



Kauno technologijos universitetas
Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas

Bajeso metodų ir mašininio mokymosi taikymas ličio jonų baterijos būsenoms įvertinti ir tirti

Baigiamasis magistro studijų projektas

Edvinas Juozapaitis
Projekto autorius

Prof. dr. Robertas Alzbutas
Vadovas

Prof. dr. Daiva Dumčiuvienė
Vadovė

Kaunas, 2025



Kauno technologijos universitetas
Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas

Bajeso metodų ir mašininio mokymosi taikymas ličio jonų baterijos būsenoms įvertinti ir tirti

Baigiamasis magistro studijų projektas
Didžiųjų verslo duomenų analitika (6213AX001)

Edvinas Juozapaitis
Projekto autorius

Prof. dr. Robertas Alzbutas
Vadovas

Prof. dr. Daiva Dumčiuvienė
Vadovė

Doc. dr. Mindaugas Kavaliauskas
Recenzentas

Prof. dr. Alina Stundžienė
Recenzentė

Kaunas, 2025



Kauno technologijos universitetas

Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas

Edvinas Juozapaitis

Bajeso metodų ir mašininio mokymosi taikymas ličio jonų baterijos būsenoms įvertinti ir tirti

Akademinio sąžiningumo deklaracija

Patvirtinu, kad:

1. baigiamąjį projektą parengiau savarankiškai ir sąžiningai, nepažeisdama(s) kitų asmenų autoriaus ar kitų teisių, laikydamasi(s) Lietuvos Respublikos autorių teisių ir gretutinių teisių įstatymo nuostatų, Kauno technologijos universiteto (toliau – Universitetas) intelektinės nuosavybės valdymo ir perdavimo nuostatų bei Universiteto akademinės etikos kodekse nustatytų etikos reikalavimų;
2. baigiamajame projekte visi pateikti duomenys ir tyrimų rezultatai yra teisingi ir gauti teisėtai, nei viena šio projekto dalis nėra plagijuota nuo jokių spausdintinių ar elektroninių šaltinių, visos baigiamojo projekto tekste pateiktos citatos ir nuorodos yra nurodytos literatūros sąrašė;
3. įstatymų nenumatytų piniginių sumų už baigiamąjį projektą ar jo dalis niekam nesu mokėjęs (-usi);
4. suprantu, kad išaiškėjus nesąžiningumo ar kitų asmenų teisių pažeidimo faktui, man bus taikomos akademinės nuobaudos pagal Universitete galiojančią tvarką ir būsiu pašalinta(s) iš Universiteto, o baigiamasis projektas gali būti pateiktas Akademinės etikos ir procedūrų kontrolieriaus tarnybai nagrinėjant galimą akademinės etikos pažeidimą.

Edvinas Juozapaitis

Patvirtinta elektroniniu būdu

Juozapaitis, Edvinas. Bajeso metodų ir mašininio mokymosi taikymas ličio jonų baterijos būsenoms įvertinti ir tirti. Magistro studijų baigiamasis projektas / vadovas prof. dr. Robertas Alzbutas, vadovė prof. dr. Daiva Dumčiuvienė; Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas.

Studijų kryptis ir sritis (studijų krypties grupė): Taikomoji matematika (Matematikos mokslai).

Reikšminiai žodžiai: ličio jonų baterijos, būsenų erdvės modelis, mašininis mokymasis, Bajeso statistika, Monte Karlo metodai, dalelių filtras, Markovo grandinės.

Kaunas, 2025. 69 p.

Santrauka

Ličio jonų baterijos pasižymi dideliu elektros energijos tankiu ir dėl to yra dažnai pritaikomos nešiojamoje elektronikoje, o dėl tokių savybių, kaip greitas įkrovimas, ilgas iškrovimo ciklas, mažas savaiminis išsikrovimas – elektromobiliuose ir net elektros energijos tinklų infrastruktūrose. Tačiau vartojant ličio jonų baterijas susiduriama su baterijos senėjimo problema. Baterijų degradavimas gali sukelti elektroninių sistemų ir technikos priemonių gedimus, kurie veda prie nuostolių įmonėms, vartotojams ar net kelia grėsmę gyvybei. Dėl to yra aktualu modeliuoti ir stebėti baterijų senėjimą.

Atlikta naujausios mokslinės literatūros analizė atskleidžia ličio jonų baterijų senėjimo modelių įvairovę. Skirtingų sudėtingumo lygių modeliai naudojami baterijos procesų imitavimui, priklausomai nuo turimų žinių apie bateriją. Mašininis mokymasis ir Bajeso metodais grįsti modeliai pasižymi galimybe automatizuoti skaičiavimus ir reikalauja lengviau išmatuojamų baterijos veikimo duomenų, todėl yra tinkami taikyti baterijų valdymo sistemose. Šiais modeliais gaunami baterijų būsenų įverčiai, svarbūs stebėti senėjimą.

Tyrimo metu analizuojamas ekvivalenčios grandinės modelis, skirtas baterijos įkrovos ir kokybiško veikimo būsenoms įvertinti. Modelis apibrėžiamas būsenų erdvės modeliu, kurio parametrų skirstinius galima atnaujinti Bajeso metodais surinkus daugiau baterijos vartojimo duomenų. Tarp modelio parametrų įtraukiami priklausomybės tarp atvirosios grandinės įtampos ir įkrovos būsenos funkcijos $f_{OCV}(SOC)$ išraiškos parametrai. Ši priklausomybės funkcija yra svarbi charakteristika, reikalinga baterijos būsenoms nustatyti, todėl vienas pagrindinių tyrimo uždavinių yra įvertinti modelio parametrus.

Modelio parametrams įvertinti sudarytas adaptyvus Dalelių Markovo grandinės Monte Karlo metodo algoritmas, gebantis universaliai prisiderinti prie įvairių baterijų duomenų ir efektyviai aproksimuoti parametrų aposteriorinius skirstinius. Eksperimentais su realios baterijos duomenimis nustatyta, kad priklausomybės funkcijos formą aproksimuoja 13 laipsnio polinomas su dvejomis logaritmų dedamosiomis kreivėmis galams atkartoti. Pastebėta, jog dalelių skaičius lemia skaičiavimų trukmę, todėl rastas mažiausias reikalingas dalelių kiekis rezultatams gauti – 400. Markovo grandinės šuolį reguliuojančio koeficiento τ reikšmė 0,86 yra optimali siekiant padengti modelio parametrų erdvę.

Adaptyviu Dalelių Markovo grandinės Monte Karlo algoritmu įvertintos dviejų realių baterijų būsenos. Abejoms baterijoms įkrovos būsenos įvertis gautas apskaičiavus atvirosios grandinės įtampą pagal srovės stiprio ir išėjimo įtampos matavimus bei baterijos vidinės varžos R

aposteriorinio skirstinio vidurkį ir panaudojus $f_{OCV}(SOC)$ atvirkštinę funkciją. Baterijai EVE LF173 nustatytas kokybiško veikimo būsenos vidurkis 0,6789 rodo stiprią degradaciją. Baterijos EVE LF105 kokybiško veikimo būsenos vidurkis 0,9924 reiškia, kad baterija artima naujai pagamintai baterijai, o ženklus nusidėvėjimas nėra stebimas.

Baterijų būsenų vertinimo ekonominė vertė pagrįsta kaštų ir naudos analize. Palyginti trys ličio jonų baterijų gamybos atvejai: gamyba iš naujai išgautų medžiagų, iš perdirbtų medžiagų, ir baterijų apdorojimas pakartotiniam panaudojimui. Atlikus ekonominę analizę globaliu mastu nustatyta, jog baterijų perdirbimo ir pakartotinio panaudojimo atvejai yra ekonomiškai efektyvesni už baterijų gamybą iš naujai išgautų medžiagų, jei reikalingai įdiegti infrastruktūrai skiriamos investicijos neviršija atitinkamai 51,51 ir 54,36 mlrd. JAV dolerių. Atlikus kaštų ir naudos analizę 5 metams su diskonto norma 0,1 apskaičiuota, kad pakartotinio panaudojimo projekto alternatyvos grynoji vertė dabartyje 2,85 mlrd. JAV dolerių didesnė nei baterijų perdirbimo projekto alternatyvos atveju.

Juozapaitis, Edvinas. Application of Bayesian Methods and Machine Learning for Lithium-ion Battery States Estimation and Research. Master's Final Degree Project / supervisor prof. dr. Robertas Alzbutas, supervisor prof. dr. Daiva Dumčiuvienė; Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Kaunas University of Technology.

Study field and area (study field group): Applied Mathematics (Mathematical Sciences).

Keywords: lithium-ion batteries, state-space model, machine learning, Bayesian statistics, Monte Carlo methods, particle filter, Markov chains.

Kaunas, 2025. 69 p.

Summary

Lithium-ion batteries have a high energy density, making them appealing for applications in portable electronics and, thanks to features such as fast charging, long discharge cycles, and low self-discharge, in electric vehicles and even in electricity grid infrastructures. However, lithium-ion batteries face the problem of battery ageing. Battery degradation can lead to failures in electronic systems and machinery, leading to losses for companies, consumers and even life-threatening risks. Modelling and monitoring of battery ageing is, therefore, a relevant topic.

An analysis of recent scientific literature reveals a variety of models applied for aging monitoring of lithium-ion batteries. Models of different complexity are used to simulate battery processes, depending on the available knowledge of the battery. Machine learning-based models are computationally simple and only require easily measurable battery performance data, making them suitable for use in battery management systems. These models provide estimates of battery states relevant to ageing monitoring.

During the study, an equivalent circuit model is analyzed to assess the state of charge and state of health of a battery. The model is defined by a state-space model whose parameter distributions can be updated using Bayesian methods as more battery consumption data is collected. The model parameters include the parametric expression of the dependence function between open circuit voltage and state of charge $f_{OCV}(SOC)$. This dependence function is an important characteristic for determining battery states, making the estimation of the model parameters a key research task.

To estimate the model parameters, an adaptive Particle Markov Chain Monte Carlo algorithm is developed, which is able to universally adapt to various types of battery data and can efficiently approximate the posterior distributions of the parameters. Experiments on real battery data show that the shape of the dependence function is approximated by a 13th-degree polynomial with two logarithmic terms to replicate the ends of the curve. The number of particles used in filtering was found to influence computation time, thus the minimum number of particles required to obtain results was determined to be 400. A value of 0.86 for the Markov chain jump factor τ was found optimal to cover the parameter space of the model.

The adaptive Particle Markov Chain Monte Carlo algorithm was used to estimate the states of two real batteries. For both batteries, the estimate of the state of charge is obtained by calculating the open circuit voltage using measurements of current and output voltage as well as the mean of the posterior distribution of the battery's internal resistance R , and by interpolating the inverse of $f_{OCV}(SOC)$. The mean value of 0,6789 for the EVE LF173 battery of the state of health indicates

strong degradation. For EVE LF105, the mean value of 0,9924 of the state of health means that the battery is similar to a newly manufactured battery, and no significant degradation is observed.

The economic value of assessing battery states is justified using cost-benefit analysis. Three cases of lithium-ion battery production are compared: production from virgin materials, production from recycled materials, and battery repurposing for second-life applications. The economic analysis on a global scale shows that battery recycling and second-life repurposing cases are more cost-effective than the production of batteries from virgin materials, provided that the investment for the necessary infrastructure is limited to \$51.51 billion and \$54.36 billion respectively. A cost-benefit analysis over 5 years with a discount rate of 0.1 estimates that the net present value of the battery second-life repurposing case is greater than the net present value of the recycling case by \$2.85 billion.

Turinys

Lentelių sąrašas	9
Paveikslų sąrašas	10
Santrumpų sąrašas	11
Įvadas.....	12
1. Literatūros apžvalga	13
1.1. Ličio jonų baterijų problematika	13
1.1.1. Ličio jonų baterijų degradacija	13
1.1.2. Baterijų pakartotinis panaudojimas	15
1.1.3. Baterijų senėjimo nustatymas.....	18
1.1.4. Kaštų ir naudos analizė.....	19
1.2. Ličio jonų baterijų modeliavimas	22
1.2.1. Elektrocheminiai modeliai.....	22
1.2.2. Ekvivalenčios grandinės modeliai	23
1.2.3. Baterijos pakuotės modeliavimas	25
1.2.4. Bajeso metodai baterijų modeliavimui	25
2. Tyrimo metodai ir duomenys	28
2.1. Kaštų ir naudos analizės planas	28
2.2. Matematinį metodų apžvalga	29
2.2.1. Būsenų erdvės modelis	29
2.2.2. Markovo grandinės Monte Karlo metodas	31
2.2.3. Bajeso metodais grįstas dalelių filtro algoritmas.....	32
2.2.4. Dalelių Markovo grandinės Monte Karlo metodas	34
2.3. Baterijų testų duomenys ir modeliavimo programinė įranga	36
2.3.1. Baterija EVE LF173	36
2.3.2. Baterija EVE LF105	38
2.3.3. Programinė įranga	39
3. Tyrimo rezultatai.....	41
3.1. Modelių apmokymo schema.....	41
3.2. Parametrinės išraiškos atranka	43
3.3. Hiperparametrų derinimas	44
3.3.1. Reikšmių šuolį reguliuojantis koeficientas τ	44
3.3.2. Minimalus reikalingas dalelių skaičius	47
3.4. Baterijos EVE LF173 būsenų vertinimas	49
3.4.1. Įkrovos būsenos vertinimas	49
3.4.2. Kokybiško veikimo būsenos įvertinimas.....	51
3.5. Baterijos EVE LF105 būsenų vertinimas	52
3.5.1. Įkrovos būsenos vertinimas	52
3.5.2. Kokybiško veikimo būsenos įvertinimas.....	54
3.6. Ekonominė analizė	54
3.7. Rekomendacijos	62
Išvados	63
Literatūros sąrašas	65
Priedai.....	70
1 priedas. Su baigiamuoju projektu susijusi mokslinė veikla.....	70
2 priedas. Adaptyvaus Dalelių Markovo grandinės Monte Karlo algoritmo realizacijos Python kodo fragmentas	74

Lentelių sąrašas

1 lentelė. Temų, pagal kurias tiriamas ličio jonų baterijų degradavimas literatūroje, apibendrinimas	14
2 lentelė. Baterijos kokybės rodikliai ir jų vertinimo metodai.....	18
3 lentelė. Ekvivalenčios grandinės modelių tipai.....	24
4 lentelė. Vidutinės ličio jonų baterijos sandara ir medžiagų kainos	29
5 lentelė. Parametrų θ aprioriniai skirstiniai	42
6 lentelė. Konteksto, kuriame vykdomas projektas, analizė	55
7 lentelė. Ličio jonų baterijų gamybos iš naujai išgautų medžiagų kaštų ir naudos analizė	58
8 lentelė. Ličio jonų baterijų gamybos iš perdirbtų medžiagų kaštų ir naudos analizė	59
9 lentelė. Ličio jonų baterijų apdorojimo pakartotiniam panaudojimui kaštų ir naudos analizė	60
10 lentelė. Ličio jonų baterijų gamybos projektų ekonominę vertę veikiantys rizikos veiksniai	61

Paveikslų sąrašas

1 pav. Elektromobilio akumulatoriaus veikimo etapai pagal degradavimą laike	16
2 pav. Žiedinės ekonomikos schema ličio jonų baterijų pakartotiniam panaudojimui	17
3 pav. Baterijos ekvivalenčios grandinės schema	23
4 pav. Baterijos EVE LF173 dinaminio testo srovės stiprio matavimai laike	37
5 pav. Baterijos EVE LF173 dinaminio testo išėjimo įtampos matavimai laike	37
6 pav. Baterijos EVE LF173 eksperimentiškai gauta OCV priklausomybės nuo SOC kreivė.....	38
7 pav. Baterijos EVE LF105 statinio testo srovės stiprio matavimai laike.....	38
8 pav. Baterijos EVE LF105 statinio testo išėjimo įtampos matavimai laike.....	39
9 pav. Baterijos EVE LF105 eksperimentiškai gauta OCV priklausomybės nuo SOC kreivė.....	39
10 pav. $fOCVSOC$ išraiškų skirtingo laipsnio polinomaais palyginimas su eksperimentine kreive ..	43
11 pav. $fOCVSOC$ išraiškų skirtingo laipsnio polinomaais, papildytais logaritmais, palyginimas su eksperimentine kreive.....	44
12 pav. Vidutinio kvadratinio šolio atstumo ir priėmimo dažnio palyginimas, priklausomai nuo parametro τ	45
13 pav. Vidutinio kvadratinio šolio atstumo ir priėmimo dažnio palyginimas, priklausomai nuo parametro $\tau \in 0,8, 0,9$	46
14 pav. Parametrų rinkinio θ grandinių autokoreliacijos mažėjimo palyginimas, priklausomai nuo τ	47
15 pav. Priėmimo dažnio palyginimas, priklausomai nuo dalelių skaičiaus	48
16 pav. Skaičiavimų laikas minutėmis priklausomai nuo dalelių skaičiaus	49
17 pav. Funkcijos $fOCVSOC$ įvertis baterijai EVE LF173	49
18 pav. Baterijos EVE LF173 vidinės varžos R imties histograma.....	50
19 pav. Baterijos EVE LF173 SOC įvertis dinaminio testo metu	51
20 pav. Baterijos EVE LF173 talpos C ir SOH histogramos	51
21 pav. Funkcijos $fOCVSOC$ įvertis baterijai EVE LF105	52
22 pav. Baterijos EVE LF105 vidinės varžos R imties histograma.....	53
23 pav. Baterijos EVE LF105 SOC įvertis statinio testo metu	53
24 pav. Baterijos EVE LF105 talpos C ir SOH histogramos	54

Santrumpų sąrašas

Santrumpos:

BMS – baterijų valdymo sistema.

CBA – kaštų ir naudos analizė.

MCMC – Markovo grandinė Monte Karlo.

NPV – grynoji vertė dabartyje.

OCV – atvirosios grandinės įtampa.

PMCMC – Dalelių Markovo grandinė Monte Karlo.

RUL – likęs kokybiško veikimo laikas.

SOC – įkrovos būseną.

SOH – kokybiško veikimo būseną.

Ivadas

Ličio jonų baterijos yra plačiausiai naudojamos baterijos elektros energijai kaupti. Šios baterijos pasižymi dideliu kaupiamos energijos tankiu, todėl jos gali būti gaminamos mažos ir taikomos mobilioje elektronikoje. Dėl greito įkrovimo, lėto iškrovimo ciklo ir mažo savaiminio išsikrovimo ličio jonų baterijos laikomos patikimomis ir naudojamos įvairioje buitinėje ir pramoninėje technikoje bei elektromobiliuose ar didelėse elektros energijos saugyklose.

Ilgą laiką vartojant ličio jonų bateriją stebimas baterijos degradavimo procesas. Baterijos degradavimas yra apibrėžiamas baterijos talpos sumažėjimu dėl elektrodų ir elektrolito medžiagos susidėvėjimo. Pakankamai degradavusios baterijos tolimesnis naudojimas elektroninėje sistemoje gali sukelti nuostolingų ar gyvybei pavojingų gedimų, todėl svarbi galimybė stebėti baterijos būklę nusakančias baterijos būsenas, tokias kaip įkrovos būseną ar kokybiško veikimo būseną.

Mašininio mokymusi grįsti baterijų modeliai geba vertinti baterijos būsenas pasitelkiant tik baterijos veikimo metu surinktus įtampos ir srovės stiprio duomenis, todėl yra tinkami taikyti baterijų valdymo sistemose. Šie celės lygmens modeliai apibūdina vienos baterijos celės būsenas, pagal kurias daroma apibendrinta išvada apie visos baterijos būklę.

Siekiant stebėti baterijos degradaciją per laiką yra reikalinga galimybė atnaujinti baterijos modelio parametrų ir būsenų įverčius, ne tik įprastai atliekant fizinius bandymus, bet ir pasinaudojant eksploataciniais duomenimis. Tam patogu pasitelkti Bajeso metodus. Modelio parametrus išreiškus skirstiniais, modelį ir parametrus galima atnaujinti surinkus daugiau baterijos veikimo duomenų. Be to, galimybė įvertinti rezultatų neapibrėžtumą padeda nustatyti pasirinkto modelio tinkamumą ar iš kelių sudarytų modelių išrinkti tikslesnį.

Tyrimo tikslas – įvertinti ir ištirti ličio jonų baterijos būsenas taikant baterijos eksploatacinius duomenis bei mašininio mokymosi ir Bajeso metodus.

Tyrimo uždaviniai:

1. išanalizuoti mokslinę literatūrą, kurioje aprašomi ličio jonų baterijų būsenų vertinimo modeliai ir metodai;
2. sudaryti mašininio mokymusi ir Bajeso metodais paremtą algoritmą, skirtą įvertinti baterijos būsenas;
3. realizuoti ir ištirti algoritmą, atsižvelgiant į skaičiavimų tikslumą ir spartą lemiančius veiksnius;
4. įvertinti būklę ir kitas baterijos būsenas panaudojant realius ličio jonų baterijų duomenis;
5. atlikti ekonominę kaštų ir naudos analizę baterijos būsenų vertinimo taikymui pagrįsti.

Šis tyrimas dalinai finansuotas Lietuvos mokslo tarybos (LMT) Studentų tyrimai semestrų metu projekto Nr. S-ST-24-115 lėšomis. Vykdyta mokslinė veikla, susijusi su baigiamuoju projektu, apžvelgta 1 priede.

1. Literatūros apžvalga

1.1. Ličio jonų baterijų problematika

Ličio jonų baterijos paplitusios nešiojamoje elektronikoje bei elektromobiliuose dėl didesnio energijos tankio nei kitose pakraunamose elektros energijos kaupimo sistemose. Pastaruoju metu ličio jonų baterijos vis dažniau naudojamos ir elektros energijos tinklų infrastruktūrose [1].

Ličio jonų baterijos vertinamos dėl didelio sukauptos elektros energijos tankio, kuris leidžia ličio jonų akumuliatorius gaminti mažesnius ir lengvai transportuojamus. Be to, šios baterijos pasižymi ilgesniu iškrovimo ciklu bei greitu pakrovimu, mažu savaiminiu išsikrovimu, patikimumu, lyginant su alternatyvomis kaip rūgštiniais akumuliatoriais ar nikelio pagrindo baterijomis. Tačiau, lyginant su alternatyvomis, ličio jonų baterijos dar smarkiai tiriamos ir tobulinamos – šiomis dienomis vis dar gausiai investuojama į tyrimus ir eksperimentinę plėtrą, susijusią su ličio jonų baterijomis [2].

Ličio jonų baterijoms gaminti skirtų medžiagų rinkos dydis 2024 metais įvertintas 41,9 mlrd. JAV dolerių ir numatytas 23,6% kasmetinis augimas ateinantiems 5 metams [3]. Pačių ličio jonų baterijų rinka 2024 metais įvertinta 130 mlrd. JAV dolerių su numatytu kasmetiniu 12% augimu per ateinančius 9 metus. Tokį augimą skatina sparčiai auganti elektromobilių vartotojų populiacija, elektronikos gamyba, ir baterija pakraunamų mašinų atsiradimas ir plitimas įvairioje pramonėje [4].

Ličio jonų baterijų diegimas automobiliuose prisideda prie dekarbonizacijos – mažinamas išmetamų šiltnamio efektą sukeliančių dujų kiekis. Tačiau metalų, naudojamų gaminti baterijas – ličio, kobalto ir kitų – išgavimui ir apdorojimui sunaudojamas didelis kiekis energijos, gaunamos iš iškastinio kuro. Smarkiai didėjant ličio jonų baterijų paklausai, ir veikiant degradavimo efektui, spartėjanti baterijų gamyba gali paradoksaliai labiau prisidėti prie globalinio atšilimo, nei dekarbonizacijos [5].

Dekarbonizacijai įvykdyti reikalinga užtikrinti baterijoms gaminti skirtų metalų tiekimą, tačiau 2020 metais įvykęs bumas baterijų medžiagų rinkoje sukėlė ekstremalų kainų kintamumą. Ličiui išgauti dažnai naudojamo ličio karbonato tonos kaina pakilo nuo 6,5 tūkst. JAV dolerių 2020 metais iki 70 tūkst. JAV dolerių 2022 metais. Tokį staigų kainos šuolį lėmė įvairūs veiksniai, kaip prekybos konfliktai tarp JAV ir Kinijos, tiekimo grandinių sutrikimai per COVID-19 pandemiją, Rusijos karinė agresija prieš Ukrainą.

Nors ličio jonų baterijos yra tapusios standartu elektronikoje ir elektromobiliuose, yra atliekami tyrimai, kuriais siekiama išrasti naują akumuliatoriaus sandarą, kuri patobulintų ir pakeistų dabartines baterijas. Viena tokių naujos kartos baterijų naudotų litį ar kitą metalą kaip anodą ir būtų vykdomos nukleacijos bei dalelių auginimo reakcijos. Tokios baterijos galėtų pasižymėti ypač aukšta talpa [6].

1.1.1. Ličio jonų baterijų degradacija

Vienas didžiausių iššūkių, su kuriuo susiduriama vartojant ličio jonų baterijas, yra baterijos senėjimas. Baterijai degraduojant prastėja jos elektros energijos talpa bei paduodamos srovės stipris, kol baterija tampa nebepanaudojama. Baterijos senėjimo problema yra viena iš labiausiai tyrinėjamų literatūroje [7].

Literatūroje tiriamos įvairios temos, susijusios su ličio jonų baterijų degradavimu. Moksliniuose straipsniuose nagrinėjamos temos apibendrintos 1 lentelėje.

