

# 딥러닝을 통한 리튬 이온 배터리 전기화학 모델의 매개변수 추정 가속화

천호진, 김홍석\*

서강대학교, \*서강대학교

ghwlss@sogang.ac.kr, \*hongseok@sogang.ac.kr

## Accelerating parameter identification of lithium-ion battery electrochemical model with deep learning

Hojin Chun, Hongseok Kim\*

Sogang Univ., \*Sogang Univ.

### 요약

2024년 구미산단 기업의 설문조사 결과 기업의 자체 에너지 효율화 활동에 대해 노후 장비 및 장치에 대한 교체(19.5%) 및 에너지 모니터링 시스템 구축(4.3%) 활동이 조사된 바 있다. 이러한 기업 에너지 효율화에 필요한 기술중 한가지로 에너지저장장치(ESS 등)의 배터리 열화상태에 대한 정밀한 진단의 중요성이 커지고 있다. 전기화학 모델을 사용할 경우 배터리의 성능을 정확하게 진단하는 것이 가능하나, 모델 매개변수를 찾기 위해 많은 연산이 요구되는 문제가 있다. 본 논문에서는 single particle model with electrolyte (SPMe)의 편미분방정식을 인공지능망으로 근사하여 시뮬레이션 속도를 향상시켰다. 또, 매개변수 추정을 위해 주로 사용되는 메타휴리스틱 알고리즘이 아닌 인공지능망을 사용한 고정점 반복법으로 전기화학 모델의 매개변수를 추정하는 방법을 제안한다.

### I. 서론

2024년 구미산단 기업의 설문조사 결과 기업의 자체 에너지 효율화 활동에 대해 노후 장비 및 장치에 대한 교체(19.5%) 및 에너지 모니터링 시스템 구축(4.3%) 활동이 조사된 바 있다. 이러한 기업 에너지 효율화에 필요한 기술중 한가지로 에너지저장장치(ESS 등)의 배터리 열화상태에 대한 정밀한 진단의 중요성이 커지고 있다. 기존의 배터리 진단 방법은 크게 머신러닝 기반 방법과 모델 기반 방법으로 분류할 수 있다. 많은 경우 머신러닝 기반 방법은 특정 조건에서 추출된 특징을 활용하여 전기자동차와 같은 동적 부하가 가해지는 환경에 대응하지 못할 수 있으며, 학습을 위해 양질의 데이터를 수집해야하는 어려움이 있다. 반면 모델 기반 방법은 다양한 환경에 대응이 가능하며, 특히 전기화학 모델을 사용할 경우 배터리의 성능을 정확하게 진단하는 것이 가능하나, 진단하고자 하는 배터리의 모델 매개변수를 찾기 위해 많은 연산이 요구된다는 문제가 있다 [1]. 전기화학 모델의 계산복잡도가 비교적 높고, 매개변수 추정을 위해 메타휴리스틱 알고리즘이 주로 사용되어 시뮬레이션을 반복적으로 수행해야 하기 때문이다 [2].

본 논문에서는 딥러닝을 통해 리튬 이온 배터리의 전기화학 모델 중 하나인 single particle model with electrolyte (SPMe)의 매개변수 추정 시간을 단축하는 방법을 제안한다. 이를 위해 SPMe를 근사하는 인공지능망과 SPMe의 매개변수를 추정하는 인공지능망을 설계하였고, 고정점 반복법을 통해 매개변수를 추정하였다.

### II. 본론

본 논문에서는 전기화학 모델의 시뮬레이션 시간 단축을 위해 인공지능망을 사용하여 SPMe의 편미분방정식을 근사하였다. 인공지능망  $F$ 은 초기 전압  $V_0$ , 전류  $I$ , 전기화학 모델의 매개변수  $\lambda$ 를 입력받아 전극과 전해질에서의 리튬 이온 농도를 예측한다. 전압 예측값  $\hat{V}$ 은 SPMe의 전압

