - Режим доступа: <https://doi.org/10.1051/mateconf/202134100046>. 0.563 п.л. (*I.E. Старостин* – 0.45 п.л.)
  26. *Starostin I.E., Khalyutin S.P., Davidov A.O., Ovchinnikova Yu.E., Volkova A.M.* Identification of the DC Discharge Model of a Lithium-ion Battery Using the Potential Streaming Method and Scilab // 2021 IEEE 22nd International Conference of Young Professionals in Electron Devices and Materials (EDM). - 2021. - Режим доступа: <https://ieeexplore.ieee.org/document/9507664/authors>. 0.375 п.л. (*I.E. Старостин* – 0.3 п.л.)
  27. *Старостин И.Е.* Библиотека C, реализующая формализм современной неравновесной термодинамики, в том числе и потенциально-потокосый метод // Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2017661560 РФ, опублик. 16.10.2017 РОСПАТЕНТ
  28. *Старостин И.Е.* Библиотека C++, реализующая формализм современной неравновесной термодинамики, в том числе и потенциально-потокосый метод // Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2017661758 РФ, опублик. 19.10.2017 РОСПАТЕНТ
  29. *Старостин И.Е.* Программная реализация на C++ классов физических величин с их единицами измерения в виде библиотеки классов // Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2018614111 РФ, опублик. 29.03.2018 РОСПАТЕНТ
  30. *Старостин И.Е.* Scilab-модуль ATOMS блочно-имитационной реализации формализма современной неравновесной термодинамики, в том числе и потенциально-потокосого метода // Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2018666596 РФ, опублик. 18.12.2018 РОСПАТЕНТ
  31. *Старостин И.Е.* Система SimulationNonEqProcSS блочной имитации физико-химических процессов на основе методов современной неравновесной термодинамики // Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2019616182 РФ, опублик. 20.05.2019 РОСПАТЕНТ
  32. *Старостин И.Е.* Модуль расширения ATOMS Scilab осуществления интеграции, выделения подмножеств табличных данных на основе их заголовков, а также вычисления заданных функций этих табличных данных // Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2021614877 РФ, опублик. 31.03.2021 РОСПАТЕНТ
  33. *Старостин И.Е.* Модуль расширения ATOMS Scilab осуществления вычислительного эксперимента на основе заданной блочной диаграммы пользовательской системы Xcos/Scilab с представлением результатов этого вычислительного эксперимента в матричном виде // Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2021614958 РФ, опублик. 01.04.2021 РОСПАТЕНТ