1 lentelė. Temų, pagal kurias tiriamas ličio jonų baterijų degradavimas literatūroje, apibendrinimas

Apibendrinta tema	Tiriamieji objektai	Tyrimų rezultatai
Baterijų degradaciją skatinantys veiksniai [8,9]	Aukšta, žema temperatūra Aukšta, žema įkrova Didelis įkrovimo srovės stipris	Elektrolito oksidacija, dujų susidarymas paspartėja aukštoje temperatūroje Esant aukštai įkrovai ir žemai temperatūrai, susidaro ličio apnašos Esant aukštai ar žemai įkrovai spartėja srovės imtuvo yrimas Didelis srovės stipris, naudojamas įkrovimo metu, smarkiai mažina baterijos talpą, tačiau degradacija priklauso nuo baterijos cheminės sandaros
Modelių, skirtų degradavimo prognozavimui, tipai [8]	Neuroniniai tinklai Atramos vektorių modeliai Gausinių procesų regresija Giliojo mokymosi modeliai	Neuroniniai tinklai padeda efektyviai numatyti senėjimą įvairių tipų baterijoms, geba panaudoti koreliuojančius baterijų duomenis, tačiau sunkiai įvertina tendencijas ilgose laiko eilutėse Atramos vektorių modeliai susidoroja su aukštos dimensijos duomenimis ir yra atsparūs nuo persimokymo, bet branduolio funkcijos ir parametrų atranka veda prie ilgų ir sudėtingų skaičiavimų Gausinių procesų regresija leidžia įvertinti degradavimo prognozių neapibrėžtumą, tačiau papildomi skaičiavimų ir atminties reikalavimai riboja metodo taikymą realiu laiku Giliojo mokymosi metodai geba nustatyti sudėtingus sąryšius tarp rodiklių duomenų rinkinyje ir tiksliai įvertinti degradaciją, bet yra linkę persimokyti, todėl reikalingas didelis kiekis skirtingų baterijų duomenų bendresniam rezultatui gauti
Operacijos, atliekamos su baterijomis, kurių metu stebima degradacija [9]	Įkrovimo protokolas Budėjimo režimas Baterijų testavimas	Siekiant sumažinti įkrovimo laiką ir didelio srovės stiprio įtaką įprastas pastovios srovės ir įtampos įkrovimo protokolas gali būti keičiamas kelių etapų ar pulsiniu įkrovimu Budėjimo režime stebimas spartus degradavimas, kai baterija laikoma aukštos temperatūros aplinkoje ar ekstremalioje įkrovos būsenoje (virš 90% ar žemiau 10%) Elektromobilių baterijų degradavimo numatymui taikomi suderinti globaliai standartizuoti testai, kurių rezultatai artimai atitinka realiai naudojamų automobilių baterijų degradavimą
Atskirų ličio jonų baterijos komponentų susidėvėjimas [9]	Katodo, anodo susidėvėjimas Elektrolito susidėvėjimas	Katodo aktyviosios medžiagos praradimas, sukeltas įskilimų, trupėjimo ir tirpimo, slopina ličio jonų difuziją ir mažina baterijos talpą Degradavimas iš anodo pusės stebimas susidarant kietojo elektrolito paviršiaus sluoksniui, kuriam reikalingas tam tikras kiekis ličio jonų Įkrautoje būsenoje padažnėja elektrolito molekulių skilimas į komponentes, kurios reaguoja su organiniais karbonatais ir kiekvieno ciklo metu suvartoja dalį ličio jonų

Mokslinėje literatūroje pastebimi pagrindiniai baterijos degradavimą spartinantys veiksniai – aukšta temperatūra, ekstremalios įkrovos būsenos reikšmės ir pernelyg stiprios srovės panaudojimas. Šiomis sąlygomis stebimas spartus dėvėjimasis visose baterijos celės komponentėse – nyksta katodo aktyvi medžiaga, elektrolito molekulės skyla ir reaguoja su pašalinėmis medžiagomis, susidaro apnašų sluoksniai. Tokiais būdais celėje mažėja ličio jonų koncentracija ir kartu – baterijos talpa. Dėl to rekomenduojama bateriją įkrauti silpnėsne, besikeičiančia ar pulsuojančia srove, o

budėjimo režime nepalikti visiškai ar beveik visiškai įkrautų ar iškrautų baterijų ir jas laikyti vėsioje aplinkoje.

Skirtingi modeliai yra taikomi įvertinti ir prognozuoti baterijų susidėvėjimą. Sudėtingesni modeliai gali geriau nustatyti sąryšius tarp baterijos veikimo rodiklių ir modeliuoti gilesnius fizikinius ar cheminius procesus, vykstančius celėje, tačiau susiduriama su persimokymo, ilgos trukmės skaičiavimų, didelių duomenų rinkinių ir atminties stokos problemomis.

Dėl tokių baterijos degradavimo padarinių, kaip šalutinių cheminių reakcijų sukeltas dujų susikaupimas, apnašų susidarymas, elektrolito ir elektrodų yrimas, ne tik mažėja baterijos talpa ir naudingumas, tačiau taip pat kyla pavojingo kritinio gedimo grėsmė. Susikaupus dujoms ir apnašoms baterijos pakuotė gali deformuotis, pavyzdžiui, išsipūsti. Tokiu būdu susidaro tolimesni fiziniai baterijos gedimai – įtrūkimai, skilimai, dėl kurių gali išsiliesti skystoji medžiaga ar susidaryti aukštos įtampos srūviai. Dėl ličio jonų stokos ir kietųjų sluoksnių susidarymo elektros energijos perdavimo procesai sulėtėja. Vartojant bateriją įprastu įtampos ir srovės režimu reikalingos spartesnės reakcijos, o dėl to gali susidaryti padidėjęs šilumos išsiskyrimas, kuris dar smarkiau skatina bateriją degraduoti ir net gali sukelti gaisrą [10].

1.1.2. Baterijų pakartotinis panaudojimas

Vienas sprendimų, susijusių su ličio jonų baterijos degradavimu, yra pakartotinai panaudoti pasenusias baterijas. Baterijai degraduojant mažėja elektros energijos talpa. Kai talpa pasiekia 70% pradinės talpos, laikoma, kad praėjo pirmoji dalis baterijos gyvavimo laiko. Kai talpa pasiekia 50%, baterija tampa nebenaudojama ir turi būti pakeista nauja [11]. Dėl aplinkos tvarumo būtina atsižvelgti į galimus būdus pakartotinai panaudoti ličio jonų baterijas.

Vienas būdų pakartotinai panaudoti ličio jonų baterijas yra jas perdirbti. Perdirbant bateriją išmetama vidutiniškai 75% mažiau šiltnamio efektą keliančių dujų nei bateriją pagaminant iš naujai išgautų medžiagų [11]. Tačiau ličio jonų baterijų perdirbimas nėra toks populiarus ir taip dažnai įgyvendinamas, kaip, pavyzdžiui, švino rūgštinių baterijų.

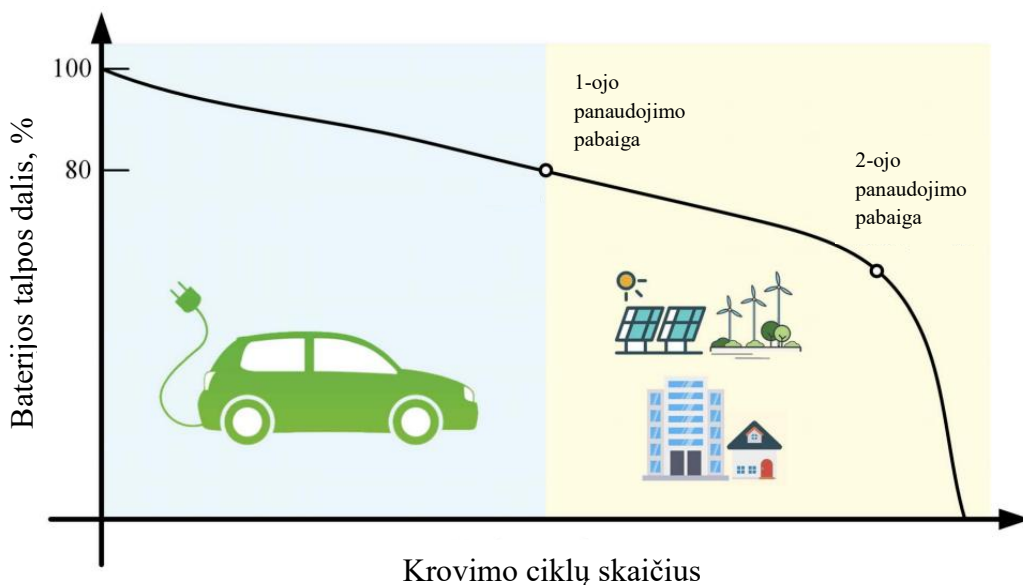
Švino rūgštinių baterijų perdirbimo procentas siekia beveik 100%. Tai lemia kelios priežastys. Švino baterijos vystomos virš 100 metų, todėl jų vidinis dizainas ir perdirbimo procedūros jau yra standartizuotos. Švino rūgštinių baterijų sandara paprasta, todėl jas išardyti ir atskirti jų komponentus nėra sudėtinga. Kadangi anodas ir katodas yra pagaminti iš švino ar švino junginių, iniciatyva perdirbti tokio tipo baterijas didelė dėl šio metalo kainos [12].

Tuo tarpu ličio jonų baterijų perdirbimas yra sudėtingesnis. Vieną baterijos paketą sudaro keli celių rinkiniai, o celės neturi standartinės sandaros – gali skirtis ir fizinis komponentų išdėstymas, ir elektrolito bei elektrodų cheminė sudėtis. Be to, baterijos išardymas gali būti pavojingas ir dėl to tai yra lėtas procesas, reikalaujantis kruopštumo. Kadangi dauguma ličio jonų baterijų yra smulkios mobiliųjų įrenginių baterijos, didžioji dalis baterijų patenka į sąvartynus ir nėra perdirbamos. Tačiau augant ličio jonų baterijų rinkai įsteigti efektyvią žiedinę ekonomiką prieš susidarant didžiuliam atliekų kiekiui yra prioritetas [12].

Perdirbamų ličio jonų baterijų procentas siekia tik apie 5%. Siekiant išgauti kuo daugiau žaliavų, baterijos ardamos, nors kartais taikomas pigesnis variantas – baterijos sutraiskamos ir atskiriami metalų milteliai. Iš metalų oksidų išgaunami grynieji metalai pasitelkiant pirometalurgiją ar

hidrometalurgiją. Daugiausiai išgaunama ličio, mažiau kobalto, nikelio, mangano ir geležies tokia tvarka. Toks išgaunamų metalų išsidėstymas atitinka šių metalų kainas. Baterijų gabenimas, priklausomai nuo perdirbimo šalies, ir išardymas sudaro nemažą dalį perdirbimo išlaidų [13].

Kitas sprendimas yra panaudoti ličio jonų bateriją pakartotinai kitoje taikymo srityje. Pavyzdžiui, pasenusią elektromobilio bateriją, kuri nebetinkama dėl sumažėjusios talpos ir sutrumpėjusio važiavimo atstumo, galima panaudoti namų ūkyje elektros energijos kaupimui. Elektromobilio baterija laikoma netenkinanti reikalavimų kasdieniam transporto priemonės naudojimui, kai jos talpa atitinka 70–80% nominaliosios talpos. Konkrečią ribą, kada elektromobilio bateriją reikalinga keisti, galima nustatyti pagal likusį baterijos kokybiško veikimo laiką, kitaip vadinamą „antruoju gyvenimu“. Elektromobilio akumuliatoriaus degradacijos lemiamus veikimo etapus laike iliustruoja 1 pav. [14].



1 pav. Elektromobilio akumuliatoriaus veikimo etapai pagal degradavimą laike

Kaip matoma 1 pav., baterija, kuri laikoma nebetinkama elektromobiliui, toliau degraduoja tokiu pačiu tempu iki tam tikro taško, kuomet jos talpa staigiai krenta. Iki šio taško bateriją galima naudoti pakartotinai kitoje taikymo srityje, kaip stacionariose energijos kaupimo sistemose, namų ūkyje.

Atsižvelgiant į realius elektromobilių vartotojų poreikius, 1-ojo panaudojimo pabaigos ribą galima nustatyti mažesnę nei 70% nominaliosios talpos. Tokiu atveju maksimizuojamas vienos baterijos išnaudojimas elektromobilyje prieš ją keičiant nauja. Tačiau 2-asis baterijos panaudojimas tampa per trumpas ir dėl to gali būti nevykdomas. Efektyviau 1-ojo panaudojimo pabaigos ribą nustatyti taip, kad būtų galimas pakankamai ilgos trukmės 2-asis panaudojimas.

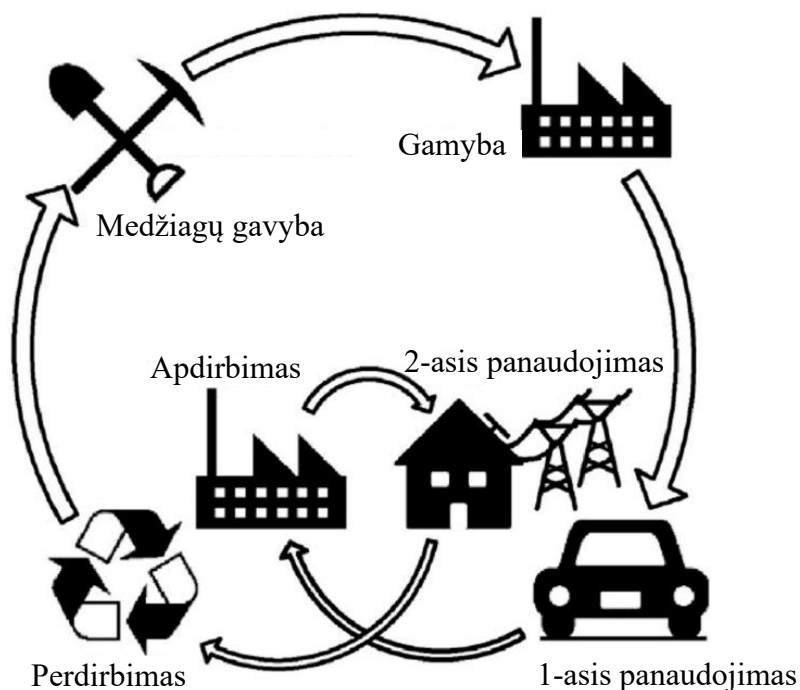
Dažnai elektromobilių akumuliatoriai neatitinka stacionariųjų energijos kaupimo sistemų reikalavimų, todėl, kaip ir perdirbimo atveju, baterijas reikalinga ardyti. Baterijos išardomos į modulius ar celes, ir šiems atskirai atliekami susidėvėjimo testai. Tinkamos pakartotiniam panaudojimui komponentės sudedamos į naujas elektros energijos kaupimo sistemų konfigūracijas [14]. Tokiu būdu apdorojant degradavusias baterijas svarbu turėti žinių apie jų naudojimo pobūdį 1-

ajame pritaikymo etape. Intensyvus baterijos krovimas 1-ajame etape gali nenumatyti paveikti likusį kokybiško veikimo laiką 2-ajame etape.

Baterijas pakartotiniam panaudojimui šiuo metu apdirba dar nedidelis skaičius įmonių pasaulyje. Kai kurios įmonės, pavyzdžiui, Suomijos Fortum ar Romos Enel, susidėvėjusias baterijas pritaikė elektros energijos kaupimo sistemos sudaryti, kurios būtų panaudotos kaip atsarginei energijai jėgainėse. Tačiau yra ir įmonių, kaip Vokietijos RWE Generation, kurios iš susidėvėjusių baterijų gamina didelės talpos baterijas komerciniam panaudojimui [15]. Visos minėtos įmonės yra sudariusios partnerystes su elektromobilių gamintojomis: Volvo, Nissan, Audi. Degradavusias baterijas apdirbimui pakartotinai panaudoti surenka ir transportuoja šios partnerės. Galima teigti, kad nusidėvėjusių elektromobilių baterijų surinkimo ir transportavimo infrastruktūra be gamintojų įsikišimo nėra išvystyta.

Panaudoti pakartotinai skirtos baterijos surinkimo išlaidas sudaro nusidėvėjusių baterijų kaina, pakavimo medžiagų, baterijų testavimo įrenginių kaina, užmokestis darbuotojams, administracijai ir kitos išlaidos. Didžiąją dalį išlaidų sudaro pasenusių baterijų kainos – apie 56%. Baterijų apdorojimas pakartotiniam panaudojimui skatinamas nuolaidomis: degradavusi baterija, kurios talpa C, parduodama pigiau nei nauja baterija, kurios nominali talpa yra C. Nuolaida nustatoma pagal susidėvėjimo lygį, kuris lemia tolimesnę degradaciją, 1-ojo panaudojimo laiką ir numatomas apdorojimo išlaidas. Užmokesčiai darbuotojams ir administracijai sudaro po 13% visų išlaidų, tačiau jie priklauso nuo šalies kurioje operuojama dėl skirtingos kvalifikuoto darbo kainos [16].

Perdirbimo ir pakartotinio baterijos panaudojimo procesus apibendrina žiedinės ekonomikos schema [11] (2 pav.).



2 pav. Žiedinės ekonomikos schema ličio jonų baterijų pakartotiniam panaudojimui

Žiedinė ekonomika, pavaizduota 2 pav., stebima tik elektromobilių akumuliatorių pakartotinio panaudojimo atveju. Kadangi elektromobilių baterijos pasižymi didele talpa, ekonomiškai efektyvu dalinai degradavusią tokio tipo bateriją panaudoti dar kartą stacionariam elektros energijos

kaupimui. Čia įprasta silpnesnė elektros srovė lemia baterijos ilgaamžiškumą net pakartotinio panaudojimo atveju.

Mobiliųjų įrenginių baterijų pakartotinį panaudojimą pagrįsti sudėtingiau. Kaip ir elektromobilių atveju, pakartotinai panaudoti bateriją kitame įrenginyje nėra tinkama, jei degradacija siekia tam tikrą užsibrėžtą ribą. Tačiau mobiliųjų įrenginių baterijos per mažos talpos, kad būtų efektyviai naudojamos energijos kaupimui. Didelis skaičius mobiliųjų įrenginių baterijų gali atstoti vieną elektromobilio akumuliatorių, tačiau palaikyti tokią sistemą iš daugybės komponentų neveiksminga.

Deja, perdirbti nusidėvėjusias mobiliųjų įrenginių baterijas taip pat nėra populiariu. Šių baterijų surinkimo, gabenimo ir ardymo išlaidos viršija perdirbimo metu išgautų metalų vertę. Standartizuotas ličio jonų baterijų vidinės sandaros dizainas padėtų sumažinti išardymo išlaidas [12]. Suvienodinus ardymo procedūras būtų minimizuojamos ekspertų mokymų išlaidos ir nelaimių grėsmė. Tuomet galėtų iškilti poreikis sudaryti infrastruktūrą surinkti ir gabenti mobiliųjų įrenginių ličio jonų baterijas į perdirbimo centrus.

1.1.3. Baterijų senėjimo nustatymas

Galimybė pakartotinai panaudoti pasenusias baterijas įvertinama pagal įvairius rodiklius, tokius kaip kokybiško veikimo būseną (SOH, angl. *state of health*), likęs kokybiško veikimo laikas (RUL, angl. *remaining useful life*), įkrovimo būseną (SOC, angl. *state of charge*) ir kiti. Šie rodikliai leidžia nustatyti, ar bateriją vis dar saugu naudoti tame pačiame ar kitame įrenginyje.

Baterijos saugumui nustatyti egzistuoja įvairūs testai: kritimo, suspaudimo, perdūrimo ar pakaitinimo testai [17]. Tačiau siekiant bateriją panaudoti pakartotinai, saugumą reikia nustatyti nepažeidžiant baterijos. Todėl yra įvertinami baterijos kokybės rodikliai. Kokybės rodikliai ir jų įvertinimo metodai apibendrinti 2 lentelėje [18].

2 lentelė. Baterijos kokybės rodikliai ir jų vertinimo metodai

Rodiklis	Išraiška	Įvertinimo metodai
Įkrovos būseną (SOC)	$\frac{\text{Likęs krūvis}}{\text{Maksimalus krūvis}} \cdot 100\%$	Kulonų skaičiavimo metodas Modeliavimas Mašininio mokymosi metodai Atvirosios grandinės įtampos priklausomybė
Energijos būseną (SOE, angl. <i>state of energy</i>)	$\frac{\text{Likutinė energija}}{\text{Visa baterijos energija}} \cdot 100\%$	Galios integralo metodas Modeliavimas Mašininio mokymosi metodai
Galios būseną (SOP, angl. <i>state of power</i>)	$\frac{\text{Maksimali galia per laiką } T}{\text{Nominali galia}}$	Charakteristikų žemėlapių metodas Modeliavimas Mašininio mokymosi metodai
Kokybiško veikimo būseną (SOH)	$\frac{\text{Talpa}}{\text{Nominali talpa}} \cdot 100\%$	Eksperimentiniai metodai Modeliavimas Mašininio mokymosi metodai
Likęs kokybiško veikimo laikas (RUL)	-	Modeliavimas Mašininio mokymosi metodai

Visiems 2 lentelėje minimiems rodikliams įvertinti egzistuoja tam tikri modeliai, imituojantys procesus baterijos viduje, bei duomenimis grįsti mašininio mokymosi metodai. Pavyzdžiui, nustatyti SOH galima empiriniais metodais, ekvivalenčios grandinės modeliais, elektrocheminiais modeliais, duomenimis grįstais ir hibridiniais modeliais [17].

Baterijos būsenos nusako santykį tarp tam tikro fizikinio rodiklio, reikšmingo baterijos vartojimo metu, esamos vertės ir nominalios ar iš anksto numatytos vertės. Šioms būsenoms įvertinti tinka lengvai pritaikomi metodai, kaip kulonų skaičiavimas ar galios integralas. Tačiau šie metodai prastai prisitaiko prie dinaminių duomenų ir jų paklaidos per laiką didėja [18]. Todėl modeliuoti baterijas ir vertinti jų būsenas taikant mašininio mokymosi metodus tampa vis populiariau.

Aiškiausiai baterijos degradaciją nusako SOH – būseną, tiesiogiai susijusią su baterijos talpos mažėjimu ir RUL nustatymu. RUL neturi aiškos analitinės išraiškos, tačiau yra apibūdinamas paprastai kaip likęs laikas iki baterijos degradavimo, kai dėl per mažos talpos ar susidėvėjusių dalių gresia kritinis gedimas. RUL galima modeliuoti pagal per laiką besivystančius SOH įverčius.

SOC ir SOH kokybės rodikliai dažnai vertinami kartu dėl akivaizdaus sąryšio tarp baterijos talpos ir kaupiamo krūvio. SOC vertinti dažnai taikomi modeliai, gebantys apskaičiuoti priklausomybę tarp atvirosios grandinės įtampos ir SOC [18]. Pagal šią priklausomybę nesunku įvertinti SOC, turint baterijos išėjimo įtampos ir srovės stiprio duomenis. Jei modeliuojant priklausomybę baterijos talpa įtraukiama kaip parametras, jos įvertis panaudojamas apskaičiuoti SOH.

Duomenis, reikalingus modeliuoti baterijų kokybės rodiklius, surenka baterijų valdymo sistema (BMS, angl. *battery management system*). BMS ne tik fiksuoja temperatūrą, srovės stiprį ir įtampą, bet ir atlieka įvairias funkcijas: suteikia kanalą duomenų dalijimuisi tarp baterijos ir įkraunamo įrenginio, balansuoja celių įtampas, užtikrina įkrovimo ir iškrovimo procesų tinkamą veikimą [19]. Tačiau dažnai baterijos kokybės rodiklių apskaičiavimas nėra integruotas į BMS – modeliai, pagrįsti SOC skaičiavimu netenkina norimo tikslumo, elektrocheminiai modeliai sudėtingi skaičiavimo prasme, o duomenimis grįsti metodai neatsparūs išskirtims bei duomenų įvairovei tarp skirtingų baterijų [17].

Siekiant patikrinti baterijos senėjimą ir jo sukeltą saugumo riziką, bateriją galima išardyti ir ištyrus detalių nusidėvėjimą nustatyti kokybės rodiklius. Tačiau ličio jonų baterijų sandara nėra standartinė, todėl reikalingas patyręs ekspertas. Kadangi įtampa baterijos pakuotėje aukšta, gali prireikti specialių įrankių ar automatizuotų robotų pavojui minimizuoti [17]. Kadangi patikrinti baterijos senėjimą išardant nėra ekonomiškai efektyvu, galimybė tiksliai ir greitai apskaičiuoti kokybės rodiklius modeliuojant yra aktualus ir sprendžiamas klausimas.

1.1.4. Kaštų ir naudos analizė

Pasenusios baterijos kokybės rodiklių modelį, kuris būtų tikslus, tikėtų įvairių rūšių ir specifikacijų baterijoms ir veiktų pakankamai greitai, sudaryti sudėtinga. Reikalinga išmėginti daug modelių su įvairiais eksperimentiškai patikrintais baterijų duomenimis. Tokiam projektui pagrįsti galima atlikti kaštų ir naudos analizę (CBA, angl. *cost-benefit analysis*).