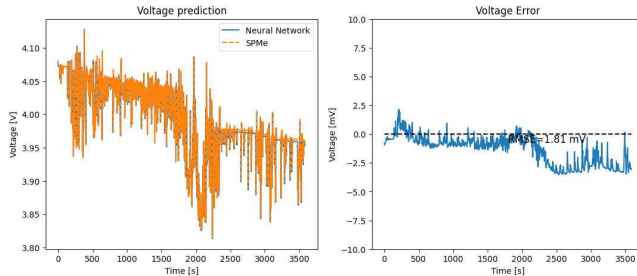


그림 1 인공지능망을 사용한 전압 예측 결과(좌)와 전압 예측 오차(우)

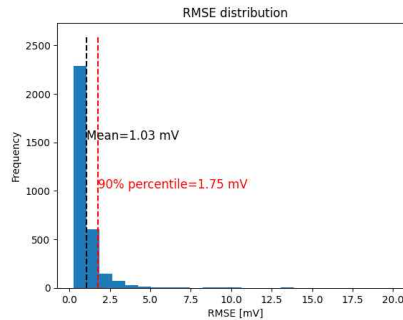


그림 2 인공지능망의 전압 예측 오차 분포

표현 식 [3]  $h$ 와 리튬 이온 농도 예측값  $\hat{c}$ , 전류, 매개변수를 사용하여 계산한다.

$$\begin{aligned}\hat{c} &= F(V_0, I, \lambda) \\ \hat{V} &= h(\hat{c}, I, \lambda)\end{aligned}$$

한편, 메타휴리스틱 알고리즘으로 매개변수를 추정할 경우 일반적으로 수백, 수천 회의 시뮬레이션 수행이 필요하다. 시뮬레이션 반복 수를 줄이기 위해 매개변수 업데이트를 수행하는 인공지능망  $G$ 를 설계하였다. 인

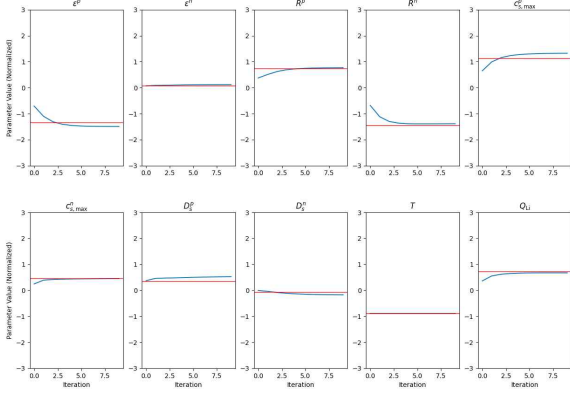


그림 3 매개변수의 업데이트 시각화

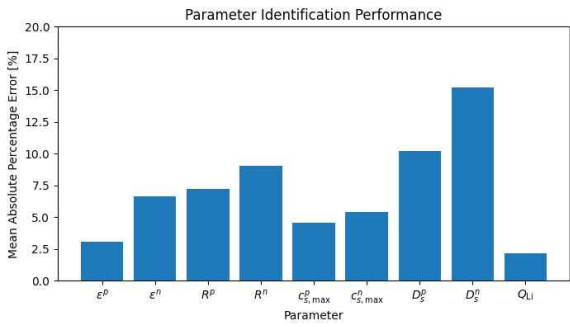


그림 4 매개변수의 평균 추정 오차

$\epsilon^p$	Positive electrode porosity
$\epsilon^n$	Negative electrode porosity
$R^p$	Positive particle radius
$R^n$	Negative particle radius
$c_{s,max}^p$	Maximum concentration in positive electrode
$c_{s,max}^n$	Maximum concentration in negative electrode
$D_s^p$	Positive electrode diffusivity
$D_s^n$	Negative electrode diffusivity
$Q_{Li}$	Cyclable lithium capacity

표 1 추정 매개변수 및 기호

공신경망  $G$ 는 매개변수  $\lambda_i$ 로 예측된 리튬 이온 농도  $\hat{c}_i$ , 전압  $\hat{V}_i$ 와 실제 전압  $V, I$ 를 입력받아  $\hat{V}_{i+1}$ 과  $V$ 의 오차를 최소화할 수 있는 매개변수  $\lambda_{i+1}$ 를 예측한다.