Kaštų ir naudos analizė palygina tam tikram projektui atlikti reikalingas lėšas su nauda visuomenei, įprastai taip pat išreikštą piniginiiais terminais. CBA pagrindžia projekto vykdymo vertę, arba

padeda pasirinkti, kuriuos projektus vykdyti turint ribotas lėšas. Projektą pilnai apžvelgianti CBA susideda iš kelių pagrindinių žingsnių:

1. socialinio, ekonominio, politinio bei institucinio konteksto, kuriame bus vykdomas projektas, apibrėžimas;
2. projekto tikslų apibrėžimas;
3. projekto detalių ir dalyvių identifikavimas;
4. paklausos, alternatyvų analizė, poveikio aplinkai tyrimas, techninis planavimas;
5. finansų analizė;
6. ekonominė analizė;
7. rizikos įvertinimas [20].

1-ame žingsnyje apibrėžiamas projekto vykdymo kontekstas. Kontekstas apima socialines, ekonomines sąlygas, pavyzdžiui, demografiją, nedarbo lygį, numatomą BVP kitimą ir kt. Taip pat apžvelgiama esama projektui vystyti skirta infrastruktūra, reglamentuojanti politika ir planai šių aspektų plėtrai ateityje. Įvertinti makroekonomiką ir socialines sąlygas būtina siekiant tiksliai numatyti ateities tendencijas, pavyzdžiui, paklausą projekte nagrinėjamam objektui: produktui ar paslaugai [20].

Projekto uždaviniai, kuriems galima atlikti kaštų ir naudos analizę atskirai, apibrėžiami 2-ame žingsnyje. 3-ame žingsnyje išskiriamos uždaviniams įvykdyti reikalingos dedamosios: žemė, patalpos, infrastruktūra, paslaugos. Taip pat pabrėžiami dalyviai – įmonės, atsakingos už uždavinių įvykdymą ir reikiamų paslaugų ir resursų parūpinimą. Šių aspektų detalus identifikavimas reikalingas įvertinti projektui reikalingas investicijas.

Teorinė galimybė įvykdyti projektą plačiausiai apžvelgiama 4-ame žingsnyje. Atliekama paklausos prognozė, pasitelkiant tam tikrus matematinius modelius. Tiriama paklausos priklausomybė nuo įvairių socialinių ir ekonominių aspektų prognozių. Taip pat šiame žingsnyje apžvelgiamos techninės priemonės, reikalingos atlikti projektui, ir jų pasirinkimo variantai. Techninėms priemonėms priskiriami įrenginiai, specialios patalpos ir kitos technologijos, o alternatyvas apibrėžia gamintojai bei tiekėjai. Suplanuojama gamybos apimtis, ir pagal techninių priemonių alternatyvas įvertinamos galimos išlaidos [20].

Galiausiai, 4-ame žingsnyje įvertinamas teigiamas ir neigiamas poveikis aplinkai projekto vykdymo metu. Atsižvelgiama, ar projektas tenkina tvarumo reikalavimus: nėra prisidedama prie gamtos teršimo, laikomasi išmetamo šiltnamio dujų kiekio reikalavimų ir kompensuojama žala aplinkai pagal atitinkamus įstatymus. Iš kitos pusės, vertinamas ir projekto atsparumas nuo klimato kaitos. Prognozuojama, kaip projekto paklausa ir vykdymo galimybės gali priklausyti nuo ekstremalių situacijų, sukeltų klimato kaitos: karščio bangų, sausrų, audrų, kylančio vandens lygio [20].

Finansų analizės, atliekamoje 5-ame žingsnyje, metu apskaičiuojamas projekto pelningumas vykdytojams ir kitoms suinteresuotoms šalims pinigine verte. Yra įvertinami įeinantys ir išeinantys pinigų srautai, paskirstomi finansavimo šaltiniai. Taip pat kartais nustatoma, kokio minimalaus finansavimo reikia, kad projekto kaštų ir naudos santykis sutaptu su nagrinėjamu alternatyviu projektu. Atlikus finansų analizę, 6-o žingsnio ekonominėje analizėje piniginiai finansų įverčiai perskaiciuojami pagal šešėlines kainas. Tai yra, pelningumo įverčiai koreguojami pagal neiškreiptas resursų, priemonių, paslaugų kainas. Kainų iškreipimas susidaro neefektyvioje rinkoje, kur tiekėjai gali užkelti kainas, įtraukti tam tikrus tarifus ir mokesčius. Taip pat į korekciją įeina įprastai

pinigine verte neįvertintini aspektai, pavyzdžiui, laiko sutaupymas, taršos mažinimas renkant tam tikrus sprendimus.

Paskutiniame, 7-ame žingsnyje vykdoma rizikos ir neapibrėžtumo analizė. Rizika matuojama šalutiniams efektams, galintiems susidaryti projekto vykdymo metu. Šalutinių efektų rizikai priskiriami tikimybiniai skirstiniai, priklausomi nuo tam tikrų projekto parametrų. Taip pat įvertinamas pelningumo rezultato neapibrėžtumas ir jo priklausomybė nuo parametrų – atliekama jautrumo analizė. Tai leidžia nuspręsti, kurių parametrų atranka kritinė palankiems projekto rezultatams.

Projektus galima palyginti pagal naudą ir išlaidas keliais įverčiais. Jei įvykdyti projektą trunka tam tikrą laiko tarpą, reikia apsibrėžti naudos nuvertėjimą per tą laiką. Vertės dabartiniu metu formulė:

$$PV = \frac{P_t}{(1+r)^t}, \quad (1)$$

čia PV – investicijos arba grąžos piniginė vertė dabar, P_t – piniginė vertė ateityje, r – nuvertėjimo dydis, t – laiko vienetų, po kurių gaunamos lėšos, skaičius. Investicijos piniginė vertė dabartiniu laiku neperskaičiuojama, kadangi $t = 0$, t. y. investuojama dabartiniu laiku. Grąžos reikšmė, gauta po t laiko vienetų, yra mažesnė $(1+r)^t$ kartų.

Grynoji vertė dabartyje (NPV, angl. *net present value*):

$$NPV = \sum_{t=0}^T \frac{(B_t - C_t)}{(1+r)^t}, \quad (2)$$

čia NPV – grynoji vertė dabar, B_t – nauda laiko momentu t , C_t – sąnaudos laiko momentu t .

Naudos – kaštų santykis (BCR, angl. *benefit-cost ratio*):

$$BCR = \frac{\sum_{t=0}^T \frac{B_t}{(1+r)^t}}{\sum_{t=0}^T \frac{C_t}{(1+r)^t}}, \quad (3)$$

čia BCR – grynoji vertė dabar, B_t – nauda laiko momentu t , C_t – sąnaudos laiko momentu t [21].

Literatūroje atlikta kaštų ir naudos analizė ličio jonų baterijoms įdiegti į elektros tinklą [22]. Tyrimo metu nustatyta, jog ekonomiškai efektyvu įdiegti ličio jonų baterijas į elektros energijos tiekimo tinklą komerciniams, industriniams, paslaugų sektoriaus vartotojams ir nepriklausomiems elektros tiekėjams, tačiau neefektyvu įprastiems gyventojams. CBA atlikta tik atsižvelgiant į prognozuojamas elektros kainas bei ličio jonų baterijų elektros energijos talpą.

Atliekant CBA projektui, kurio metu kuriamas baterijos senėjimo modelis, reikia atsižvelgti į projekto rezultatą. Jei modeliu aptinkamas baterijos senėjimas ir imamasi tokių veiksmų, kaip perdirdimo ar baterijos panaudojimo kitur, reikia nustatyti naudą visuomenei. Kainą galima įvertinti pinigine verte, kuri reikalinga pagaminti naują bateriją, o naudą – poveikiu aplinkai: anglies, vandens ir energijos sąnaudomis [23].

1.2. Ličio jonų baterijų modeliavimas

Ličio jonų baterijų kokybės rodiklių modeliavimas literatūroje atliekamas modeliais, pagrįstais įvairiais baterijų senėjimo rodmenimis. Baterijos senėjimas gali būti stebimas skirtingais lygiais – (elektrodo ir elektrolito) medžiagų, celės bei visos baterijos pakuotės lygiu. Nuo stebimo lygmens priklauso naudojamų modelių kategorija. Tačiau, siekiant apibrėžti visą baterijos senėjimo procesą, svarbu stebėti visus lygmenis kartu [24].

Giliausiu – medžiagų lygmeniu stebimas baterijos degradavimas dėl elektrodų ir elektrolito medžiagų susidėvėjimo. Baterijos įkrovimo metu ličio jonai juda iš katodo į anodą per elektrolitą, o iškrovimo metu atvirkščiai. Cheminė medžiagų degradacija vyksta ir krovimo bei iškrovimo metu, ir nenaudojant baterijos [25]. Pagrindiniai medžiagų lygmens degradacijos tipai:

- elektrodų medžiagos sumažėjimas: įtrukimas elektrodo paviršiuje, dalies nuskilimas, apnašos, padengiančios elektrodo paviršių;
- ličio jonų kiekio sumažėjimas: parazitinės šalutinės cheminės reakcijos, ličio sluoksnio susidarymas ant vidinių baterijos paviršių;
- kitų elektroninių dalių nusidėvėjimas: kontakto praradimas, jungiamosios medžiagos suirimas [26].

1.2.1. Elektrocheminiai modeliai

Baterijų modeliavimas medžiagų lygmeniu atliekamas elektrocheminiais modeliais. Šie modeliai imituoja vykstančias chemines reakcijas, jonų dalelių dinamiką ir įvertina vidines bei išorines baterijos charakteristikas, kaip SOC ir SOH. Elektrocheminiams modeliams priklauso tokie modeliai, kaip pseudo-2-dimensijų (P2D, angl. *pseudo-2-dimensional*), vienos dalelės (SP, angl. *single particle*).

P2D modelis apibūdina dalelių dinamiką dalinėmis diferencialinėmis lygtimis, remiantis porėtų elektrodų teorija [27] ir koncentruotų tirpalų teorija. Elektrodai laikomi porėtomis matricomis, kurias apibūdina sferinės dalelės, apsuptos elektrolito. Ličio jonų judėjimas iš ir į elektrodą modeliuojamas per šių dalelių paviršiaus plotą [28]. Modelio lygtys apibrėžia kietosios fazės ličio jonų koncentraciją elektroduose pagal sferinių dalelių difuzijos dėsnį, skystosios fazės ličio jonų koncentraciją elektrolite, kietosios ir skystosios fazės potencialus pagal Omo dėsnį, jonų praskverbimą per porų sienelės pagal Butler-Volmer kinetikos lygtį.

Dėl didelio skaičiaus diferencialinių lygčių P2D identifikuoti modelio parametrus sudėtinga ir rizikuojama persimokyti. Parametrus nustatyti taikomos įvairios procedūros: neapibrėžtumo ir jautrumo analizė, parametrų koregavimas rankiniu būdu, harmoninė paieška su daliniu optimizavimu [29]. Taip pat siūlomi supaprastinti modelio variantai, kaip parabolinė profilio aproksimacija (PP, angl. *Parabolic Profile*), kur kietosios fazės koncentracija aproksimuojama polinomu, o tai suprastina dalines diferencialines lygtis į algebrines diferencialines lygtis. Tokia transformacija pagreitina skaičiavimus, o tikslumas priklauso nuo pasirinkto polinomo eilės [28].

SP modeliui daroma prielaida, jog elektrodai yra sudaryti iš tam tikro skaičiaus vienodo dydžio sferinių dalelių, ir srovė tolygiai pasiskirsčiusi per elektrodus. Tuomet kiekvienas elektrodas gali būti aproksimuojamas viena sferine dalele. SP modelis apibrėžiamas mažesniu skaičiumi paprastųjų diferencialinių lygčių, todėl pasižymi greitesniais skaičiavimais [30]. Deja, modelis prastai

apibūdina dinamikas baterijoje su aukštu C įvertinimu (angl. *C-rate*), tai yra, kai baterija įkraunama ar iškraunama didesniu greičiu, kadangi SP modelis neapibrėžia jonų dinamikos elektrolite.

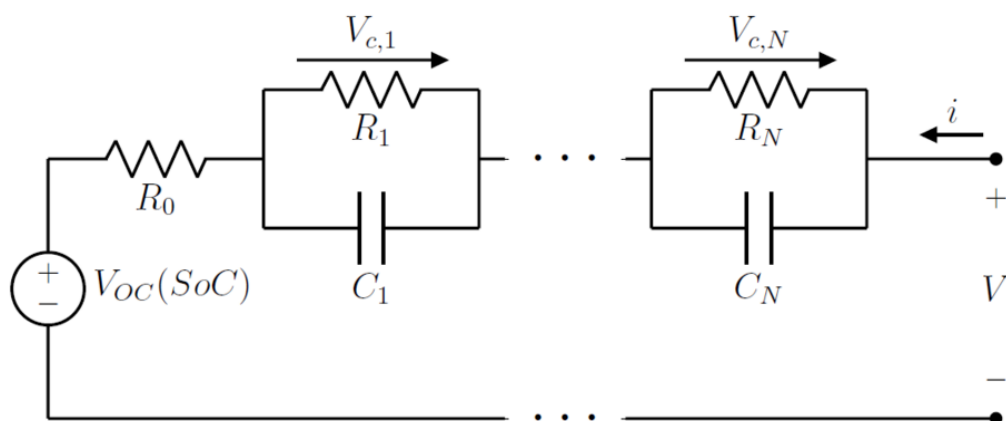
Literatūroje siūlomi įvairūs SP modelio papildymai, siekiant padidinti tikslumą visomis sąlygomis, įtraukti degradacijos elementą ir panašiai. Išplėstinis SP (ESP, angl. *Extended Single Particle*) modelis įtraukia skystosios fazės difuzijos procesą. Kitos variacijos įtraukia parabolinę ličio jonų koncentracijos aproksimaciją, skystosios fazės potencialo ir medžiagų balansą bei jonų koncentracijos elektrolite skirstinį [31]. Pagerintas SP (ISP, angl. *Improved Single Particle*) kompensuoja pagrindinius žalą baterijai keliančius veiksnius – temperatūrą ir srovės stiprį [32].

Medžiagų lygmens baterijų modeliai, kaip P2D ir SP, teikia tikslus rezultatus, nes apima fizinius ir cheminius baterijos parametrus ir apibrėžia ličio jonų elektrocheminę dinamiką įkrovimo bei iškrovimo metu. Tačiau, tokio tipo modeliai nėra dažnai taikomi baterijų valdymo sistemose baterijos kokybės būklei nustatyti dėl sudėtingų ir daug laiko reikalaujančių skaičiavimų, kadangi modelius sudaro diferencialinės lygtys su dideliu skaičiumi parametrų [24]. Be to, skirtingos baterijų fizinės ir cheminės sudėtyys lemia skirtingų modelių efektyvumą ir tuo pačiu – pritaikymą. Todėl nėra vieno tinkamiausio modelio visoms galimoms ličio jonų baterijų cheminėms sudėtyms – ličio geležies fosfato, ličio mangano oksido, ličio nikelio kobalto ir kt., bei fizinėms sandaroms – cilindro, stačiakampės formos, plokščios su skirtingais matmenimis.

1.2.2. Ekvivalenčios grandinės modeliai

Celės lygmens ličio jonų baterijų modeliai apibrėžia ekvivalenčios elektros grandinės procesą su nuo laiko priklausomais elementais. Vietoje elektrocheminių reakcijų celės viduje stebimi elektros dėsnius apibūdinantys kintamieji: įtampa, varža, srovės stipris. Baterijos celės lygmens degradacija stebima elektros energijos kaupimo metu ir naudojimo metu. Degradacija kaupimo metu siejasi su SOC, celės temperatūra ir įtampa. Degradavimas, stebimas naudojimo metu siejamas su SOC, iškrovimo lygmeniu (DOD, angl. *Depth of Discharge*), celės temperatūra ir srovės stipriu įkrovimo ar iškrovimo metu [24].

Baterijos, apibrėžtos ekvivalenčia grandine, schema pateikta 3 pav.



3 pav. Baterijos ekvivalenčios grandinės schema

Ekvivalenčios grandinės modelį sudaro pagrindinės dalys – įtampos šaltinis ir nuosekliai prijungtas varžas. Papildomai gali būti lygiagrečiai prijungti vienas ar keli varžo-kondensatoriaus tinklai.

Pagal prijungtų tinklų skaičių skirstomi ekvivalenčios grandinės modeliai. Baterijos ekvivalenčios grandinės modelių tipai pateikti 3 lentelėje [33].

3 lentelė. Ekvivalenčios grandinės modelių tipai

Ekvivalenčios grandinės modelio tipas	Modelio komponentės	Privalumai	Trūkumai
Rint modelis	Įtampos šaltinis Nuoseklus varžas	Paprasčiausias parametų įvertinimas Greičiausi skaičiavimai	Negebėjimas prisiderinti prie dinaminių duomenų
1-os eilės Thevenin modelis	Įtampos šaltinis Nuoseklus varžas 1 lygiagretus varžo-kondensatoriaus tinklas	Geriau įvertina ir modeliuoja dinamiškus įtampos duomenis	Ribotas tikslumas, kai modeliuojami sudėtingos dinamikos duomenys
N-os eilės Thevenin modelis	Įtampos šaltinis Nuoseklus varžas N lygiagretūs varžo-kondensatoriaus tinklai	Didelis tikslumas Įvertinamos trumpo ir ilgo periodo dinamikos, poliarizacijos efektai	Sudėtingas parametų įvertinimas

Renkantis ekvivalenčios grandinės modelio tipą baterijų būsenoms vertinti, svarbu atsižvelgti į skaičiavimų sudėtingumą ir norimo pasiekti tikslumo balansą. Įprastai literatūroje nagrinėjami Thevenin modeliai iki 2-os eilės, nes aukštesnių eilių Thevenin modelių tikslumo privalumai per menki, lyginant su padidėjusiu parametų vertinimo sudėtingumu.

Baterijos nusidėvėjimui modeliuoti taikomi mašininio mokymosi modeliai bei empiriniai modeliai. Mašininio mokymo modeliai, pavyzdžiui, atramų vektorių modeliai (SVM, angl. *Support Vector Machine*) ar neuroniniai tinklai, yra mokomi išgauti SOH iš įtampų skirtumo kreivės. Tokiems modeliams pakanka nesunkiai išgaunamų duomenų: įtampos, srovės, temperatūros. Be to, šiuos modelius galima papildyti varžos, poliarizacijos elementais, sujungti su empiriniais, regresiniais modeliais. Dėl nesunkios matematinės realizacijos ir tikslų rezultatų mašininio mokymo modeliai dažnai pritaikomi, pavyzdžiui, baterijų valdymo sistemose. Tačiau, sėkmingas modelių panaudojimas reikalauja didelio eksperimentiškai surinktų duomenų kiekio [25].

Empiriniai modeliai apibrėžia sąryšį tarp baterijai žalingų veiksnių ir tokiu būdu sudaro analitiškai aiškia išraišką tarp baterijos kokybės rodiklių ir degradaciją skatinančių veiksnių. Dėl paprastumo šie modeliai taikomi ne tik baterijos nusidėvėjimui stebėti realiu laiku baterijų valdymo sistemoje, bet ir planuojant baterijų dizainą [25]. Pavyzdžiui, sudėtinėse elektros energijos kaupimo sistemose didelis skaičius ličio jonų baterijų yra sudedamos gretimai. Netinkamai atsižvelgus į karščio pasiskirstymą per sistemą gresia degradacija ir gedimai, kai temperatūra sparčiai kyla įkrovimo bei iškrovimo metu. Tuomet reikalinga šilumos valdymo sistema, kuri gali būti paremta pusiau empiriniu modeliu. Tokio tipo modelis nustato baterijos šilumos generavimo greitį pagal varžą ir entropijos pokytį, apskaičiuojamą duomenimis grįžtais metodais, ir poliarizaciją, gaunamą aproksimuojant ličio difuzijos procesą [34]. Empirinis modelis, skirtas matuoti degraduojančios baterijos mažėjančią talpą, gali būti tikslinamas naujinant parametrus duomenimis grįžtais algoritmais [35].

Nors empiriniai ir mašininio mokymosi modeliai yra efektyvūs baterijos modeliavimui celės lygmeniu, jų pritaikymas kelia iššūkių. Surikti didelį duomenų kiekį, reikalingą apmokyti ir kalibruoti modelius, gali ilgai užtrukti ir reikalauti dažno ir smarkaus baterijos naudojimo. Dažnai

modeliai yra apmokomi pagreitinto įkrovimo ar iškrovimo bei aukštos temperatūros sąlygomis. Tai riboja modelių efektyvumą taikant duomenis, gautus įprastinio baterijos naudojimo sąlygomis. Taip pat svarbu atsižvelgti į visus baterijai žalingus veiksnius sudarant senėjimo stebėjimo modelį. Empiriniai ir mašininiu mokymusi grįsti modeliai gali neapčiuopti visų bateriją neigiamai veikiančių veiksnių ir jų tarpusavio sąveikų. Be to, šie modeliai gali per daug supaprastinti celės vidinius procesus ir nepakankamai paaiškinti degradacijos, kaip galėtų medžiagų lygmens modeliai. Galiausiai, celės lygmens modeliai gali būti specializuoti konkrečiam baterijos gyvavimo ciklo laikotarpiui modeliuoti. Tuomet pilną ciklą apibrėžiantis modelis yra sudėtinis, o jį kalibruoti sudėtinga [25].

1.2.3. Baterijos pakuotės modeliavimas

Visos ličio jonų baterijos pakuotės lygmens modeliai yra aktyviai tiriami, tačiau dar nėra matematiškai išvystyti. Baterijos celės, išdėstytos nuosekliai arba lygiagrečiai, gali degraduoti skirtingu tempu dėl įvairios sudėties ar pagaminimo sąlygų bei skirtingos apkrovos. Be to, dėl skirtingos temperatūros atskiros celės ne tik genda nevienodu tempu, bet ir gali paveikti viena kitą. Todėl yra sudėtinga apibrėžti vientisą modelį, tinkamai apibūdinantį visos sistemos susidėvėjimą [24].

Inkrementinė talpos analizė gali būti taikoma baterijos, kurios celės išdėstytos lygiagrečiai, talpos sumažėjimui nustatyti pagal celių vidinės varžos, temperatūros skirtumus [36]. Sprendimas nuosekliai išdėstytų celių konfigūracijai yra analizuoti tik vieną, labiausiai nusidėvėjusią celę ir pagal ją daryti išvadą apie visą bateriją. Šis metodas dažniausiai pervertina baterijos nusidėvėjimo lygį. Todėl taikomas tikimybinis degradacijos įvertinimas, atsižvelgiant į celių talpų skirstinį. Tačiau šis būdas gali nuvertinti baterijos nusidėvėjimo lygį.

Visai baterijos pakuotei modeliuoti efektyviausi išlieka celės lygmens modeliai, taikomi kiekvienai celei atskirai. Tačiau priklausomai nuo celių skaičiaus, reikalingas saugoti duomenų kiekis gali būti per didelis bei skaičiavimo laikas per ilgas. Palengvinti duomenų saugojimą ir skaičiavimus galima sudarant reprezentatyvią celių imtį, tačiau tokiu būdu paaukojamas modelio tikslumas [24].

1.2.4. Bajeso metodai baterijų modeliavimui

Bajeso statistikos metodai gali būti taikomi ir medžiagų lygio elektrocheminiams, ir celės lygio ekvivalenčios grandinės modeliams ne tik parametrų identifikacijai, bet ir jų skirstinių naujinimui degraduojant baterijai [37]. Pavyzdžiui, baterijos susidėvėjimo modelį galima apmokyti pagreitinto nusidėvėjimo režimu veikiančių baterijų duomenimis. Šie duomenys įprastai apima visą baterijos gyvavimo laikotarpį. Tuomet, norint modelį pritaikyti įprastu režimu naudojamoms baterijoms, pakanka nedidelio kiekio eksperimentinių duomenų parametrų atnaujinimui Bajeso metodais [38].

Bajeso metodais taip pat galima atlikti parametrų ar net modelių atranką. Pasitelkiant Monte Karlo metodais sugeneravus modelio parametrų imtį pagal aposteriorinį skirstinį, atliekama neapibrėžtumo analizė padeda nustatyti neužtikrintumą modelio rezultatais, o jautrumo analizė – jį priskirti parametrų neapibrėžtumui [39]. Iš įvairiausių modelių išsirinkti vieną tinkamiausią duomenims galima išintegruojant parametrus iš tikėtinumo funkcijos. Tuomet gaunama sąlyginė tikimybė išgauti turimus duomenis, priklausomai nuo pasirinkto modelio [40].

Dalelių filtro algoritmas (PF, angl. *Particle Filter*) gali būti naudojamas nustatyti baterijos likusiam veikimo laikui. Apsibrėžus baterijos talpos funkciją nuo atliktų iškrovimo ir įkrovimo ciklo skaičiaus, kreivės parametrai paaiškinami sistemos būsenų lygtimis, o baterijos talpa – stebėjimų lygtimi. Dalelių filtras yra naudojamas aproksimuoti aposteriorinį būsenų skirstinį tam tikru dalelių skaičiumi su atitinkamais svoriais. Kartais susiduriama su dalelių degradacijos problema – didelis skaičius dalelių turi svorį, artimą nuliui. Tuomet nauja dalelių imtis sugeneruojama per glaustai, o tai lemia mažesnę modelio tikslumą. Tokiu atveju galima panaudoti Markovo grandinės Monte Karlo (MCMC, angl. *Markov Chain Monte Karlo*) metodą dalelių įvairovei išlaikyti [41].

MCMC metodas yra naudojamas generuoti imtims iš sudėtingų bei didelės dimensijos skirstinių. Atliekant MCMC sudaroma imties elementų Markovo grandinė, kurios stacionarusis skirstinys ir yra tikslinis skirstinys. MCMC metodas dažnai naudojamas generuoti elektrocheminių modelių parametrų imtims, tačiau metodą taip pat galima panaudoti norint sudaryti aposteriorinį parametrų skirstinį ir rasti optimalų parametrų rinkinį, maksimizuojantį šį skirstinį [39].

Įprasti MCMC metodai sunkiau susidoroja su būsenų erdvės modeliais dėl stipraus ryšio tarp nestebimojo Markovo proceso ir parametrų. Dalelių filtras padeda daryti išvadas apie nestebimąjį procesą turint parametrus, bet prastai veikia parametrų nežinant. Dalelių filtro ir MCMC apjungimas vadinamas Dalelių Markovo grandinės Monte Karlo (PMCMC, angl. *Particle Markov Chain Monte Karlo*) algoritmu. Generuojant imties elementus, kiekvienoje MCMC algoritmo iteracijoje panaudojamas dalelių filtras: MCMC skirtas parametrų naujinimui, o dalelių filtras – nestebimojo proceso naujinimui, turint konkrečias parametrų reikšmes [42].

Apibendrinant literatūros apžvalgą, ličio jonų baterijos modeliuojamos įvairaus sudėtingumo modeliais, kurių tinkamumas priklauso nuo baterijos cheminės ir fizinės sandaros, bei turimų iškrovimo ar įkrovimo duomenų apimtys. Ekvivalenčios elektros grandinės modeliai apibendrintai modeliuoja baterijos celę, pagal kurios senėjimą galima daryti išvadas ir apie visos baterijos pakuotės būklę. Ekvivalenčios grandinės modeliai yra matematiškai nesudėtingi, todėl yra tinkami pritaikyti baterijų valdymo sistemose.

Modelio parametrų naujinimui degraduojant baterijai tinkami Bajeso metodai, ypač dalelių Markovo grandinės Monte Karlo algoritmas, apjungiantis dalelių filtro ir MCMC metodų privalumus. Tačiau esant sudėtingam būsenų erdvės modeliui su daug duomenų, PMCMC algoritmas reikalauja didelio skaičiavimų kiekio ir gali trukti ilgai [43]. Todėl sudarant baterijos degradavimo modelį svarbu nustatyti pakankamai paprastą būsenų erdvės modelį, tinkamus apriorinius ir perėjimo skirstinius tikslumui gerinti ir ištirti PMCMC algoritmo greitinimo galimybes.

Baterijų būsenų vertinimo ekonominę vertę galima įvertinti atliekant kaštų ir naudos analizę. Būsenų vertinimas leidžia nustatyti baterijos degradavimo lygį, o šis – likusį baterijos kokybiško veikimo laiką. Pagal RUL galima nustatyti degradavusios ir elektromobiliui nebetinkamos baterijos pakartotinio panaudojimo galimybes kitoje pritaikymo srityje, pavyzdžiui, stacionariose elektros energijos kaupimo sistemose. Tokio baterijos pakartotinio panaudojimo ekonominę efektyvumą galima įvertinti kaštų ir naudos analize, ir palyginti su kitais baterijų gamybos atvejais: gamyba iš naujai išgautų medžiagų bei gamyba iš perdirbtų medžiagų.

Atliekant ekonominę kaštų ir naudos analizę svarbu apžvelgti socialinį, ekonominį, institucinį ir politinį kontekstą, kuriame būtų vykdomi projektai. Reikalinga apsibrėžti vykdomų projektų tikslus,

susijusius dalyvius ir objektus. Numačius projekto metu gaminamo produkto ar kuriamos paslaugos paklausą, projekto vykdymo poveikį aplinkai, galima atlikti finansinę ir ekonominę analizę, kur susumuojamos išlaidos ir sugeneruota nauda, įvertinta pinigine verte. Atsižvelgus į projektų jautrumą įvairiems rizikos veiksniams alternatyvos palyginamos apskaičiuojamais rodikliais, pavyzdžiui, grynąja verte dabartyje.

2. Tyrimo metodai ir duomenys

2.1. Kaštų ir naudos analizės planas

Įvertinant baterijos būsenas nustatomas baterijos degradavimo lygis, o jo kitimą stebint laike numatomas likęs kokybiško veikimo laikas. Tokiu būdu galima įvertinti galimybę bateriją panaudoti pakartotinai, šiai degradavus tik dalinai. Siekiant pagrįsti baterijų būsenų stebėjimo ekonominę naudą aktualu palyginti degradavusių baterijų pakartotinio panaudojimo ekonominę naudą ir išlaidas su tiesioginiu baterijų perdirbimu, bei atveju, kai baterija pagaminama iš naujai išgautų medžiagų.

Kaip nustatyta atlikus literatūros analizę, ličio jonų baterijų perdirbimas bei apdirbimas pakartotiniam panaudojimui taikomas dažniausiai tik elektromobilių baterijoms. Nešiojamųjų įrenginių baterijų perdirbimas ekonomiškai neefektyvus dėl surinkimo bei transporto kaštų ir mažo išgaunamo medžiagų kiekio. Nusidėvėjusios elektromobilių baterijos pakartotinai panaudojamos elektros energijos kaupimui tinkle, namų ūkyje. Todėl tolimesnėje analizėje apsiribojama baterijų, skirtų energijos kaupimui, gamyba iš naujai išgautų medžiagų, iš perdirbant gautų medžiagų ir iš elektromobilio baterijos celių, apdorotų pakartotiniam panaudojimui.

Investicijų grąžą trims nagrinėjamiems atvejams galima įvertinti naudojant grynąją dabartinę vertę:

$$NPV = \sum_{t=0}^T a_t S_t = \sum_{t=0}^T \frac{(B_t - C_t)}{(1 + r)^t}, \quad (4)$$

čia a_t – diskonto daugiklis, S_t – skirtumas tarp naudos, įvertintos pinigine verte, B_t ir kaštų C_t laiko momentu t , r – diskonto norma. Finansinės analizės atveju naudos ir kaštų piniginės vertės skaičiuojamos pagal rinkos kainas, tačiau ekonominės analizės atveju vertės perskaičiuojamos pagal šešėlines kainas ir pridedamos tiesiogiai pinigais nevertinamos dedamosios. Dėl paprastumo, tyrimo metu naudos ir kaštų piniginės vertės skaičiuojamos rinkos kainomis, tačiau į naudą įtraukiami sutaupyti resursai, energija, sumažintas išmetamų šiltnamio dujų kiekis gaminant baterijas iš perdirbtų medžiagų ar pakartotiniam panaudojimui skirtų dalių.

Pirmuoju atveju, kai baterijos gaminamos iš naujai išgautų medžiagų, kaštai priklauso nuo energijos kaupimui skirtų baterijų paklausos, medžiagų kainos ir įvairių paslaugų, pavyzdžiui, atvežimo, surinkimo, administracijos kainų. Kadangi tokios baterijų gamybos infrastruktūra jau išvystyta, papildomų investicijų įtraukti nereikia. Naudos vertė apskaičiuojama pagal pagamintų baterijų pardavimo kainą.

Antruoju ir trečiuoju atveju prie kaštų būtina įtraukti pradines investicijas, reikalingas susidėvėjusių baterijų surinkimo, transportavimo infrastruktūrai įdiegti, atitinkamiems perdirbimo ar išardymo įrenginiams įsigyti. Daroma prielaida, kad visas baterijos perdirbimas – medžiagų išgavimas ir naujos baterijos surinkimas – atliekamas toje pačioje įstaigoje. Naudos vertė abiem atvejams taip pat apskaičiuojama pagal parduodamų baterijų kainas, tačiau įtraukiama ir sutaupytų resursų, energijos, sumažinto išmetamų šiltnamio dujų kiekio sukeliama nauda.

Perdirbimo ir pakartotinio panaudojimo atveju yra nežinomų kaštų verčių – investicijų, reikalingų sukurti ir įdiegti atitinkamai infrastruktūrai. Apskaičiavus NPV baterijų gamybos iš naujų medžiagų atveju galima įvertinti maksimalias galimas investicijas, su kuriomis kitų nagrinėjamų atvejų NPV

prilygtų tradicinės baterijų gamybos atvejį. Pagal maksimalias galimas investicijas daroma išvada apie atitinkamo atvejo įgyvendinimo galimybes.

Baterijų ir jų medžiagų rinkos duomenys

Ličio jonų baterijų, skirtų elektros energijos kaupimui, rinkos dydis 2024 m. įvertintas 49,4 mlrd. JAV dolerių, ir numatytas 21,72% kasmetinis prieaugis iki 2034 m. [44]. Tačiau, norint įvertinti baterijų gamybos ir pardavimo kainas svarbesnis baterijų kiekio augimas. Kadangi kiekviena baterija gali turėti skirtingą sandarą, baterijas skaičiuoti vienetais neadekvatu. Todėl ličio jonų baterijų gamybos apimtis kartais vertinama tonomis, bet dažniau – kilovatvalandėmis (kWh). Globaliai numatomas bendros baterijų, skirtų elektros energijos kaupimui, talpos augimas nuo 86 mln. kWh 2023 m. iki 1200 mln. kWh 2030 m. [44]. Baterijų, kurios apdorotos panaudoti pakartotinai, rinkos dydis 2025 m. įvertintas 1,2 mlrd. JAV dolerių, numatytas kasmetinis augimas – 25,5% iki 2030 m., o bendra baterijų talpa globaliu mastu – apie 450 mln. kWh [45].

Skaičiuojant baterijų gamybos išlaidas dėl medžiagų, svarbu atsižvelgti į baterijų cheminę sandarą. Kiekviena baterija gali turėti skirtingą sandarą, pavyzdžiui, ličio geležies fosfato ar ličio nikelio mangano kobalto oksido. 2020 m. atliktas tyrimas įvertino vidutinės elektromobilio baterijos sandarą [46]:

4 lentelė. Vidutinės ličio jonų baterijos sandara ir medžiagų kainos

Medžiaga	Masės dalis, %	Medžiagos kaina 2025 m., JAV dol./kg
Grafitas	28,1	20,00
Aliuminis	18,9	2,47
Nikelis	15,7	15,57
Varis	10,8	10,68
Plienas	10,8	3,08
Manganas	5,4	0,47
Kobaltas	4,3	33,70
Litis	3,2	46,60
Geležis	2,7	0,16

Medžiagų kainos rastos Trading Economics platformoje. Ličio kaina apskaičiuota iš ličio karbonato kainos, pagal ličio masės dalį junginyje. Geležies kaina apskaičiuota pagal rūdos kainą ir joje esančios geležies masės dalį. Ne visų medžiagų kainų prognozės ateinantiems 5 metams laisvai prieinamos, todėl skaičiavimams yra naudojamos šių metų kainos.

2.2. Matematinų metodų apžvalga

2.2.1. Būsenų erdvės modelis

Būsenų erdvės modelį sudaro du diskretaus laiko stochastiniai procesai. Pirmasis procesas, žymimas X_t , yra Markovo grandinė – proceso reikšmė tam tikru laiko momentu priklauso nuo reikšmės praėjusiu momentu. Šis stochastinis procesas nėra stebimas tiesiogiai. Antrasis procesas, žymimas Y_t , yra stebimas tiesiogiai, ir proceso reikšmė tam tikru momentu priklauso nuo proceso X_t reikšmės tuo pačiu momentu.

Stochastinis procesas X_t dažniausiai apibūdina sistemos būseną, kurią norima įvertinti, o Y_t – informaciją, susijusią su sistemos būseną, gaunamą tam tikrais išmatavimais. Pavyzdžiui, X_t gali apibūdinti judančio objekto poziciją erdvėje: automobilio nuvažiuotą atstumą nuo pradžios taško, arba laivo, plaukiančio jūroje, dvimatę poziciją. Kai tiesiogiai nestebimas procesas X_t , apie jį suteikti informacijos gali stebimasis procesas Y_t : automobilio greitis, stebimas spidometru, ar radaru matuojamas atstumas nuo laivo iki kitų objektų.

Kadangi modeliuojamą sistemą apibūdina stochastiniai procesai, modelis apibrėžiamas keliais pagrindiniais skirstiniais: $p_0^\theta(x_0)$ nusako pradinės būsenos skirstinį, $p_t^\theta(x_t|x_{t-1})$ apibūdina būsenos perėjimo iš praėjusios būsenos x_{t-1} į naują būseną x_t tikimybių skirstinį, ir $f_t^\theta(y_t|x_t)$ – stebimo proceso tikimybių skirstinį, priklausomą nuo atitinkamo laiko momento būsenos. Skirstinių parametrų rinkinys žymimas θ .

Ličio jonų baterijų ekvivalenčios grandinės modelio atveju sudaromas būsenų erdvės modelis, kurio nestebimasis procesas X_t yra baterijos įkrovimo būseną SOC, o stebimasis procesas Y_t yra baterijos išėjimo įtampa. Pradinės būsenos skirstinys priklauso nuo turimų baterijos duomenų. Pavyzdžiui, turint baterijos duomenis, prasidedančius su visiškai įkrauta baterija, pradinės būsenos skirstinį galima nusistatyti $X_0 = x_0 \sim N(1, 0, 1)$. Būsenos perėjimo skirstinys priklauso nuo srovės stiprio ir baterijos talpos:

$$X_t|X_{t-1} = x_t \sim N\left(x_{t-1} - \frac{\Delta t \cdot I}{C}, \sigma_x^2\right), \quad (5)$$

čia Δt – laiko skirtumas tarp gretimų stebėjimų sekundėmis, I – srovės stipris amperais, C – baterijos talpa ampervalandėmis.

Stebinys y_t yra BMS išmatuota išėjimo įtampa laiku t . Išėjimo įtampa siejama su atvirosios grandinės įtampa (OCV, angl. *open current voltage*) lygtimi

$$V = V_{OCV} - I \cdot R, \quad (6)$$

čia V – išėjimo įtampa, V_{OCV} – atvirosios grandinės įtampa, I – srovės stipris, R – baterijos vidinė varža. Todėl stebimojo proceso skirstinys, priklausantis nuo nestebimosios būsenos x_t , apibrėžiamas

$$Y_t|X_t = y_t \sim N(f_{OCV}(x_t) - I \cdot R, \sigma_y^2), \quad (7)$$

čia $f_{OCV}(x)$ – funkcija, nusakanti priklausomybę tarp SOC ir OCV, R – baterijos vidinė varža omais, I – srovės stipris amperais.

Funkcija $f_{OCV}(x)$ apibrėžia sąryšį tarp baterijos įkrovos būsenos ir atvirosios grandinės įtampos. Funkcijos kreivė yra svarbi charakteristika, naudinga vertinant baterijos būklę, kokybiško veikimo būseną. Priklausomybė tarp OCV ir SOC dažniausiai išreiškiama tam tikros eilės polinomu ar logaritmais. Funkcijos $f_{OCV}(x)$ parametrai įtraukiami į būsenų erdvės modelio parametrų θ rinkinį. Dėl to siekiant nustatyti baterijos įkrovos būseną svarbus uždavinys yra įvertinti modelio parametrus.

Modelio parametrams įvertinti dažnai pasitelkiama tikėtinumo funkcija. Būsenų erdvės modelio atveju tikėtinumo funkcija:

$$p_{\theta}(y_{0:T}) = \int p_0(x_0) \prod_{t=0}^T f_t^{\theta}(y_t|x_t) \prod_{t=1}^T p_t^{\theta}(x_t|x_{t-1}) dx_{0:T}, \quad (8)$$

čia T – galutinis laiko momentas, o tikimybių tankio funkcijos $p_0(x_0)$, $f_t^{\theta}(y_t|x_t)$ ir $p_t^{\theta}(x_t|x_{t-1})$ atitinkamai apibrėžia atsitiktinių dydžių X_0 , $Y_t|X_t$ ir $X_t|X_{t-1}$ skirstinius. Esant pakankamai dideliui duomenų kiekiui, tikėtinumo funkcijos integralas tampa per sudėtingas ir neišsprendžiamas.

2.2.2. Markovo grandinės Monte Karlo metodas

Markovo grandinės Monte Karlo (MCMC) metodas naudojamas sudaryti atsitiktinio dydžio imtį, kai dydis pasiskirstęs sudėtingu ar aukštos dimensijos skirstiniu. Taikant metodą sudaroma Markovo grandinė, kurios stacionarusis skirstinys $\pi(x)$ lygus tikslo skirstiniui. Tuomet po pakankamai didelio skaičiaus iteracijų gaunami grandinės elementai sudaro pagal tikslo skirstinį pasiskirsčiusio atsitiktinio dydžio imtį.

Markovo grandinė tenkina Markovo savybę: kiekvienas grandinės $\{X_t\}$ ateities elementas X_{t+n} yra priklausomas tik nuo dabartinio elemento X_t . Šia priklausomybę galima apibrėžti perėjimo skirstiniu $q(x_{t+n}|x_t)$. Generuojant grandinę MCMC metodu, $q(x_t|x_0) \rightarrow q(x_t)$ ir $q(x_t) \rightarrow \pi(x)$, kai $t \rightarrow \infty$. Tai yra, iteracijų skaičiui artėjant prie begalybės, elemento x_t sąlyginis nuo pradinio elemento skirstinys artėja prie besąlyginio x_t skirstinio, o x_t skirstinys tuo pačiu artėja prie grandinės stacionariojo skirstinio.

Markovo grandinės elementai nėra nepriklausomi, todėl imtis iš visų grandinės elementų nėra tinkama Monte Karlo simuliacijai. Koreliacija tarp gretimų iteracijų elementų dažnai aukšta, tačiau didinant iteracijų skirtumą autokoreliacija mažėja. Mažiausias reikalingas iteracijų skirtumas, kuriam esant grandinės elementai reikšmingai nekoreliuoja, vadinamas relaksacijos tarpu r . Į imtį parenkant grandinės elementus kas r , gaunama reikšmingai nepriklausomų dydžių imtis. Jei sugeneruojama Markovo grandinė iš N elementų, tai efektyvios imties dydis (ESS, angl. *Effective Sample Size*) gaunamas

$$N_{ef} = \frac{N}{r}. \quad (9)$$

Be to, grandinės elementų skirstiniai priartėja prie tikslinio stacionaraus skirstinio tik praėjus pakankamai dideliui iteracijų skaičiui, todėl reikalinga atmeti dalį pirmųjų grandinės elementų. Inicijavus grandinę tokiu pradiniu elementu X_0 , kuris pasiskirstęs tiksliniu stacionariuoju skirstiniu, būtų galima išvengti pradinių grandinės elementų atmetimo.

Taikant MCMC svarbu užtikrinti, jog grandinė konverguos į tikslinį skirstinį ir bus sudaryta pakankamai didelė imtis. Tam gali prireikti atlikti daug algoritmo iteracijų. Taip pat svarbu pasirinkti tinkamą grandinės elementų generavimo būdą.

Metropolis-Hastings algoritmas

Metropolis-Hastings (MH) algoritmas yra vienas populiariausių algoritmų Markovo grandinės, skirtos Monte Karlo simuliacijoms, generavimui. Lyginant su kitais algoritmais, MH taikymas paprastesnis, kadangi pakanka žinoti tikslinio aposteriorinio skirstinio tankiui proporcingą funkciją. Kitų algoritmų, kaip Gibbs ar Hamiltono Monte Karlo, taikymui reikalinga papildoma informacija,

kaip sąlyginiai simuliuojamų atsitiktinių dydžių skirstiniai ar galimybė apskaičiuoti tikslinės tankio funkcijos gradientą. MH algoritmas universalus įvairaus sudėtingumo ir aukštų dimensijų skirstinių aproksimavimui ir tinkamas būsenų erdvės modelio parametrų skirstinių įvertinimui ir atnaujinimui Bajeso metodu.

Kiekvienos MH algoritmo iteracijos metu sugeneruojama naujo Markovo grandinės elemento kandidatė ir pagal priėmimo tikimybę α yra priimama arba atmetama. Priėmimo tikimybė apskaičiuojama pagal tikimybę, jog kandidatė atitinka tikslo skirstinį. Jei tikslo skirstinys $\pi(x)$, Markovo grandinės perėjimo skirstinys $q(x_t|x_{t-1})$, tada kandidatės x_t priėmimo tikimybė

$$\alpha_t = \min\left(\frac{\pi(x_t)}{\pi(x_{t-1})} \frac{q(x_{t-1}|x_t)}{q(x_t|x_{t-1})}, 1\right). \quad (10)$$

Sugeneravus atsitiktinį dydį u_t , tolygiai pasiskirsčiusį intervale tarp 0 ir 1, kandidatė x_t priimama, jei $u_t \leq \alpha_t$. Kitu atveju, grandinės elementas $x_t = x_{t-1}$.

Naujo grandinės elemento kandidatė generuojama pagal praėjusios iteracijos elementą. Paprasčiausia naują elementą generuoti pagal atsitiktinį dydį, pasiskirsčiusį apie praėjusį grandinės elementą:

$$x_t \sim N(x_{t-1}, \tau \cdot \Sigma), \quad (11)$$

čia τ – šulį reguliuojantis koeficientas, Σ – kovariacijos matrica. Tokiu būdu nesunku apskaičiuoti perėjimo tikimybes $q(x_t|x_{t-1})$ bei $q(x_{t-1}|x_t)$. Kai Markovo grandinės elementas x_t yra labiau tikėtinoje erdveje pagal tikslo skirstinį $\pi(x)$, šuliai į taip pat tikėtinas erdves dažni, o mažai tikėtinas – reti.

Norint gauti reprezentatyvią imtį, reikalinga derinti šulio koeficientą τ . Esant per mažam šulio koeficientui τ , algoritmas gali užstrigti vienoje tikslinio skirstinio modoje ir tinkamai neatkartoti skirstinio uodegų. Esant per dideliui šuliui kandidatės dažnai patenka į mažos tikimybės erdves ir yra atmetamos. Tokiu atveju vienas Markovo grandinės elementas gali pasikartoti per daug kartų.

Kovariacijos matrica Σ nusako sąryšius tarp atsitiktinio vektoriaus X_t koordinačių ir apibrėžia atskirų komponentų dispersijas. Neturint pakankamai žinių apie tikslo skirstinį, kovariacijos matricą galima nusistatyti lygią vienetinei: $\Sigma = I$. Tuomet atlikus pradinį Markovo grandinės generavimą ir tyrimą, kovariacijos matrica atnaujinama pagal įgautas žinias. Adaptivusis MH algoritmas geba naujinti kovariacijos matricą Σ po kiekvienos iteracijos pagal anksčiau sugeneruotus grandinės elementus.

2.2.3. Bajeso metodais grįstas dalelių filtro algoritmas

Dalelių filtras yra Bajeso metodais grįstas algoritmas, skirtas įvertinti būsenų erdvės modelio būsenas ir aproksimuoti jų aposteriorinius skirstinius. Modelio būsenos vertinamos rekursiniu būdu atliekant spėjimus ir jų pataisymus pagal stebinius.

Būsenų erdvės modelio būsena x_t laiko momentu t įvertinama aposterioriniu skirstiniu, sąlyginiu nuo praėjusių būsenos reikšmių $x_{0:t-1}$ ir stebinių $y_{0:t}$ nuo stebėjimų pradžios iki laiko momento t . Kadangi būsenų erdvės modelyje atsitiktinis procesas X_t yra Markovo procesas, teorinis x_t skirstinys priklauso tik nuo praėjusios būsenos x_{t-1} :

$$p(x_t|x_{0:t-1}, y_{0:t-1}) = p(x_t|x_{t-1}). \quad (12)$$

Šis skirstinys parenkamas pagal turimas žinias apie sistemos dinamiką ir nusako numatomą sistemos būsenos kitimą. Panaudojus stebinius $y_{0:t-1}$ ankstesnėje algoritmo iteracijoje gautas aposteriorinis būsenos x_{t-1} skirstinio įvertis $p^*(x_{t-1}|y_{0:t-1})$ apjungiamas su teoriniu x_t skirstiniu:

$$p(x_t|y_{0:t-1}) = \int p(x_t|x_{t-1})p^*(x_{t-1}|y_{0:t-1}) dx_{t-1}. \quad (13)$$

Tai apriorinis skirstinys, sąlyginis nuo visų stebinių iki momento t , kuriuo atliekamas spėjimas apie būseną x_t laiko momentu t .

Atlikus tam tikrus matavimus ir gavus stebinį y_t , būsenos x_t skirstinys naujinamas – gaunamas aposteriorinis skirstinys pagal Bajeso teorema:

$$p^*(x_t|y_{0:t}) = \frac{p(y_t|x_t)p(x_t|y_{0:t-1})}{p(y_t|y_{0:t-1})}, \quad (14)$$

čia $p(y_t|x_t)$ – tikėtinumo funkcija, $p(x_t|y_{0:t-1})$ – apriorinis x_t skirstinys, $p(y_t|y_{0:t-1})$ – stebinio y_t priklausomybė, kuri šiuo atveju atitinka normalizavimo konstantą.

Analitiškai išspręsti (13) integralą sudėtinga arba neįmanoma, jei skirstiniai nėra Gauso tipo, būsenų erdvė nėra diskreti, modelis ne tiesinis ir dėl kitų sąlygų. Tokiu atveju taikomas dalelių filtras – aposteriorinis būsenos skirstinys aproksimuojamas diskrečiu skirstiniu, sudarytu iš N dalelių x_t^i ir atitinkamų svorių w_t^i , $i = 0, 1, \dots, N$.