$$\lambda_{i+1} = G(\lambda_i, \hat{c}_i, \hat{V}_i, V, I)$$

위의 두 개의 인공신경망을 사용하여 매개변수를 업데이트하면 아래의 식을 만족하는 고정점  $\lambda^*$ 를 얻을 수 있다.

$$\begin{aligned} \lambda^* &= G(\lambda^*, c^*, V^*, V, I) \\ &= G(\lambda^*, F(V_0, I, \lambda^*), h(F(V_0, I, \lambda^*), I, \lambda^*), V, I) \end{aligned}$$

인공신경망의 학습을 위한 데이터는 차량 주행 데이터로부터 생성한 전류 프로파일과 무작위로 샘플링한 배터리 모델의 매개변수를 사용한 총 35000여개의 SPMe 시뮬레이션 결과를 활용하였다. 샘플링한 매개변수의 기호와 의미를 표 1에 표시하였다. 인공신경망  $F$ 는 SPMe를 정확하게 근사하면서도 기존의 시뮬레이터 [4]보다 수십 배 빠르게 전압을 예측하였

다. 그림 1은 학습된 인공신경망  $F$ 를 사용하여 배터리의 전압을 예측한 결과를 나타낸다. 그림 2는 3500개의 검증 데이터에서 인공신경망의 전압 예측 오차 분포를 나타낸다. 검증 데이터에서 평균 전압 예측 오차는 1.03mV이고, 샘플의 90%가 1.75mV 이하의 오차를 가진다.

매개변수가 업데이트되는 과정을 그림 3에 나타내었다. 각각의 매개변수가 실제 값 (빨간 실선)에 수렴하는 것을 확인하였으며, 빠르게 수렴하는 경우 10회 미만의 업데이트로 수렴함을 확인하였다. 그림 4는 각 매개변수의 평균 추정 오차를 나타낸다. 전극의 공극률, 리튬 용량과 같이 중요도가 높은 매개변수의 추정 오차가 상대적으로 낮은 것을 확인하였다.

### III. 결론

본 연구에서는 딥러닝을 통해 배터리 전기화학 모델 SPMe를 정확하게 근사하는 것이 가능함을 보였고, 이를 활용하여 여러 개의 매개변수를 빠르게 추정하는 방법을 제안하였다. 다양한 매개변수와 전류 프로파일에 대해 평균 1.03mV의 정확도로 SPMe를 근사하였다. 또한 기존의 메타휴리스틱 알고리즘이 아닌 인공신경망을 사용한 고정점 반복법으로 주요 매개변수를 매우 빠르게 추정할 수 있음을 보였다.

후후 추가적인 실험을 통해 배터리의 열화에 따른 각 매개변수의 변화를 분석하여 단순히 매개변수를 추정하는 것이 아닌 배터리의 열화 상태를 정확하게 진단하는 알고리즘을 개발할 수 있을 것으로 판단된다.

### ACKNOWLEDGMENT

본 연구는 한국산업단지공단, 경북구미 스마트그린산업단지 에너지 자급자족 인프라 구축 및 운영사업에서 제공하는 데이터를 활용하여 수행되었음

### 참고 문헌

- [1] Kumar, Roushan, and Kaushik Das. "Lithium battery prognostics and health management for electric vehicle application - A perspective review." *Sustainable Energy Technologies and Assessments* 65 (2024): 103766.
- [2] Li, Weihang, et al. "Data-driven systematic parameter identification of an electrochemical model for lithium-ion batteries with artificial intelligence." *Energy Storage Materials* 44 (2022): 557-570.
- [3] Marquis, Scott G., et al. "An asymptotic derivation of a single particle model with electrolyte." *Journal of The Electrochemical Society* 166.15 (2019): A3693.
- [4] Sulzer, Valentin, et al. "Python battery mathematical modelling (PyBaMM)." *Journal of Open Research Software* 9.1 (2021).