Diskreti skirstinio aproksimacija leidžia neišsprendžiamą integralą keisti į dalelių svorinę sumą. Kadangi aproksimuojamas skirstinys nėra tiksliai apibrėžiamas, tiesioginiu būdu sudaryti dalelių imtį negalima. Tam pasirenkamas kitas siūlomasis skirstinys f pagal kurį sudaroma dalelių imtis. Siūlomasis skirstinys f pasirenkamas taip, kad būtų nesunku sudaryti atsitiktinę imtį. Turint imtį, kiekviena dalelė pasverama pagal tikslo skirstinio aproksimaciją:

$$w_t^i = \frac{p(x_{0:t}^i|y_{0:t})}{f(x_{0:t}^i|y_{0:t})}. \quad (15)$$

Nauja skirstinio aproksimacija apskaičiuojama:

$$p(x_{0:t}|y_{0:t}) \approx \sum_{i=1}^N w_t^{*i} \delta(x_{0:t} - x_{0:t}^i), \quad (16)$$

čia δ – Dirac delta funkcija: $\delta(x) = \begin{cases} 0, & x \neq 0 \\ \infty, & x = 0 \end{cases}$, $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1$, w_t^{*i} – normalizuoti svoriai:

$$w_t^{*i} = \frac{w_t^i}{\sum_{i=1}^N w_t^i}.$$

Skirstinio aproksimacija apibūdina visą modelio būsenos trajektoriją per laiką, tačiau dažnai aktualu įvertinti būsenos x_t skirstinį tik momentu t . Pavyzdžiui, turint skirstinio $p(x_{t-1}|y_{0:t-1})$ aproksimaciją norima sudaryti skirstinio $p(x_t|y_{0:t})$ aproksimaciją. Atlikus naujų dalelių generavimą pagal teorinį skirstinį $p(x_t|x_{t-1})$, dalelių w_t^i svoriai perskaičiuojami:

$$w_t^i = w_{t-1}^{*i} \frac{p(y_t|x_t^i)p(x_t^i|x_{t-1}^i)}{f(x_t^i|x_{t-1}^i, y_t)}. \quad (17)$$

Tada aposteriorinis būsenos x_t skirstinys $p^*(x_t|y_{0:t})$ aproksimuojamas:

$$p^*(x_t|y_{0:t}) \approx \sum_{i=1}^N w_t^{*i} \delta(x_t - x_t^i), \quad (18)$$

čia w_t^{*i} – normalizuoti svoriai.

Dalelių imties perrinkimas

Rekursyviai taikant dalelių filtrą susiduriama su degeneravimo problema. Po tam tikro skaičiaus iteracijų mažas skaičius dalelių turi didelį svorį, o likusios – artimą nuliui. Tokiu atveju būsenos skirstinys yra aproksimuojamas prastai.

Dalelių imties degeneravimą galima įvertinti pagal efektyvios imties dydį:

$$N_{ef}^* = \frac{N}{1 + \text{Var}(w_t^i)}. \quad (19)$$

Mažas efektyvios imties dydis, kaip ir MCMC atveju, lemia prastą skirstinio aproksimaciją. Didinant dalelių skaičių didėja ir ESS, tačiau toks sprendimas neefektyvus dėl reikalingų papildomų skaičiavimų, ypač esant aukštos dimensijos būsenoms ar sudėtingiems modeliams. Vienas sprendimų yra derinti siūlomąjį skirstinį f taip, kad būtų minimizuojama svorių dispersija. Optimalus skirstinys f leistų sudaryti dalelių x_t^i imtis, kurios nekeistų svorių per iteracijas. Tačiau tam reikalinga, kad būsenų erdvė būtų diskreti, arba modelis – Gauso tipo [47].

Kitas efektyvus ir lengvai pritaikomas sprendimas yra perrinkti dalelių imtį. Turint dalelių imtį x_t^i ir svorius w_t^i , sugeneruojama nauja dalelių imtis $x_t'^i$ pagal aproksimuojamą skirstinį $p^*(x_t|y_{0:t})$ taip, kad nauji svoriai $w_t'^i = \frac{1}{N}$. Tai galima atlikti sudarius atvirkštinę kumuliatyvinę pasiskirstymo funkciją pagal daleles x_t^i ir svorius w_t^i , ir generuojant N tolygiai pasiskirsčiusių atsitiktinių dydžių intervale nuo 0 iki 1.

Siekiant padengti intervalą nuo 0 iki 1 atsitiktiniais dydžiais tolygiai, naudojami keli skirtingi imties perrinkimo algoritmai, pavyzdžiui, liekanų ar sisteminis perrinkimas. Vienas paprasčiausių algoritmų – stratifikuotas perrinkimas, kai intervalas $[0, 1]$ padalijamas į N mažesnių intervalų. Imant po vieną atsitiktinį dydį iš kiekvieno intervalo užtikrinamas tikimybių intervalo $[0, 1]$ tolygus padengimas.

2.2.4. Dalelių Markovo grandinės Monte Karlo metodas

Dalelių MCMC (PMCMC) metodas sujungia dalelių filtro ir MCMC metodus į vieną bendrą algoritmą, tinkamą būsenų erdvės modelio parametrus įvertinti, nustatyti jų neapibrėžtumą ir atnaujinti skirstinius. PMCMC padengia abiejų metodų trūkumus ir sujungia privalumus.

Kiekvienoje MCMC algoritmo iteracijoje sugeneruojamas naujas parametrų rinkinys θ' , kuris yra priimamas arba atmetamas pagal priėmimo tikimybę α . Priėmimo tikimybei apskaičiuoti reikalinga

tikėtinumo funkcija. Kadangi šią funkciją apskaičiuoti sudėtinga, ją galima aproksimuoti dalelių filtru.

PMCMC metodo algoritmas aprašomas šiais žingsniais:

1. pasirenkama pradinė parametų reikšmė θ_0 ;
2. sugeneruojamas naujas parametų rinkinys θ' pagal pasirinktą perėjimo skirstinį $q(\theta_n|\theta_{n-1})$;
3. užfiksavus parametų rinkinį vykdomas dalelių filtras tikėtinumo funkcijai $p(y_{0:T}|\theta')$ aproksimuoti;
4. apskaičiuojama priėmimo tikimybė $\alpha = \min\left(\frac{p(y_{0:T}|\theta')}{p(y_{0:T}|\theta_{n-1})} \frac{p(\theta')}{p(\theta_{n-1})} \frac{q(\theta'|\theta_{n-1})}{q(\theta_{n-1}|\theta')}, 1\right)$;
5. sugeneruojamas atsitiktinis dydis $u \sim U([0, 1])$;
6. jei $u \leq \alpha$, priskiriama $\theta_n = \theta'$, priešingu atveju $\theta_n = \theta_{n-1}$;
7. žingsniai 2-6 kartojami pasirinktą skaičių iteracijų.

2-ame žingsnyje tikėtinumo funkcija $p(y_{0:T}|\theta')$ aproksimuojama taikant dalelių filtrą. Tikėtinumo funkcija išskleidžiama:

$$p(y_{0:T}|\theta') = p(y_0|\theta') \prod_{t=1}^T p(y_t|y_{t-1}, \theta'), \quad (20)$$

kur

$$p(y_t|y_{t-1}, \theta') = \int f_t^{\theta'}(y_t|x_t) p_t^{\theta'}(x_t|x_{t-1}) p(x_{t-1}|y_{0:t-1}) dx_t dx_{t-1}, \quad (21)$$

čia $f_t^{\theta'}(y_t|x_t)$ – stebinio y_t skirstinys, priklausomas nuo sistemos būsenos x_t laiko momentu t , $p_t^{\theta'}(x_t|x_{t-1})$ – būsenos perėjimo iš reikšmės x_{t-1} į x_t skirstinys laiko momentu t , $p(x_{t-1}|y_{0:t-1})$ – sistemos būsenos aposteriorinis skirstinys laiko momentu $t - 1$.

Pagal 2.2.3 skyrelyje apibrėžtą dalelių filtro algoritmą aproksimuojamas aposteriorinis būsenos skirstinys $p(x_{t-1}|y_{0:t-1})$ dalelėmis x_{t-1}^i ir svoriais w_{t-1}^i . Tuomet (21) integralą galima pakeisti svorių w_t^i suma, o tikėtinumo funkcijos aproksimacija:

$$p(y_{0:T}|\theta') \approx \prod_{t=0}^T \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_t^i \right]. \quad (22)$$

3-ame žingsnyje pagal 2.2.2 skyrelyje apibrėžtą MH algoritmą apskaičiuojama parametų kandidatės θ' priėmimo tikimybė α . Tikslas skirstinys yra parametų rinkinio θ aposteriorinis skirstinys:

$$p^*(\theta) = p(y_{0:T}|\theta)p(\theta), \quad (23)$$

čia $p(\theta)$ - parametų rinkinio θ apriorinis skirstinys. Todėl kandidatės θ' priėmimo tikimybė

$$\alpha = \min\left(\frac{p^*(\theta')}{p^*(\theta_{n-1})} \frac{q(\theta'|\theta_{n-1})}{q(\theta_{n-1}|\theta')}, 1\right) = \min\left(\frac{p(y_{0:T}|\theta')}{p(y_{0:T}|\theta_{n-1})} \frac{p(\theta')}{p(\theta_{n-1})} \frac{q(\theta'|\theta_{n-1})}{q(\theta_{n-1}|\theta')}, 1\right). \quad (24)$$

Dalelių filtras taikomas būsenų erdvės modelio sistemos būsenai įvertinti, tačiau nėra tinkamas modelio parametrų nustatymui. MCMC metodas taikomas sudaryti imčiai iš sudėtingo skirstinio ir yra tinkamas modelio parametrų įvertinimui, tačiau reikalauja dažnai neapskaičiuojamos tikėtinumo funkcijos. Kartu taikomi metodai vienas kitą papildo – dalelių filtru aproksimuojama tikėtinumo funkcija leidžia taikyti MCMC parametrų reprezentatyviai imčiai sudaryti.

PMCMC hiperparametrai ir diagnostiniai rodikliai atitinka metodo atskirų komponentų, dalelių filtro ir MCMC, parametrus ir rodiklius. Šuolio koeficientas τ ir kovariacijos matrica Σ nusako parametrų rinkinių kandidačių θ' skirstinį $N(\theta_{n-1}, \tau \cdot \Sigma)$. Šių hiperparametrų atranka reikalinga užtikrinti parametrų erdvės padengimą. Būsenų erdvės padengimas užtikrinamas perrenkant dalelių imtį, kai efektyvios imties dydis N_{ef} krenta žemiau nusistatytos ribos.

Ličio jonų baterijų įkrovos būsenos modeliavimo atveju, 2.2.1 skyrelyje apibrėžti (5) ir (7) skirstiniai naudojami dalelių filtro skaičiavimuose. Vertinami parametrai θ yra funkcijos $f_{OCV}(x)$ parametrai. Turint žinių apie tiriamą ličio jonų bateriją, dydžius R ir C – vidinę varžą ir baterijos talpą galima nustatyti iš anksto. Tačiau siekiant sudaryti universalų modelį, kuriam nereikalingi jokie papildomi duomenys be įkrovimo ar iškrovimo metu išmatuotų srovės stiprio ir įtampos, R ir C galima įtraukti į modelio parametrus ar net kaip būsenos komponentes.

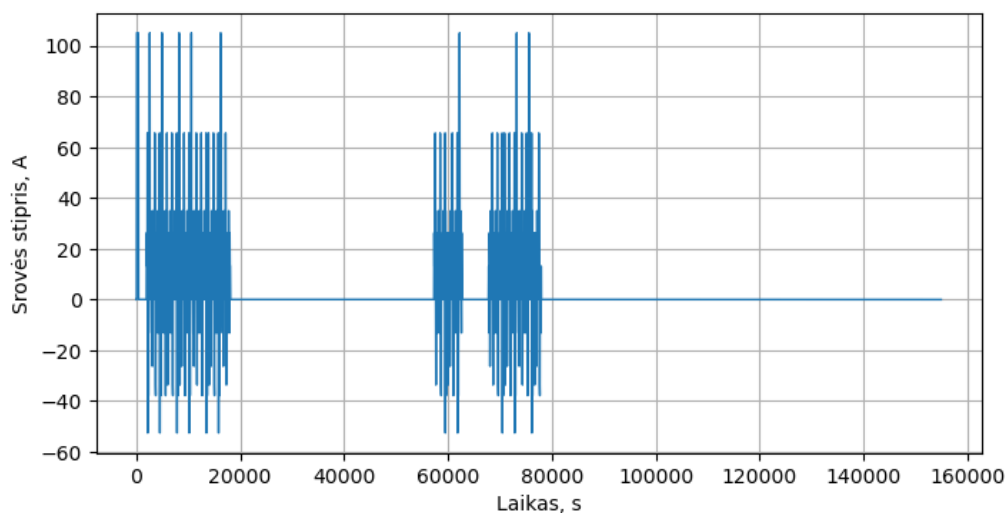
2.3. Baterijų testų duomenys ir modeliavimo programinė įranga

Tyrimui naudojami statinių ir dinaminių testų, atliktų 2 baterijoms, duomenys: srovės stiprio I ir išėjimo įtampos V matavimai laike. Statiniai testai atliekami su pastovia srove, iškraunant arba įkraunant bateriją. Dinaminių testų metu stebimas srovės svyravimas ar šokinėjimas, nepilnas baterijos įkrovimas ar iškrovimas. Dinaminių testų duomenys artimesni realiai vartojamos baterijos duomenims, todėl labiau aktualu sudaryti ir testuoti baterijų modelius tinkamus dinaminiais duomenims.

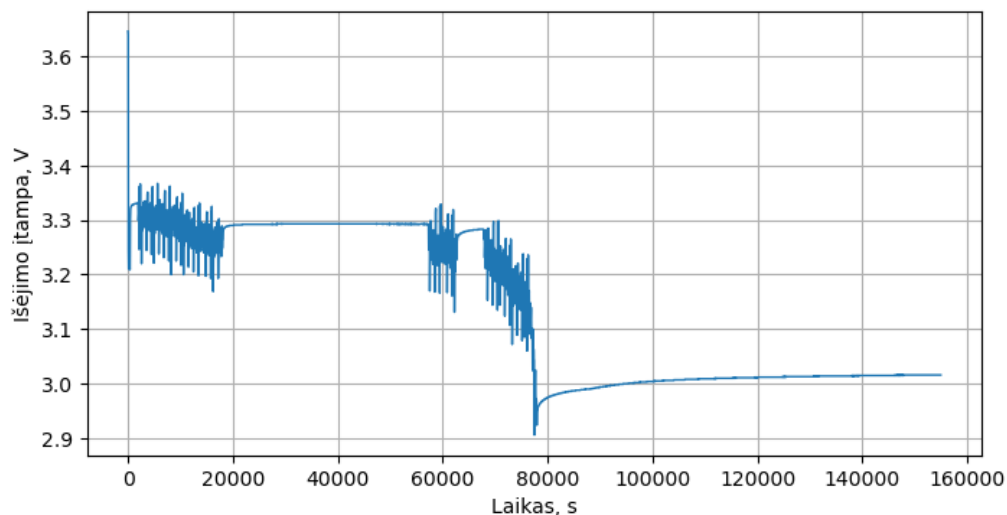
Baterijų duomenis suteikia UAB EMUS, kuri kuria baterijų valdymo sistemas. Baterijų valdymo sistema yra svarbi priemonė baterijos būklės ir veiksmingumo stebėjimui. Sistema yra naudojama rinkti duomenis apie baterijos veikimą: srovės stiprio, įtampos, temperatūros ir kitus matavimus. Baterijos įkrovos bei kokybiško veikimo būsenų modeliavimas pagal BMS surinktus duomenis leidžia įvertinti baterijos būklę ir likusį kokybiško veikimo laiką, todėl tinkamo modelio ir programinės įrangos paieška yra aktuali tema ir gali būti plačiai nagrinėjama literatūroje.

2.3.1. Baterija EVE LF173

Pirmoji tiriamą bateriją yra EVE LF173 – LiFePO₄ cheminės sandaros baterija. Pirminiam modelio apmokymui ir hiperparametrų nustatymui naudojami šios baterijos dinaminio testo duomenys. Matavimai atliekami kas 0,5 sekundės. Srovės stiprio ir išėjimo įtampos duomenys grafiškai pateikti 4 ir 5 pav.



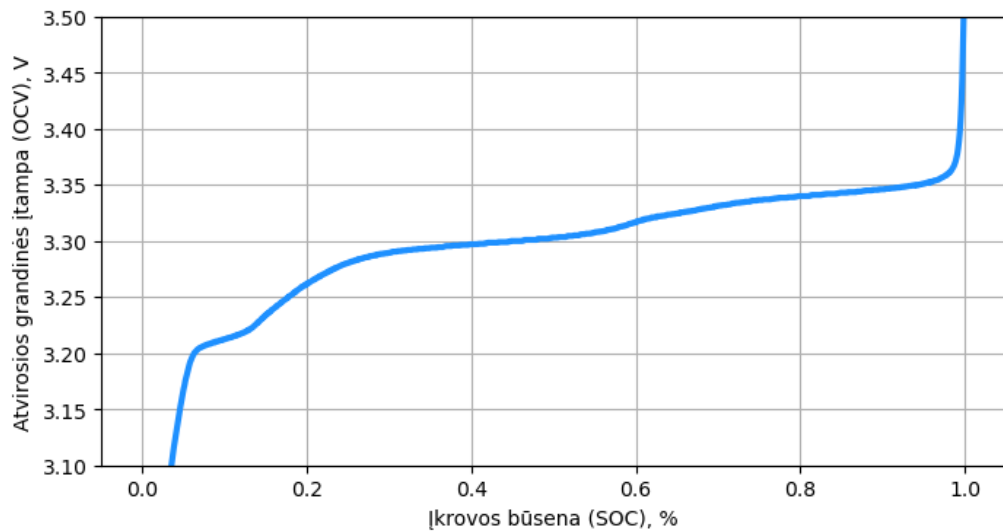
4 pav. Baterijos EVE LF173 dinaminio testo srovės stiprio matavimai laike



5 pav. Baterijos EVE LF173 dinaminio testo išėjimo įtampos matavimai laike

Šio dinaminio testo metu matomas dalinis baterijos iškrovimas laiko intervale nuo 0 iki 20000 sekundžių, ir iškrovimas pratęsiamas intervale nuo 57000 iki 78000 sekundžių. Srovės stiprio reikšmės iškrovimo metu nėra pastovios ir smarkiai svyruoja nurodytuose intervaluose.

Be dinaminio testo duomenų turimas ir priklausomybės tarp įkrovos būsenos bei atvirosios grandinės įtampos įvertis, gautas eksperimentiniu būdu. Baterijos EVE LF173 eksperimentiškai gauta kreivė pateikta 6 pav.

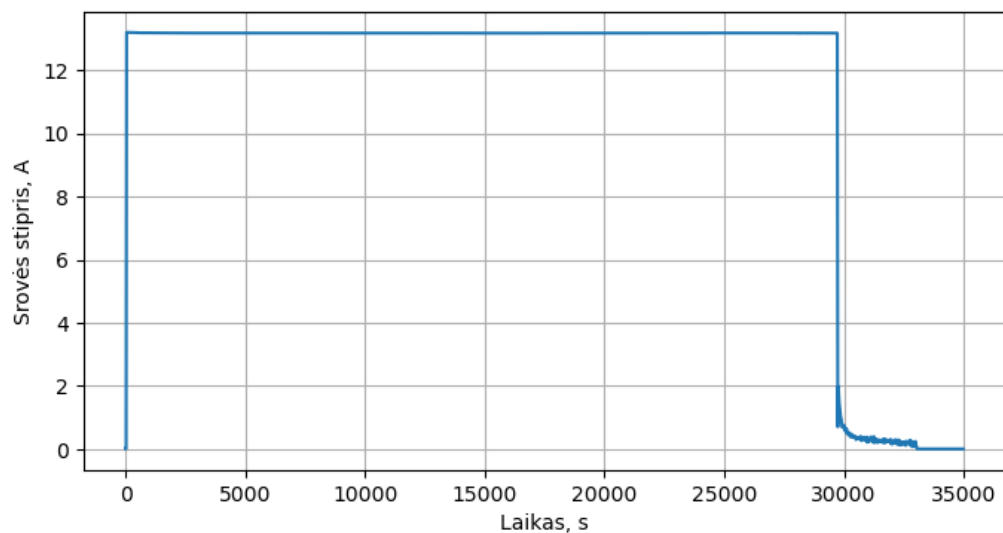


6 pav. Baterijos EVE LF173 eksperimentiškai gauta OCV priklausomybės nuo SOC kreivė

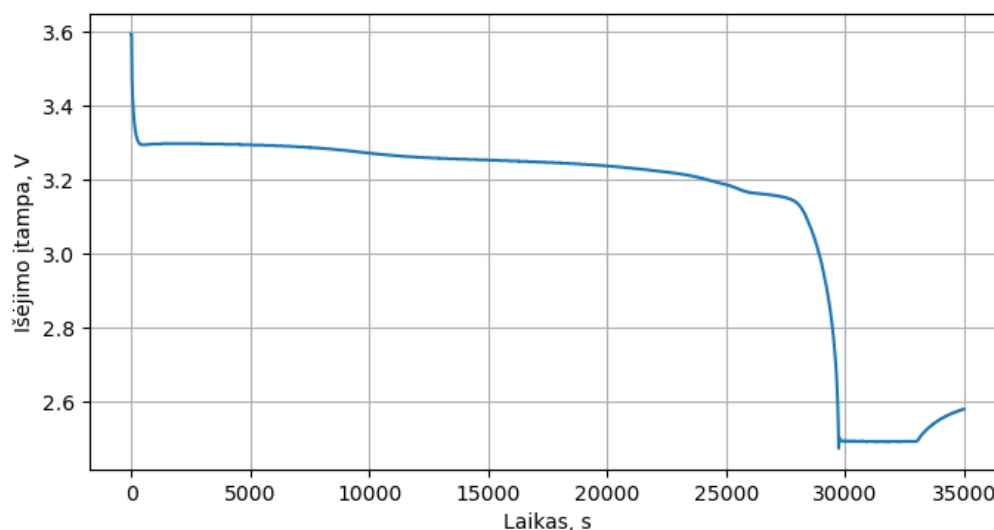
Šis kreivės įvertis gaunamas išardžius bateriją ir atlikus tam tikrus testus. Todėl kitokiomis nei įprasto veikimo sąlygomis gauta OCV priklausomybės nuo SOC kreivė gali skirtis nuo modelių gautos kreivės. Visgi, eksperimentinė kreivė yra pavyzdinė, pagal kurią galima nuspręsti apie sumodeliuotos funkcijos $f_{OCV}(x)$ artumą realybei.

2.3.2. Baterija EVE LF105

Antroji tiriama baterija yra EVE LF105. Šios baterijos cheminė sandara taip pat LiFePO_4 . Šiai baterijai atliktas statinis testas ir surinkti išėjimo įtamos (7 pav.) ir srovės stiprio matavimai (8 pav.) kas 1 sekundę.



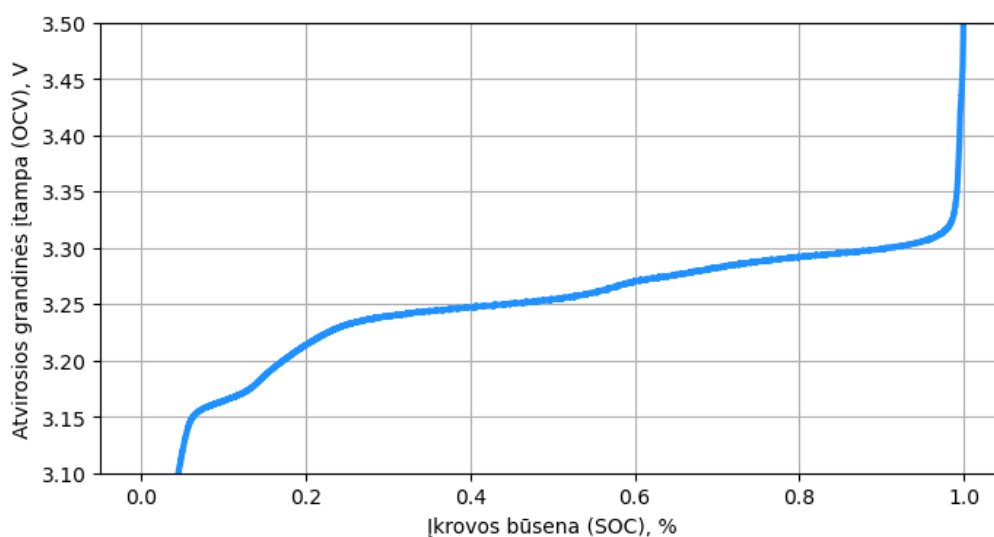
7 pav. Baterijos EVE LF105 statinio testo srovės stiprio matavimai laike



8 pav. Baterijos EVE LF105 statinio testo išėjimo įtampos matavimai laike

Statinio testo metu stebimas vienas baterijos iškrovimas pastovia elektros srove. Pilnas iškrovimas matomas intervale nuo 0 iki 30000 sekundžių.

Kaip ir baterijos EVE LF173 atveju, atvirosios grandinės įtampos priklausomybės nuo įkrovos būsenos funkcijos kreivė įvertinta eksperimentiniu būdu. Kreivė pateikta 9 pav.



9 pav. Baterijos EVE LF105 eksperimentiškai gauta OCV priklausomybės nuo SOC kreivė

Kreivė savo forma panaši į EVE LF173 baterijos kreivę, tačiau stebimos žemesnės OCV reikšmės SOC intervale nuo 0 iki 1. Kreivių panašumą galima paaiškinti tiriamųjų baterijų cheminės ir fizinės sandaros panašumu. Pagrindinis skirtumas tarp tiriamųjų baterijų yra jų talpa: EVE LF173 talpa – 173 Ah, EVE LF105 – 105 Ah.

2.3.3. Programinė įranga

Dalelių MCMC algoritmui realizuoti taikomas *particles* paketas Python aplinkoje. Paketas suteikia galimybę taikyti įvairius Bajeso metodus sudėtingų skirstinių imčių sudarymui, modelio parametrų įvertinimui. Į paketo kodą įtrauktos funkcijos, realizuojančios Kalmano bei dalelių filtrą, MCMC

metodą pagal Metropolis-Hastings bei Gibbs algoritmus ir kt. Grafikų braižymas Python aplinkoje atliekamas pasitelkiant paketų *matplotlib* ir *seaborn* funkcijas.

Paketas *particles* patogus būsenų erdvės modelio parametrų įvertinimui atlikti. Būsenų erdvės modelis apsirąšomas klase, kurią galima modifikuoti ir papildyti, pridėti didelių dimensijų būsenas ir stebinius. Dalelių MCMC algoritmo realizacija suteikia galimybę tinkinti hiperparametrus bei juos adaptyviai naujinti kiekvienos iteracijos metu. Fiksuojami tokie rodikliai, kaip parametrų reikšmių vidutinis kandidatės θ' šolio atstumas, priėmimo dažnis, efektyvios imties dydis N_{ef}^* , leidžia atlikti modeliavimo diagnostiką ir įvertinti MCMC grandinės konvergavimą į tikslinį stacionarųjį skirstinį. Algoritmo realizacijos Python aplinkoje fragmentas pateiktas 2 priede.

Verta paminėti, jog PMCMC skaičiavimų trukmė priklauso nuo MCMC iteracijų skaičiaus, dalelių skaičiaus N , duomenų kiekio T , modelio parametrų skaičiaus. Dėl to, apibrėžus pakankamai sudėtingą modelį ir naudojant daug duomenų skaičiavimai gali trukti ne vieną valandą.

Kitos bibliotekos ar paketai, skirti Bajeso metodų realizacijos būsenų erdvės modelių parametrų įvertinti, kaip LibBi ar Birch, taiko lygiagretųjį programavimą skaičiavimams spartinti. Šiame projekte apsiribojama Python realizacija, kadangi siekiama atlikti platesnį Dalelių MCMC taikymo tyrimą pasitelkiant *particles* paketo diagnostinius rodiklius ir įvairias būsenų erdvės modelio modifikacijas. Tačiau, lygiagrečiuoju programavimu paremtos realizacijos yra perspektyvios, norint taikyti PMCMC baterijų valdymo sistemose.

3. Tyrimo rezultatai

3.1. Modelių apmokymo schema

Pirminis modelio apmokymas atliekamas su EVE LF173 baterijos dinaminio testo duomenimis. Kadangi skaičiavimų trukmė priklauso nuo naudojamų stebinių kiekio, svarbu pasirinkti mažiausią reikalingą duomenų rinkinį. Modeliavimo tikslas yra parametrinės $f_{OCV}(SOC)$ išraiškos parametru įvertinimas, todėl svarbu, kad duomenyse atsispindėtų visas įkrovos būsenos intervalas nuo 0% iki 100%. Vadinasi, iš turimų stebinių pakanka išskirti vieno pilno baterijos iškrovimo ar įkrovimo duomenis.

Pagal 4 ir 5 pav. galima spręsti, jog pilnas baterijos iškrovimas stebimas pirmoje duomenų rinkinio pusėje laiko atžvilgiu. Todėl modelio apmokymui pakanka panaudoti srovės stiprio ir išėjimo įtampas matavimus iki 80000 sekundžių.

Toks sumažintas duomenų kiekis vis tiek per didelis testavimams atlikti – priklausomai nuo MCMC iteracijų skaičiaus N skaičiavimai gali trukti dešimtis valandų. Dėl to modelių apmokymui naudojama sumažinta duomenų imtis – panaudojamas kas n -tasis įrašas duomenų rinkinyje. Pagal pasirinktą imties mažinimo žingsnį atitinkamai perskaičiuojamas laiko skirtumas Δt tarp gretimų įtrauktų įrašų.

PMCMC algoritmas taikomas adaptyviu būdu. MCMC žingsnio kovariacijos matrica Σ , reguliuojanti naujos kandidatės θ' skirstinį $N(\theta_{n-1}, \tau \cdot \Sigma)$, kiekvienos iteracijos metu yra naujinama pagal anksčiau generuotus ir priimtus Markovo grandinės narius. Be to, adaptyvaus PMCMC metodo pradžioje stebinių y_t skirstinio $N(f_{OCV}(x_t) - I \cdot R, \sigma_y^2)$ parametru σ_y^2 priskiriama didelė reikšmė, o, atlikus tam tikrą skaičių algoritmo iteracijų, ši reikšmė mažinama. Tokiu būdu užtikrinama, jog modelio apmokymo pradžioje yra padengiama visa parametru θ tikimybinė erdvė. Tuomet, mažinant σ_y^2 , adaptyviai naujinama matrica Σ ir parametru θ grandinės skirstinys artėja prie tikslinio stacionariojo skirstinio. Galiausiai, atliekamas duomenų rinkinio didinimas: duomenų imtis yra papildoma daugiau įrašų ir modelis yra mokomas toliau. Tokiu būdu imituojamas realus PMCMC taikymas baterijos būsenų erdvės modeliui, kai, surinkus naujų duomenų baterijos valdymo sistemos dėka, modelio parametrai yra atnaujinami Bajeso metodu.

Adaptyvaus PMCMC algoritmo, taikomo tyrimo metu, schema apibūdinama tokiais etapais:

1. PMCMC algoritmas įvykdomas pirmąjį kartą.

Šiame žingsnyje apsibrėžiami parametru θ aprioriniai skirstiniai, nustatomos pradinės hiperparametru τ ir Σ reikšmės. Pradedama su $\sigma_y^2 = 40$. Modelio apmokymui panaudojama duomenų imtis, gauta imant kas 1000-ąjį įrašą iš viso duomenų rinkinio. PMCMC vykdomas 100000 iteracijų, kad būtų padengta kuo didesnė dalis parametru tikimybinės erdvės.

2. Stebinių y_t skirstinio $N(f_{OCV}(x_t) - I \cdot R, \sigma_y^2)$ parametro σ_y^2 reikšmės mažinamos.

Pirmojo PMCMC įvykdymo metu adaptyviai atnaujinta matrica Σ yra naudojama generuoti naujoms parametru kandidatėms θ' , todėl σ_y^2 reikšmę galima mažinti. Padengus didžiąją dalį parametru θ erdvės reikalinga griežtinti kandidačių θ' priėmimo sąlygas, kad Markovo grandinė

artėtų prie stacionariojo skirstinio. Dėl to kas 20000 PMCMC iteracijų σ_y^2 reikšmė mažinama ir įgauna reikšmes: 20, 10, 5, 2, 1, 0,5, 0,25, 0,2.

3. Duomenų imties pildymas.

2-ojo etapo metu parametų θ grandinės skirstinys priartėja tikslinio stacionariojo skirstinio, tačiau dėl mažos duomenų imties skirstinys nėra tikslus ir artimas realybei. Dėl to reikalinga įtraukti vis daugiau duomenų iš turimo rinkinio. 1 ir 2 etapų metu duomenų imtis sudaryta imant kas 1000-ąjį įrašą iš duomenų rinkinio. 3 etape žingsnis tarp įtraukiamų įrašų mažinamas: kas 20000 PMCMC iteracijų sudaroma nauja duomenų imtis, gauta imant kas 500, 200, 100, 50, 20 įrašų.

Pirmojo etapo metu dalelių filtro algoritmui efektyvios imties dydžio N_{ef}^* riba, kai atliekamas dalelių perrinkimas, nustatoma maža – 0,01. Tokiu atveju po nedidelio skaičiaus iteracijų sistemos būsenos x_t skirstinį, kurio tankis $p^*(x_t|y_{0:t})$, aproksimuoja mažas skaičius dalelių su dideliu svoriu. Tokiu atveju apskaičiuojama tikėtinumo funkcijos aproksimacija $p(y_{0:T}|\theta')$ įgyja didesnę reikšmę ir kandidatės θ' priėmimo tikimybė α yra aukšta. Taip pirmo etapo metu yra užtikrinama, kad didžioji dalis kandidačių θ' bus priimta ir parametų θ erdvė bus efektyviai padengta. 2 ir 3 etapo metu aktualu tikslinti parametų aposteriorinį skirstinį $p^*(\theta)$, todėl N_{ef} riba užkeliama iki 0,5.

PMCMC algoritmo iteracijų skaičius kiekviename etape, stebinių skirstinio $N(f_{OCV}(x_t) - I \cdot R, \sigma_y^2)$ parametro σ_y^2 reikšmės, duomenų imties sudarymo žingsnio vertės pasirinktos laisvai, tačiau pasirinkimas yra pagrįstas eksperimentų rezultatais. Adaptyvaus algoritmo schemoje apibrėžtų reikšmių pakanka atkartoti eksperimentams, tačiau galima pasirinkti didesnę iteracijų skaičių siekiant stabilesnių rezultatų ar mažesnę spartesniems skaičiavimams. Kitokios cheminės sandaros baterijoms gali prireikti staigesnio ar lėtesnio stebinių dispersijos mažinimo, o nuo turimų duomenų informacijos tankio – didesnio ar mažesnio duomenų imties sudarymo žingsnio.

Parametų θ aprioriniai skirstiniai $p(\theta)$ lemia parametų kandidačių θ' priėmimo tikimybę α , todėl šių skirstinių nusistatymas yra svarbus uždavinys. Atlikus pirminius eksperimentus susidaromas pradinis įspūdis apie parametų θ skirstinius, ir, pagal turimas žinias, sudaromi aprioriniai θ skirstiniai. Pasirinktų apriorinių skirstinių sąrašas pateiktas 5 lentelėje.

5 lentelė. Parametų θ aprioriniai skirstiniai

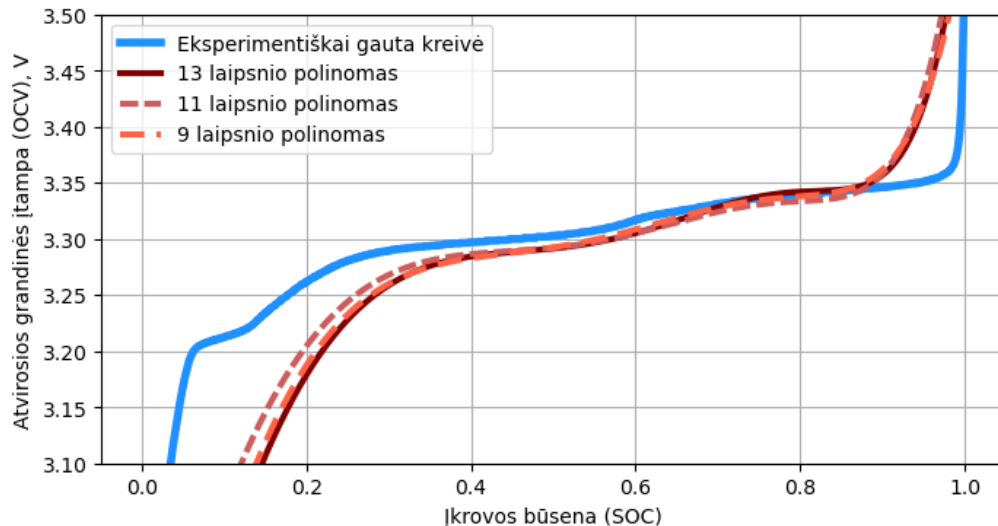
Parametų rinkinio θ komponentė	Apriorinis skirstinys
Funkcijos $f_{OCV}(x)$ parametras a_i	$N(0, 10)$
Būsenos x_t perėjimo skirstinio parametras σ_x^2	$N(0, 1), \quad \sigma_x^2 \in [0, 10]$
Baterijos vidinė varža R	$N(0, 1), \quad R \in [0, 10]$
Baterijos talpa C	$N(100, 50), \quad C \in [0, 1000]$

Visiems funkcijos $f_{OCV}(x)$ parametrinės išraiškos parametrus a_i priskiriami vienodi aprioriniai skirstiniai. Būsenos x_t perėjimo skirstinio $N\left(x_{t-1} - \frac{\Delta t \cdot I}{C}, \sigma_x^2\right)$ parametro σ_x^2 bei vidinės varžos R aprioriniai skirstiniai centruoti apie 0, tačiau galimos reikšmės ribojamos intervale nuo 0 iki 10, kadangi abu dydžiai negali būti neigiami. Baterijos EVE LF173 gamyklinė talpa yra žinoma – 173 Ah. Be to, žinoma, kad dinaminis testas atliktas su dalinai nusidėvėjusia baterija. Eksperimentinių

tyrimu metu nustatyta, jog baterijos talpa lygi 108,86 Ah. Todėl baterijos talpos C apriorinis skirstinys centruojamas apie 100, ir reikšmės ribojamos intervale nuo 0 iki 1000.

3.2. Parametrinės išraiškos atranka

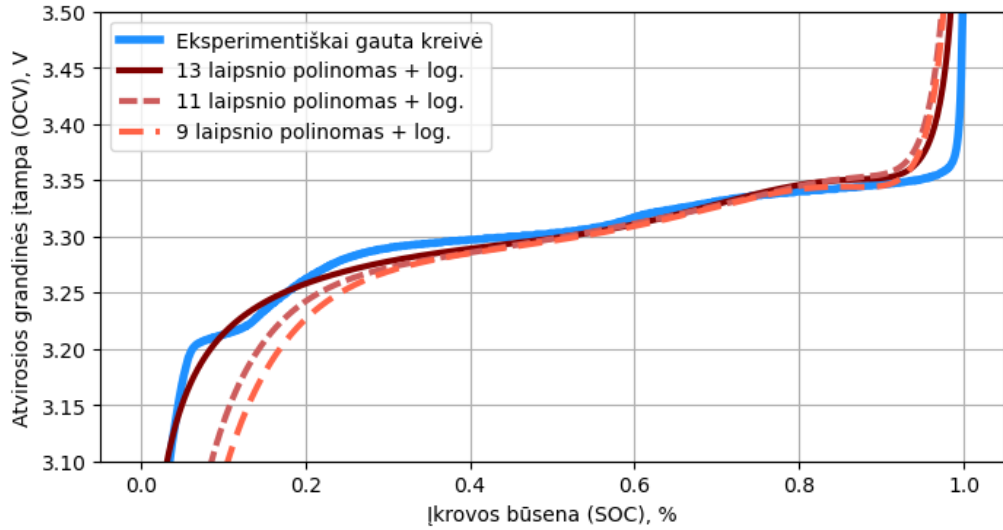
OCV priklausomybės nuo SOC funkcijos $f_{OCV}(SOC)$ įverčiui gauti reikalinga apsibrėžti šios funkcijos kreivę gebančią imituoti parametrinę išraišką. Pirmiausia tiriami aukšto laipsnio polinomial. Dėl eksperimentiškai gautos $f_{OCV}(SOC)$ kreivės formos renkamosi tirti nelyginio laipsnio polinomial: 9, 11 ir 13 laipsnio. Atlikus adaptyvaus PMCMC algoritmo skaičiavimus, gautos $f_{OCV}(SOC)$ kreivės lyginamos su eksperimentine kreive 10 pav.



10 pav. $f_{OCV}(SOC)$ išraiškų skirtingo laipsnio polinomial palyginimas su eksperimentine kreive

Visų trijų polinomial kreivės panašios, didžiausias skirtumas matomas esant žemam SOC lygiui. Polinomial kreivės atkartoja eksperimentinės kreivės vingiavimą SOC intervale nuo 40% iki 80%, tačiau nesutampa su eksperimentine kreive pilno SOC intervalo galuose. Polinomial kreivių kairysis išlenkimas susidaro apie 30% SOC, kai eksperimentinės – apie 20%. Dešinysis polinomial kreivių išlenkimas matomas apie 90% SOC, o eksperimentinės – arčiau 100%. Galima teigti, jog polinomial laipsnio didinimas ženkliai nepaslinktų išlenkimų.

Funkcijos $f_{OCV}(SOC)$ parametrinė išraiška modifikuojama – prie tiriamųjų polinomial pridamos dviejų logaritmų, $\ln(SOC)$ ir $\ln(1 - SOC)$, komponentės. Tokiu būdu siekiama taikliau atkartoti staigius eksperimentinės kreivės išlenkimus SOC intervalo galuose. Gautos kreivės palyginamos su eksperimentine kreive 11 pav.



11 pav. $f_{OCV}(SOC)$ išraiškų skirtingo laipsnio polinomais, papildytais logaritmais, palyginimas su eksperimentine kreive

Polinomų, papildytų logaritmų komponentėmis, kreivės arčiau prisiderina prie eksperimentinės kreivės. Didžiausias funkcijos $f_{OCV}(SOC)$ įvertio patobulėjamas matomas žemesnėje SOC intervalo pusėje. Didinant polinomo laipsnį stebimas vis ryškesnis kreivės priartėjimas prie eksperimentinės kreivės. Nors kreivių išlenkimas dešiniame SOC intervalo gale artimesnis eksperimentinei kreivei nei polinomų be logaritmų komponentių atveju, nei vienas funkcijos įvertis neprisiderina prie eksperimentinės kreivės. Tai galima paaiškinti duomenų, kai baterijos įkrova pilna, trūkumu. Tai yra, baterijos EVE LF173 dinaminis testas galėjo prasidėti ne nuo pilnai įkrautos baterijos. Jei duomenyse nėra stebimas pilnas baterijos įkrovimas ar iškrovimas, natūralu, kad modeliuoti pilną SOC intervalą sudėtinga. Dėl to tolimesniuose baterijos EVE LF173 modeliavimo tyrimuose nepaisomas rezultatų nukrypimas, kai SOC vertė artima 1.

Pagal funkcijos $f_{OCV}(SOC)$ parametrinės išraiškos atranką nustatyta, jog išraiška $f_{OCV}(x) = a_1 + a_2 \ln(x) + a_3 \ln(1-x) + a_4x + a_5x^2 + a_6x^3 + a_7x^4 + a_8x^5 + a_9x^6 + a_{10}x^7 + a_{11}x^8 + a_{12}x^9 + a_{13}x^{10} + a_{14}x^{11} + a_{15}x^{12} + a_{16}x^{13}$ yra adekvati OCV priklausomybės nuo SOC aproksimavimui.

3.3. Hiperparametrų derinimas

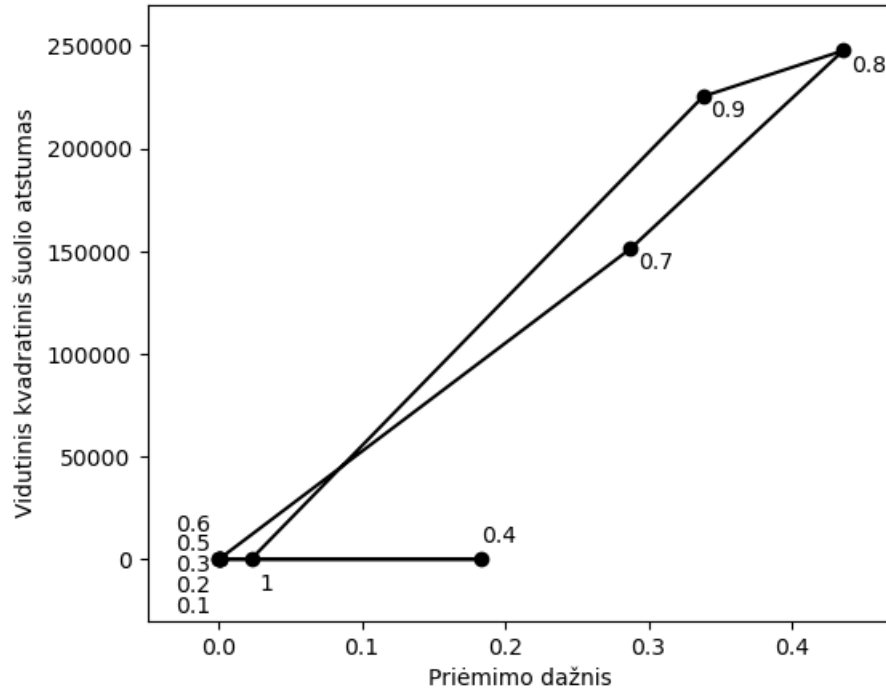
3.3.1. Reikšmių šuolį reguliuojantis koeficientas τ

PMCMC algoritmo kiekvienoje iteracijoje sugeneruojama nauja parametrų θ kandidatė θ' pagal skirstinį $N(\theta_{n-1}|\tau \cdot \Sigma)$. Pirmojo adaptyvaus PMCMC etapo metu svarbu padengti kuo didesnę dalį parametrų θ erdvės, todėl kandidatės šuolį nuo praėjusios reikšmės θ_{n-1} reguliuojantį koeficientą τ svarbu parinkti taip, kad būtų maksimizuojamas kandidačių priėmimo dažnis ir vidutinis kvadratinis šuolio euklidinis atstumas tarp gretimų sudarytos parametrų grandinės reikšmių.

Kadangi kovariacijos matrica Σ adaptyviai naujinama kiekvieną algoritmo iteraciją, pradinė reikšmė Σ_0 nėra ypatingai svarbi. Ją galima pagal turimas žinias apie modelio parametrus, o jei tokių nėra – pasirinkti laisvai, pavyzdžiui, $\Sigma_0 = I$ ar $\Sigma_0 = \tau \cdot I$. Tyrimo atveju pasirinkta $\Sigma_0 = \tau^2 \cdot I_{19}$, čia I_{19} – 19 eilės vienetinė matrica, nes parametrų rinkinį θ sudaro 16 funkcijos $f_{OCV}(SOC)$ išraiškos

parametrų, būsenos x_t skirstinio $N\left(x_{t-1} - \frac{\Delta t \cdot I}{C}, \sigma_x^2\right)$ parametras σ_x^2 , baterijos talpa C ir vidinė varža R .

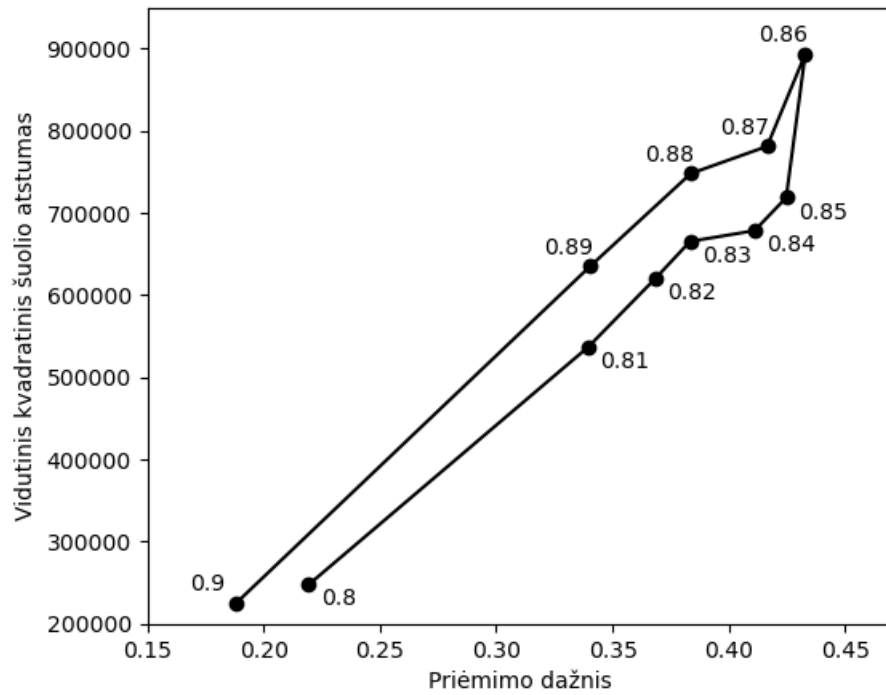
Pirmiausia tikrinamas platus parametro τ intervalas nuo 0,1 iki 1, imant reikšmes žingsniu 0,1. Pirmo adaptyvaus PMCMC etapo metu sudarytos parametrų θ grandinės vidutinis kvadratinis šuolio atstumas bei kandidačių θ' priėmimo dažnis esant skirtingoms τ reikšmėms palyginamas 12 pav.



12 pav. Vidutinio kvadratinio šuolio atstumo ir priėmimo dažnio palyginimas, priklausomai nuo parametro τ

Iš 12 pav. galima pastebėti, jog kandidačių θ' šuolį reguliuojančio parametro τ reikšmės, artimos 0,8, lemia aukščiausią kandidačių priėmimo dažnį bei didžiausią vidutinį kvadratinį šuolio atstumą. Verta paminėti, kad kai $\tau = 0,4$, pastebimas nemažas priėmimo dažnis, lyginant su gretimomis tikrintomis τ reikšmėmis. Tačiau dėl mažo vidutinio kvadratinio šuolio atstumo parametro reikšmė 0,4 toliau nenagrinėjama.

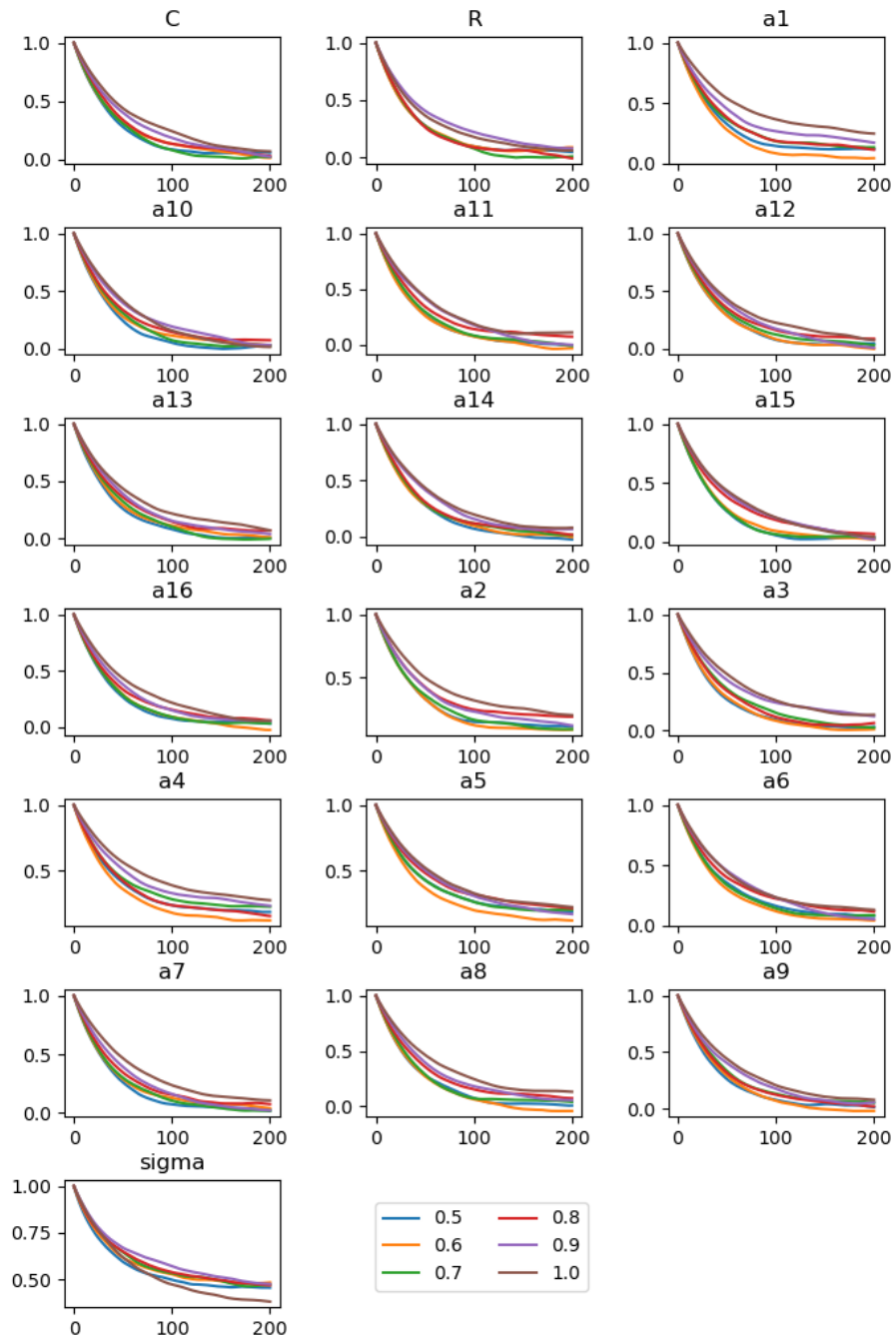
Aktualu nustatyti tinkamiausią parametro τ reikšmę pirmam adaptyvaus PMCMC algoritmui tiksliau, todėl atidžiau nagrinėjamas intervalas tarp 0,8 ir 0,9. Atlikus skaičiavimus, imant τ reikšmes iš intervalo kas 0,01, matuojamų rodiklių rezultatai palyginami 13 pav.



13 pav. Vidutinio kvadratinio šuolio atstumo ir priėmimo dažnio palyginimas, priklausomai nuo parametro $\tau \in [0,8,0,9]$

Pagal 13 pav. galima pastebėti, jog τ reikšmė, lygi 0,86, maksimizuoja priėmimo dažnį bei vidutinį kvadratinį šuolio atstumą. Didesnės τ reikšmės verčia algoritmą generuoti kandidatus θ' , tolimas nuo praėjusio grandinės elemento θ_{n-1} . Tokių kandidačių priėmimo tikimybė mažesnė, todėl kandidatės dažniau atmetamos – mažėja vidutinis šuolio atstumas ir priėmimo dažnis. Analogiškai, dėl mažesnių τ reikšmių generuojamos kandidatės θ' , artimos θ_{n-1} . Algoritmui priėmus mažai tikėtiną kandidatę θ' didelis skaičius sekančių kandidačių bus atmetamos, kadangi bus generuojamos mažos tikimybės aplinkoje. Tokiu atveju taip pat mažėja vidutinis šuolio atstumas bei priėmimo dažnis. Vadinas, siekiant kuo daugiau padengti parametų erdvę pirmojo adaptyvaus PMCMC algoritmo etapo metu parametras τ pasirenkamas lygus 0,86.

Antrojo ir trečiojo adaptyvaus PMCMC metodo etapų metu optimalią parametro τ reikšmę nusistatyti sunkiau, nes algoritmas vykdomas daug kartų su besikeičiančiomis sąlygomis. Kadangi šių etapų metu svarbu parametų θ grandinės skirstiniui priartėti tikslinio stacionariojo skirstinio, nereikalinga maksimizuoti šuolio atstumą bei priėmimo dažnį. Optimalią τ reikšmę antrame ir trečiame etapuose galima įvertinti pagal grandinės autokoreliacijos mažėjimo spartą. Spartesnis autokoreliacijos sumažėjimas iki nereikšmingo lygio lemia mažesnę relaksacijos tarpą r ir didesnę efektyvios MCMC grandinės imties dydį N_{ef} . Autokoreliacijos mažėjimo spartai įvertinti atliekami antrojo ir trečiojo etapo skaičiavimai su parametro τ reikšmėmis nuo 0,5 iki 1,0, žingsniu 0,1. Trečiojo etapo metu sugeneruotų grandinių autokoreliacijos funkcijos grafikai palyginami 14 pav.



14 pav. Parametrų rinkinio θ grandinių autokoreliacijos mažėjimo palyginimas, priklausomai nuo τ

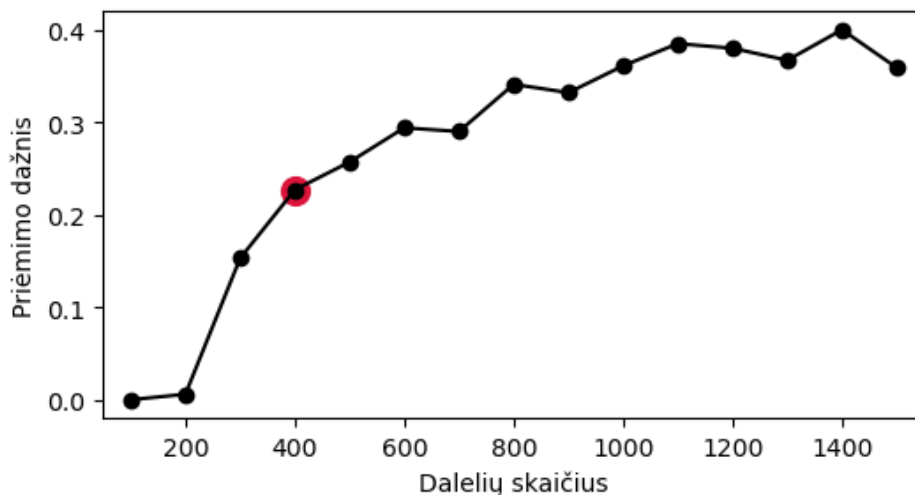
Pagal 14 pav. negalima pastebėti ryškaus skirtumo tarp grandinių autokoreliacijos, kai algoritmas atliekamas su skirtingomis τ reikšmėmis. Galima teigti, jog parametro τ atranka antrajame ir trečiajame PMCMC algoritmo etape yra mažiau svarbi – daro mažą įtaką generuojamai grandinei. Tolimesniuose tyrimuose τ reikšmė minėtiems etapams laisvai pasirenkama lygi 0,5.

3.3.2. Minimalus reikalingas dalelių skaičius

PMCMC algoritmo skaičiavimų trukmę lemia trys dydžiai: iteracijų skaičius, nusakantis generuojamos MCMC grandinės ilgį, duomenų eilučių skaičius, lemiantis dalelių filtro iteracijų skaičių, ir skaičius dalelių, kurių trajektorijos sekamos dalelių filtro skaičiavimų metu. PMCMC iteracijų skaičius pasirenkamas taip, kad sugeneruotos grandinės skirstinys priartėtų prie stacionariojo skirstinio ir būtų sudaryta pakankamo dydžio imtis parametrų skirstinio

aproksimacijai. Kitaip tariant, iteracijų skaičius pasirenkamas pagal poreikį, nes pakankamas imties dydis nėra vienareikšmiškai apibrėžtas. Duomenų eilučių skaičius priklauso nuo informacijos sukauptos duomenų rinkinyje apie sistemą. Baterijų atveju svarbu, kad duomenyse būtų stebimas pilnas baterijos iškrovimas ar įkrovimas. Sudarant duomenų imtį galima sumažinti atliekamų dalelio filtro iteracijų skaičių, tačiau tam tikras informacijos kiekis imtyje turi būti išlaikomas. Taigi, siekiant paspartinti PMCMC algoritmo skaičiavimus patogiausia derinti mažiausią reikalingą skaičių dalelių, aproksimuojančių būsenos x_t skirstinį.

Tikrinamas dalelių skaičius intervale nuo 100 iki 1500, imant reikšmes žingsniu 100. Apskaičiuotas kandidačių θ' priėmimo dažnis lyginamas 15 pav.

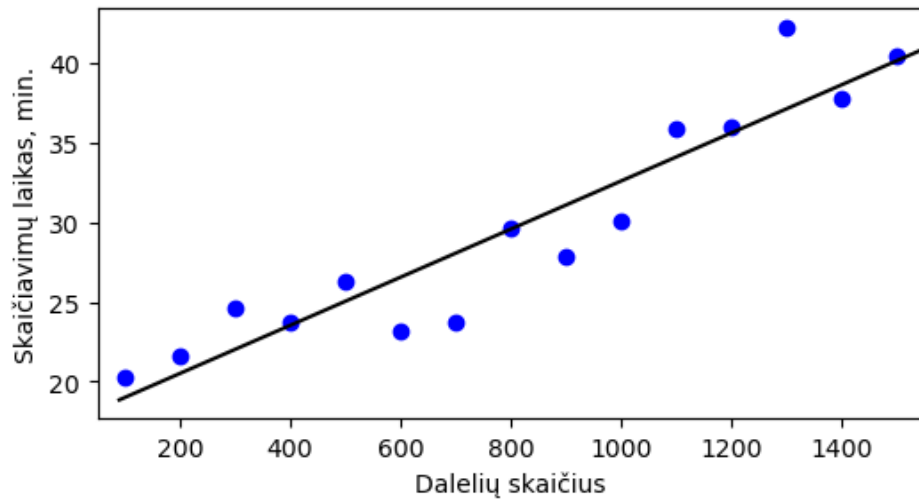


15 pav. Priėmimo dažnio palyginimas, priklausomai nuo dalelių skaičiaus

Stebimas priėmimo dažnio didėjimas esant vis didesniui dalelių skaičiui, su nedideliais nuokrypiais dėl atsitiktinumų. Didėjant dalelių skaičiui tikėtinumo funkcijos $p(y_{0:T}|\theta')$ aproksimacija artėja prie realybės. Pagal tendencijas, stebimas 15 pav., galima teigti, jog tikslesnė aproksimacija teigiamai paveikia kandidačių θ' priėmimo tikimybę α .

Minimalų reikalingą dalelių skaičių pasirinkti galima pagal poreikį. Modeliui taikyti baterijų valdymo sistemoje reikalingi spartūs skaičiavimai, todėl tolimesniems tyrimams pasirenkamas alkūnės taškas, stebimas 15 pav., kai dalelių skaičius 400.

Dalelių skaičiaus daromą įtaką skaičiavimų spartai galima stebėti tuo pačiu tyrimu, matuojant skaičiavimų trukmę su skirtingu skaičiumi dalelių. Skaičiavimų trukmės, išmatuotos atliekant adaptyvaus PMCMC algoritmo pirmąjį etapą su skirtingu skaičiumi dalelių, pateiktos 16 pav.



16 pav. Skaiciavimų laikas minutėmis priklausomai nuo dalelių skaičiaus

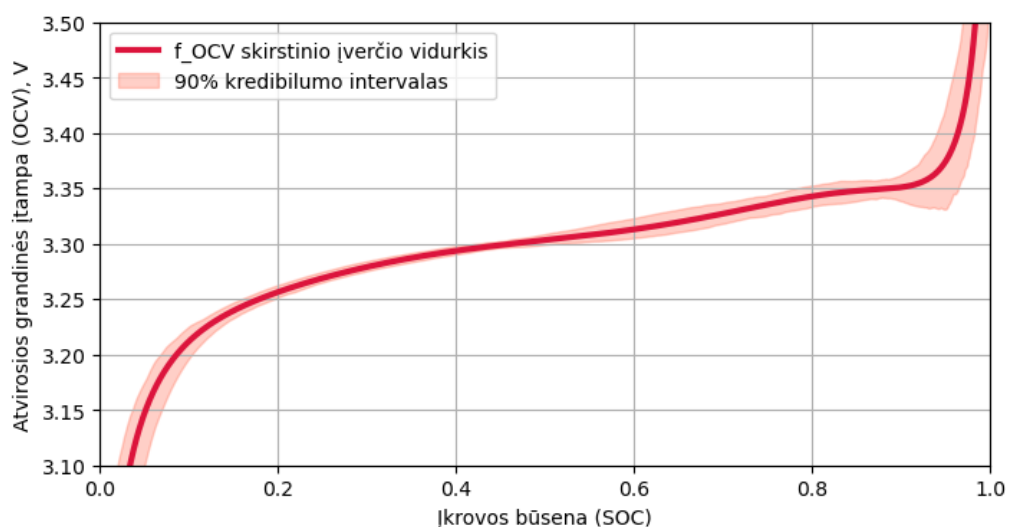
Nors skaičiavimų laiko matavimai, priklausomi nuo dalelių skaičiaus, labiau išsibarstę, galima pastebėti tiesinę priklausomybę tarp skaičiavimų trukmės ir dalelių skaičiaus. Galima daryti išvadą, kad renkantis mažiausią reikalingą dalelių skaičių ženkliai paspartinamas pilno adaptyvaus PMCMC algoritmo įvykdymas.

3.4. Baterijos EVE LF173 būsenų vertinimas

Atlikus PMCMC algoritmo hiperparametrų analizę vykdomas baterijos EVE LF173 būsenų įvertinimas. RUL įvertinimui reikalingi tos pačios baterijos vartojimo duomenys per ilgą laiką, kad būtų galima sudaryti baterijos degradacijos nuo laiko priklausomybės funkciją ir numatyti, kada degradacija pasieks kritinę ribą. Kadangi turimas tik vieno baterijos EVE LF173 dinaminio testo duomenų rinkinys, tyrime apsiribojama įvertinti baterijos būsenas SOC ir SOH.

3.4.1. Įkrovos būsenos vertinimas

SOC įvertį laike galima gauti panaudojant $f_{OCV}(SOC)$ atvirkštinę funkciją $f_{SOC}(OCV)$. Funkcijos $f_{OCV}(SOC)$ parametrinės išraiškos įvertis, gautas PMCMC metodu, pateiktas 17 pav.



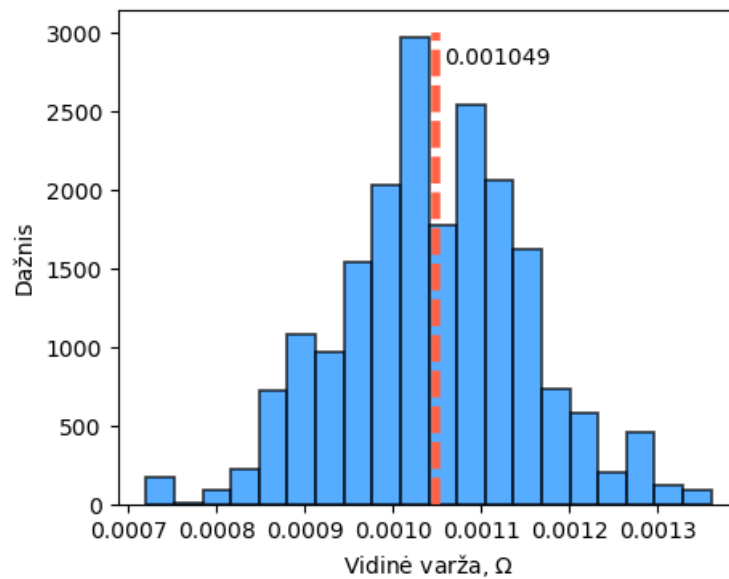
17 pav. Funkcijos $f_{OCV}(SOC)$ įvertis baterijai EVE LF173

Pagal 90% kredibilumo intervalą, matomą 17 pav., galima teigti, kad modelio rezultatų neapibrėžtumas nėra labai stiprus. Stipresnis neapibrėžtumas stebimas, kai SOC artėja 1. Tai galima paaiškinti mažu duomenų kiekiu, kai baterija pilnai įkrauta.

Atvirkštinės funkcijos $f_{SOC}(OCV)$ analitinis sprendinys neįmanomas, todėl pasitelkiami skaitiniai metodai. Pagal $f_{OCV}(SOC)$ funkciją sudaroma SOC ir OCV reikšmių porų lentelė (SOC nuo 0 iki 1, žingsniu 0,001). Tam tikru laiko momentu išmatavus OCV reikšmę, SOC įvertis gaunamas interpoliuojant pagal sudarytą reikšmių porų lentelę. OCV reikšmė apskaičiuojama

$$V_{OCV} = V + I \cdot R, \quad (25)$$

čia V – išėjimo įtampa, I – srovės stipris, R – baterijos vidinė varža. V ir I yra matuojami baterijos valdymo sistemos, o R skirstinys įvertintas PMCMC algoritmo metu. Sugeneruotos R grandinės histograma pateikta 18 pav.

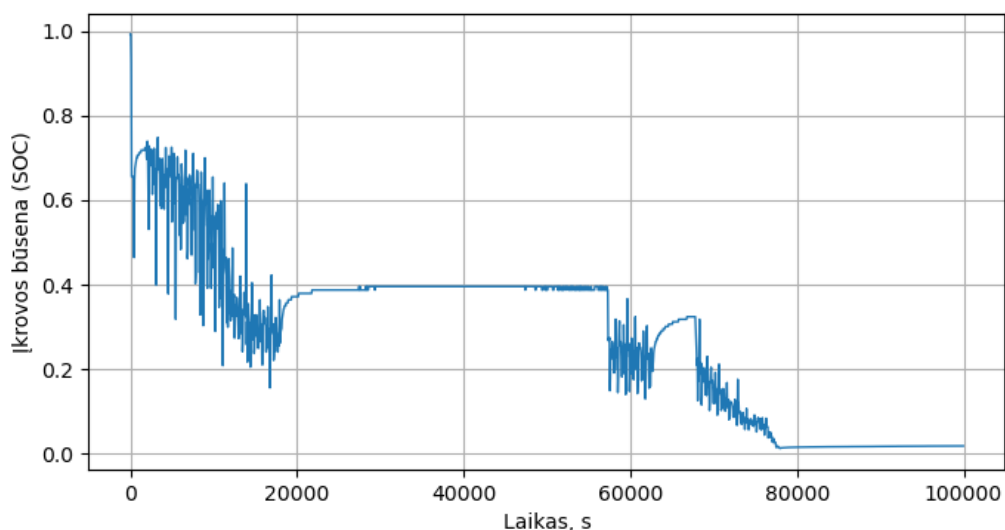


18 pav. Baterijos EVE LF173 vidinės varžos R imties histograma

Vidinės varžos R imties vidurkis 0,001049 gali būti naudojamas įvertinti OCV bet kuriuo laiko momentu.

Atvirkštinę funkciją $f_{SOC}(OCV)$ interpoliuoti galima užtikrinus funkcijos monotoniškumą. 17 pav. akivaizdu, kad funkcijos $f_{OCV}(SOC)$ skirstinio įverčio vidurkis monotoniškai didėja, tačiau kredibilumo intervalo apatinė riba nėra monotoniška. Dėl to apsiribojama atvirkštinės funkcijos $f_{SOC}(OCV)$ vidurkiu.

Interpoliuojant atvirkštinę funkciją $f_{SOC}(OCV)$ gaunamas SOC įvertis. SOC įvertinimas atliktas EVE LF173 dinaminio testo duomenims, SOC reikšmių laike grafikas pateiktas 19 pav.



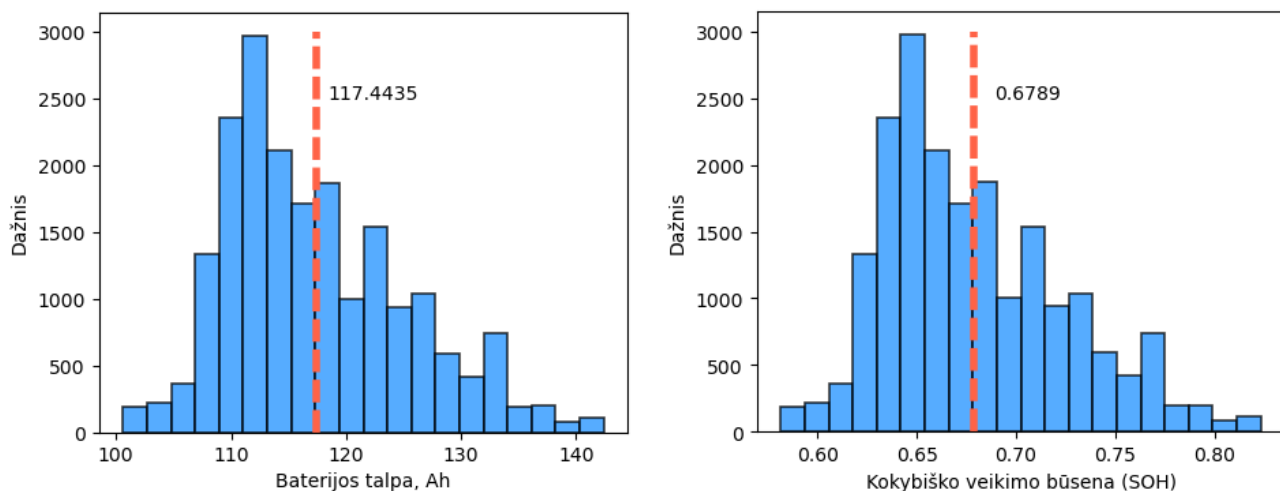
19 pav. Baterijos EVE LF173 SOC įvertis dinaminio testo metu

Staigūs SOC svyravimai, matomi 19 pav., atitinka V ir I svyravimus, esančius dinaminio testo duomenyse. Glodinimo algoritmai gali būti taikomi siekiant aiškiau stebėti SOC dinamiką.

Pagal apmokytą modelį gautus vidinės varžos R ir funkcijos $f_{OCV}(SOC)$ kreivės įverčius galima taikyti SOC vertinimui su naujais duomenimis. Svarbu, kad šie duomenys būtų surinkti neilgai trukus po paskutinio modelio atnaujinimo. Po tam tikro laiko, pavyzdžiui savaitės ar mėnesio, priklausomai nuo baterijos vartojimo intensyvumo, paūmėjus degradacijai, būtina atnaujinti modelio parametrus, kad būtų išlaikytas SOC įverčių tikslumas.

3.4.2. Kokybiško veikimo būsenos įvertinimas

SOH apibrėžiamas kaip esamos baterijos talpos ir gamykinės talpos santykis. Kadangi PMCMC algoritmo metu yra įvertinamas baterijos talpos C skirstinys, galima apskaičiuoti SOH įvertį. Tam reikalinga žinoti baterijos gamykinę talpą. EVE LF173 atveju, ši talpa lygi 173 Ah. Baterijos talpos C imties ir SOH histogramos pateiktos 20 pav.



20 pav. Baterijos EVE LF173 talpos C ir SOH histogramos

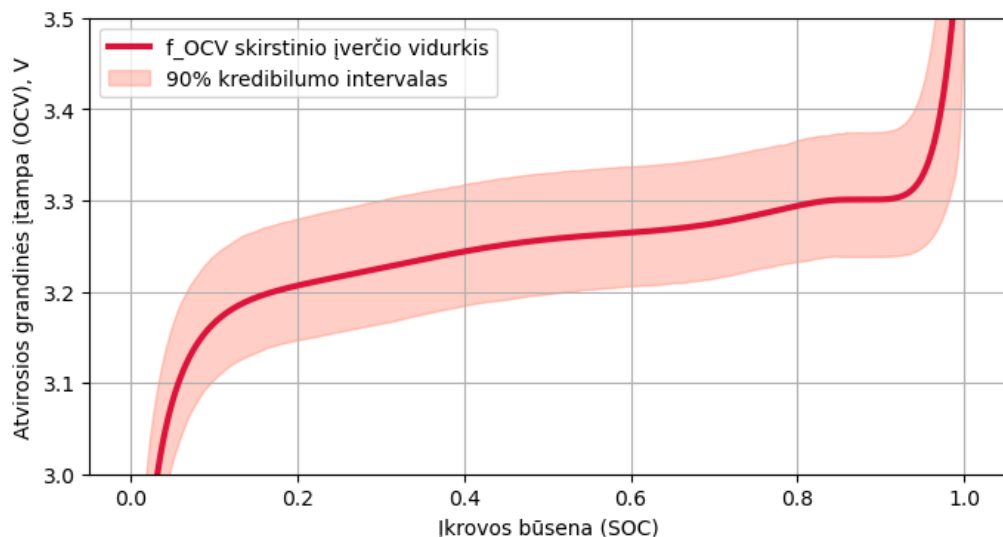
Baterijos talpos C imties vidurkis 117,444, standartinis nuokrypis 7,9278. SOH vidurkis 0,6789, standartinis nuokrypis 0,0458. Iš SOH vidurkio galima teigti, jog baterija jau kritusi žemiau 70% talpos ribos, tad elektromobiliui nebetinkama, tačiau galima kitiems taikymams ar pakartotiniam panaudojimui. Atliktus SOH įvertinimą kelis kartus per baterijos gyvavimo laikotarpį būtų galima prognozuoti RUL.

3.5. Baterijos EVE LF105 būsenų vertinimas

Analogiškai atliktas baterijos EVE LF105 būsenų vertinimas, pasitelkiant adaptyvų PMCMC algoritmą. Šiuo atveju turimas mažesnis baterijos testo duomenų kiekis: pilnas iškrovimas stebimas per 30000 sekundžių, o matavimai atlikti kas 1 sekundę, kai EVE LF173 atveju matavimai buvo atlikti kas 0,5 sekundės. Todėl keičiamas duomenų imties sudarymas: 1-ajame etape imamas kas 200-asis duomenų rinkinio įrašas, o 3-ajame etape įrašai imami žingsniu 100, 50, 20, 10, 5.

3.5.1. Įkrovos būsenos vertinimas

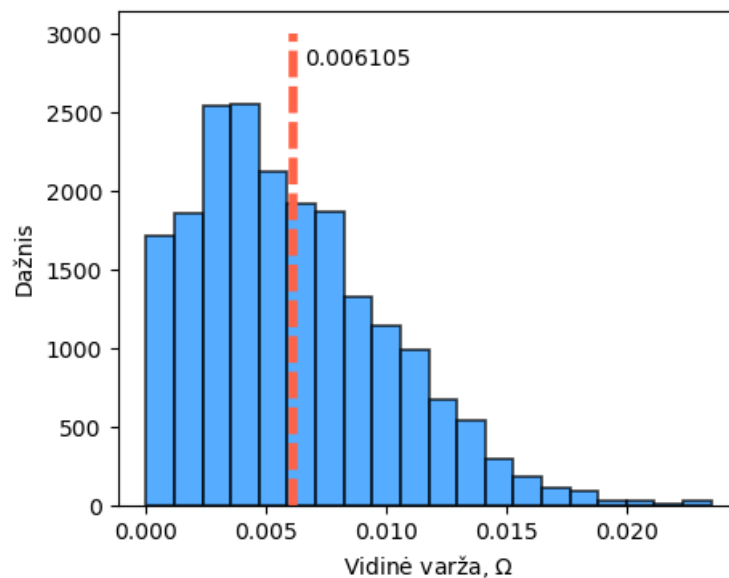
SOC įverčiui reikalinga funkcijos $f_{OCV}(SOC)$ parametrinė išraiška. Išraiškos įvertis, gautas baterijai EVE LF105, pateiktas 21 pav.



21 pav. Funkcijos $f_{OCV}(SOC)$ įvertis baterijai EVE LF105

Pagal 90% kredibilumo intervalą matomas didesnis neapibrėžtumas, nei EVE LF173 atveju. $f_{OCV}(SOC)$ kreivės skirstinys nėra pakankamai susiaurinamas adaptyvaus algoritmo 2-ojo ir 3-ojo etapų metu, todėl praktiniam algoritmo taikymui gali būti reikalingas tolimesnis adaptyvaus PMCMC metodo hiperparametrų derinimas.

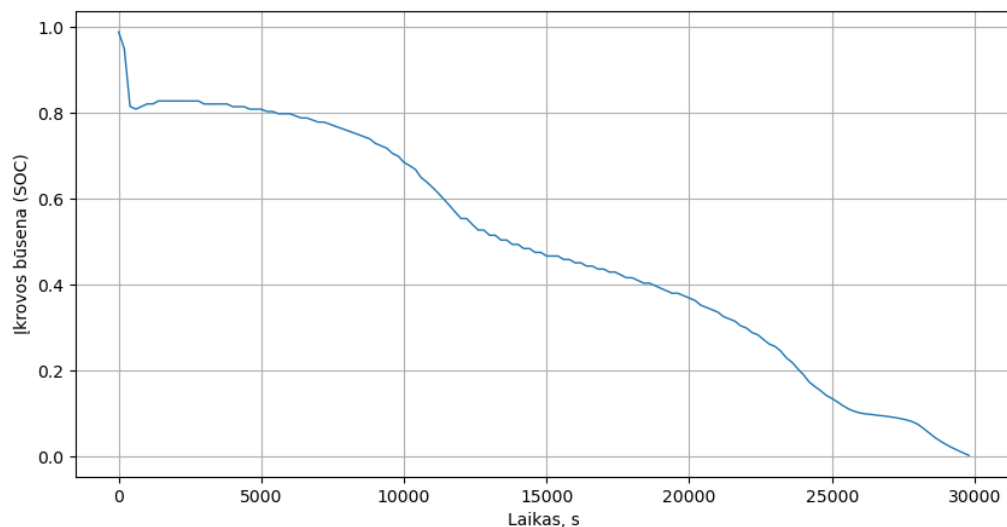
Atvirosios grandinės įtampai V_{OCV} apskaičiuoti pasitelkiamas vidinės varžos R įvertinto aposteriorinio skirstinio vidurkis. Sugeneruotos baterijos vidinės varžos R grandinės, aproksimuojančios aposteriorinį skirstinį, histograma pateikta 22 pav.



22 pav. Baterijos EVE LF105 vidinės varžos R imties histograma

Baterijos EVE LF105 vidinės varžos R skirstinio įvertio vidurkis 0,006105. Vidurkis panaudojamas V_{OCV} laike įvertinimui pagal (25).

Kadangi 21 pav. stebimas funkcijos $f_{OCV}(SOC)$ vidurkio monotoniškas kitimas, atvirkštinės funkcijos $f_{SOC}(OCV)$ skaitinis įvertis gaunamas interpoliuojant. Kaip argumentą panaudojus V_{OCV} reikšmes, gautas iš baterijos EVE LF105 statinio testo duomenų ir vidinės varžos R vidurkio, sudaromas SOC kitimo laike įvertis statinio iškrovimo testo metu. SOC reikšmių laike grafikas pateiktas 23 pav.



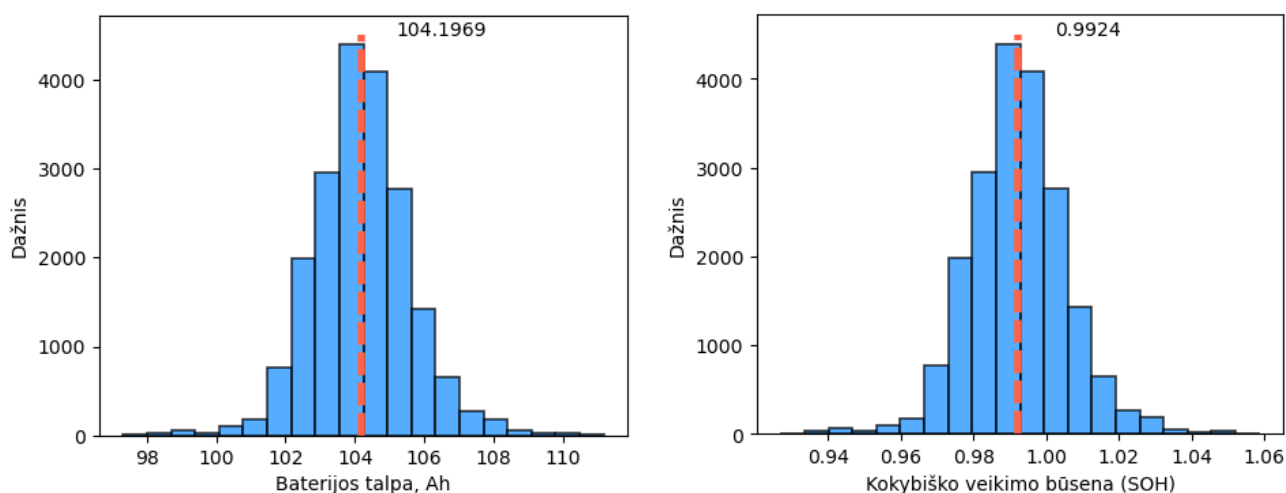
23 pav. Baterijos EVE LF105 SOC įvertis statinio testo metu

SOC įvertis apskaičiuotas su statinio iškrovimo testo duomenimis, todėl matomas palaipsninis įkrovos kritimas laike. SOC priklausomybė nuo laiko artima tiesinei, išskyrus statinio testo pradžioje. Per pirmąsias 1000 sekundžių matomas staigus įkrovos kritimas, po kurio SOC nesmarkiai pakyla.

Tokį išskirtinį įkrovos kitimą statinio iškrovimo metu galima paaiškinti duomenų rinkinyje esamų matavimų netikslumais, nes išėjimo įtampos grafike (8 pav.) taip pat stebimas nežymus pakilimas apie 1000-ąją sekundę. Be to, SOC įverčiui gauti naudojami funkcijos $f_{OCV}(SOC)$ ir vidinės varžos R vidurkiai, tad nėra atsižvelgta į SOC aposteriorinį skirstinį, su kuriuo gali atsiskleisti dar įvairesnė dinamika.

3.5.2. Kokybiško veikimo būsenos įvertinimas

Baterijos EVE LF105 nominali talpa lygi 105 Ah. Nustatant SOH apskaičiuojamas santykis tarp baterijos talpos tiriamuoju metu ir nominalios talpos. Baterijos talpos C skirstinį aproksimuojančios imties ir SOH įverčių histogramos pateiktos 24 pav.



24 pav. Baterijos EVE LF105 talpos C ir SOH histogramos

Gautas baterijos talpos C vidurkis lygus 104,1969; standartinis nuokrypis 1,4175. SOH įverčio vidurkis 0,9924; standartinis nuokrypis 0,0135. Pagal SOH įverčio vidurkį galima teigti, jog baterija EVE LF105 dar nėra nusidėvėjusi ir yra artima naujai pagamintai baterijai.

SOH standartinis nuokrypis ženkliai mažesnis už baterijos EVE LF173 SOH įverčio standartinį nuokrypį ($0,0135 < 0,0458$). Tai būtų galima paaiškinti statinio testo duomenų glotnumu, lyginant su dinaminiam teste stebimais smarkiais įtampos ir srovės stiprio svyravimais. Tačiau toks pastebėjimas prieštarauja padidėjusiam funkcijos $f_{OCV}(SOC)$ parametrų neapibrėžtumui. Tokiu būdu yra sunku lyginti naudojamo algoritmo efektyvumą skirtingų baterijų būsenoms vertinti. Adaptyvaus PMCMC algoritmo validacijai praktikoje reikalinga atlikti eksperimentus su daugiau įvairios sandaros baterijų duomenų, gautų skirtingai atliekant fizinius eksperimentus dinamiškomis sąlygomis.

3.6. Ekonominė analizė

Baterijų būsenų vertinimo poveikiui ir vertei pagrįsti atliekama ekonominė kaštų ir naudos analizė. Tikslus būsenų įvertinimas leidžia pastebėti, kada baterijos pirmasis panaudojimas, pavyzdžiui, elektromobilyje, artėja į pabaigą. O gebėjimas prognozuoti baterijos degradaciją laike pagal būsenų stebėjimus leidžia įvertinti baterijos pakartotinio panaudojimo galimybę.

Toliau pagal 1.1.4 skyrelyje apibrėžtą kaštų ir naudos analizės schemą lyginami trys baterijų gamybos atvejai: gamyba iš naujai išgautų medžiagų, gamyba iš perdirbtų medžiagų, ir baterijų surinkimas iš susidėvėjusių celių ir modulių.

1. Kontekstas, kuriame vykdomas projektas

Socialinis, ekonominis, institucinis ir politinis kontekstas, aktualus baterijų gamybai ir perdirbimui, pateiktas 6 lentelėje.

6 lentelė. Konteksto, kuriame vykdomas projektas, analizė

Konteksto grupė	Kontekstas
Socialinis kontekstas	Darbo rinka: - Reikalingi specialistai, inžinieriai, patyrę su baterijomis - Partnerystės su aukštosiomis mokyklomis, praktikos galimybės skatina įgūdžių lavinimą Taršos mažinimo siekis: - Tikslas mažinti išmetamų šiltnamio dujų kiekį - Siekis panaudoti metalus (litį, kobaltą, nikelį) pakartotinai
Ekonominis kontekstas	Darbo vietų sukūrimas: - Išnaudojama esama kitų produktų gamybos infrastruktūra - Sukuriamos aukšto technologinio lygio darbo pozicijos Sudaroma žiedinė ekonomika: - Skatinama siekti tvarumo vertybių - Reikalingas visuomenės apšvietimas apie perdirbimo, pakartotinio panaudojimo svarbą - Mažinama energijos kaupimo sistemų kaina Finansinės infrastruktūros sudarymas: - Ribotos finansavimo galimybės - Pakartotinio panaudojimo baterijų veikimo garantija Partnerių atranka: - Atsakomybių paskirstymas tiekimo grandinėje - Partnerystė su elektromobilių gamintojais
Institucinis kontekstas	Saugumo standartai: - Baterijų apdorojimo standartai - Transportavimo reglamentai - Darbuotojų saugumas Gamtosaugos reglamentai: - Atliekų tvarkymas - Oro kokybės reikalavimai
Politinis kontekstas	Mokesčiai: - Transportavimo mokesčiai - Baterijų prekybos tarifai Tarptautinė situacija: - Tiekimo grandinės užtikrinimas - Eksporto kontrolė - Konkurencija

Socialinį kontekstą sudaro besikeičianti darbo rinka ir bendras visuomenės siekis mažinti taršą. Kadangi baterijų apdorojimui, ardymui ir surinkimui reikalingi apmokyti specialistai, svarbu teikti galimybę tapti specialistais dar aukštosiose mokyklose, praktikos programose.

Ekonomine prasme, baterijų perdirbimo ar apdorojimo pakartotiniam panaudojimui projektų vykdymas sukurtų naujų darbo vietų aukšto technologinio lygio specialistams. Taip pat būtų siekiama tvarumo, nes būtų sudaroma žiedinė ekonomika. Tačiau finansinės infrastruktūros sudarymas gali būti sudėtingas, kadangi finansavimo šaltiniai riboti. Taip pat svarbu užtikrinti apdorotų baterijų veikimą ir galimybę kompensuoti garantijomis, kadangi pakartotinio panaudojimo technologija vis dar vystoma ir gali sukelti vartotojų nepasitikėjimą. Partnerių atranka yra svarbus žingsnis baterijų tyrimams vystyti bei naujausių technologijų panaudojimui užtikrinti.

Institucinis kontekstas apima darbo su baterijomis saugumo standartus, kurių reikalavimams keičiantis gali susidaryti papildomų išlaidų dėl naujų įrenginių įsigijimo ar papildomų darbuotojų apmokymų. Taip pat, gamtos saugos reglamentai gali riboti baterijų gamybos ar perdirbimo veiklą.

Politinis kontekstas siejasi su taikomais mokesčiais transportuojant ir parduodant ar perkant baterijas, bei su esamomis tarptautinėmis sąlygomis. Dėl besikeičiančių geopolitinių sąlygų, konfliktų, tarifų svarbu užsitikrinti pastovią tiekimo grandinę baterijų medžiagoms ir komponentams gauti. Eksporto kontrolė gali riboti pagamintų baterijų pardavimą. Kuriant baterijų perdirbimo įstaigą svarbu atsižvelgti į esamą konkurenciją kitose šalyse. Pavyzdžiui, Kinijoje labiausiai išvystyta elektromobilių ličio jonų baterijų gamybos ir perdirbimo infrastruktūra.

2. Projekto tikslai

1-uoju atveju, kai baterijų gamyba atliekama iš naujai išgautų medžiagų, projekto tikslai:

- sudaryti baterijos medžiagų tiekimo grandinę;
- įdiegti atitinkamą infrastruktūrą;
- įrengti patalpas, prietaisus, reikalingus baterijos dalių gamybai, baterijų surinkimui;
- gaminti ir parduoti baterijas.

Kadangi tradicinė baterijų gamyba jau išvystyta ir vykdoma, tolimesnėje analizėje neskaičiuojami tiekimo grandinės, infrastruktūros, patalpų įrengimo kaštai. Analizuojamas tik baterijų pagaminimo ir pardavimo žingsnis, tai yra, medžiagų kaštų ir pardavimo pelno vertės.

2-uoju ir 3-uoju atveju projekto tikslai:

- sudaryti infrastruktūrą susidėvėjusių baterijų surinkimui;
- įrengti patalpas ir prietaisus baterijų išardymui arba perdirbimui;
- gaminti arba surinkti ir parduoti baterijas.

Šiais atvejais esamos infrastruktūros ar įrengtų patalpų nėra, todėl reikalinga įvertinti investicijas, būtinas projekto įgyvendinimui.

3. Projekto dalyviai

Dalyviai, susiję su baterijų gamyba, yra esami baterijų gamintojai bei perdirbimo įmonės, kurios gali suteikti technologijas, reikalingas projektui įvykdyti. Elektros energijos kaupimo sistemas įdiegiančios įmonės gali atlikti testavimus ir patikrinti parduodamų baterijų saugumą ir kokybišką

veikimą. Aukštosios mokyklos ir laboratorijos gali siūlyti baterijų specialistų apmokymus. Valstybinės įstaigos reglamentuoja baterijų gamybos ir pardavimo veiklas. Įvairūs investicijų fondai gali suteikti finansavimą projektų vykdymui. Galiausiai, tiekėjai suteikia reikalingas medžiagas baterijoms gaminti ar apdoroti.

4. Paklausos analizė, poveikio aplinkai tyrimas

Tyrimo metu laikoma, jog baterijų, skirtų energijos kaupimui, paklausa atitinka pakartotinio panaudojimo baterijų rinką. Pakartotinio panaudojimo baterijos gali padengti tik tokią dalį paklausos, kurią atitinka jų rinkos dydis. Todėl kaštų ir naudos analizėje palyginami atvejai, kai ši paklausos dalis padengiama iš naujai išgautų medžiagų ir iš perdirbtų medžiagų pagamintomis baterijomis bei baterijoms, surinktomis iš celių, skirtų pakartotiniam panaudojimui. Pagal MarketsandMarkets tyrimą, 2025 m. bendra visų pakartotiniam panaudojimui skirtų baterijų talpa yra apie 145 mln. kWh, ir su 25,5% kasmetiniu augimu 2030 m. pasieks 450 mln. kWh [45].

Poveikio aplinkai sumažinimą įvertinti sunkiau, nes išmetamų šiltnamio dujų kiekis ir energijos sąnaudos perdirbant baterijas priklauso nuo taikomų metodų: hidrometalurgijos, pirometalurgijos, ir kt. Be to, skirtingos sandaros baterijų perdirbimo sėkmingumas gali būti įvairus. Pagal 2025 m. tyrimą nustatyta, kad baterijų gamybai iš naujai išgautų medžiagų sunaudojama 297,51 megadžaulių energijos vienam kilogramui, ir išmetami 20,85 kilogramai šiltnamio dujų. Hidrometalurgijos atveju baterijos 1 kilogramo perdirbimui suvartojama 23,73 megadžaulių energijos ir išmetama 1,73 kilogramo šiltnamio dujų, o baterijos pagaminimo iš perdirbtų medžiagų procese sunaudojama 266,14 megadžaulių energijos ir išmetami 18,61 kilogramai šiltnamio dujų 1 kilogramui baterijos pagaminti. Vadinasi, perdirbant hidrometalurgijos metodu stebimas $\left(1 - \frac{23,73+266,14}{297,51}\right) \cdot 100\% = 2,57\%$ mažesnis energijos suvartojimas ir $\left(1 - \frac{1,73+18,61}{20,85}\right) \cdot 100\% = 2,45\%$ mažesnis išmetamų šiltnamio dujų kiekis [48].

Pakartotinio panaudojimo atveju neatliekama baterijų gamyba iš medžiagų ir medžiagų išgavimas nėra reikalingas, todėl energijos sąnaudos ir išmetamų šiltnamio dujų kiekis daug mažesnis, lyginant su tradicine ar iš perdirbtų medžiagų atliekama gamyba. 2018 m. tyrimu nustatyta, jog panaudojant pakartotinai bateriją tinklo elektros energijos kaupimui vietoje naujai pagamintos baterijos sumažinamos medžiagų sąnaudos 93%, o poveikis aplinkai sumažinamas 58% [49]. Kadangi sudėtinga rasti tikslesnius energijos sąnaudų ir išmetamų šiltnamio dujų sumažinimo įverčius, 58% sumažinimas abiem aspektais toliau naudojamas skaičiavimams.

5. Finansų ir ekonominė analizė

Finansų ir ekonominė analizė šio tyrimo metu apibendrinama vienu žingsniu. Skaičiavimams naudojamos rinkos kainos, tačiau prie išlaidų ar naudos pridedamos poveikio aplinkai dedamosios. Aktualus paklausos įvertinimas ir kilogramais skaičiavimų palengvinimui. Vidutiniškai 1 kWh elektromobilio baterijos talpa atitinka 3,7 kilogramus baterijos [50].

Pirmiausia nagrinėjamas tradicinės baterijų gamybos atvejis. Baterijų medžiagų kaina sudaro apie 75% baterijos gamybos kainos [51]. Pagal 4 lentelėje pateiktas medžiagų kainas ir baterijų paklausą kilogramais galima apskaičiuoti baterijų gamybos kaštus ateinantiems 5 metams.

Ličio jonų baterijų vidutinė globali pardavimo kaina 2024 m. įvertinta 115 JAV dolerių už 1 kWh. 2025 m. numatytas kainos nukritimas per 3 JAV dolerius. Ateityje numatomas pastovus baterijų kainos kritimas dėl medžiagų, pavyzdžiui, ličio karbonato, kainų kritimo [52]. Tačiau kadangi vienareikšmė medžiagų kainų kritimo prognozė neaptikta, tyrime naudojamos nesikeičiančios medžiagų bei baterijų kainos.

Ličio jonų baterijos tradicinės gamybos kaštų ir naudos vertės apskaičiuotos ir pateiktos 7 lentelėje:

7 lentelė. Ličio jonų baterijų gamybos iš naujai išgautų medžiagų kaštų ir naudos analizė

Metai	2025	2026	2027	2028	2029	2030
Baterijų paklausa, išreikšta mln. kWh	145,00	181,98	228,38	286,62	359,70	451,43
Baterijų paklausa, išreikšta mln. kg	536,50	673,31	845,00	1060,48	1330,90	1670,28
Medžiagų kaštai (75% išlaidų), mlrd. JAV dol.	6,968	8,745	10,974	13,773	17,285	21,693
Gamybos kaštai (25% išlaidų), mlrd. JAV dol.	2,323	2,915	3,658	4,591	5,762	7,231
Viso išlaidų, mlrd. JAV dol.	9,290	11,659	14,632	18,364	23,047	28,923
Pardavimų pelnas, mlrd. JAV dol.	16,675	20,927	26,264	32,961	41,366	51,914

Naudą vertinant pardavimų pelnu, o kaštus išlaidomis, apskaičiuojamas NPV. Laisvai pasirenkama diskonto norma $r = 0,1$. Tuomet $NPV = \sum_{t=0}^T \frac{(B_t - C_t)}{1,1^t} = 63,18$ mlrd. JAV dolerių (vertinant pasaulinėje rinkoje).

Baterijų perdirbimo atveju, medžiagų kaštus keičia susidėvėjusių baterijų išigijimo ir reikiamų medžiagų išgavimo kaštai. Perdirbant baterija sutraiškoma, ir išgaunama tam tikra medžiagų masė. Iš 1 kilogramo baterijos išgauti medžiagų masę kainuoja apie 0,2 JAV dolerio [53], o pasitelkiant hidrometalurgiją išgauti metalus – apie 1,8 JAV dolerio [54]. Prie kaštų svarbu įtraukti pradinės investicijas, reikalingas įdiegti susidėvėjusių baterijų surinkimo ir transportavimo infrastruktūrai, paruošti patalpoms, įrenginiams. Šios pradinės investicijos susideda iš daug skirtingų ir sunkiai pinigėmis sumomis įvertinamų dedamųjų. Todėl tyrimo metu visos reikalingos investicijos apibendrinamos nežinomuojų I .

Nauda baterijų perdirbimo atveju susideda iš pardavimų pelno bei sutapytų energijos resursų ir sumažinto išmetamų šiltnamio dujų kiekio. 2024 m. įvertinta vidutinė anglies dioksido kredito kaina lygi 4,8 JAV dolerių už toną anglies dioksido [55]. Tuo tarpu vidutinė globali elektros energijos kaina lygi 0,11 JAV dolerio už 1 kWh, arba 0,0306 JAV dolerio už 1 MJ [56]. Ličio jonų baterijos gamybos iš perdirbtų medžiagų kaštų ir naudos vertės pateiktos 8 lentelėje:

8 lentelė. Ličio jonų baterijų gamybos iš perdirbtų medžiagų kaštų ir naudos analizė

Metai	2025	2026	2027	2028	2029	2030
Baterijų paklausa, išreikšta mln. kWh	145,00	181,98	228,38	286,62	359,70	451,43
Baterijų paklausa, išreikšta mln. kg	536,50	673,31	845,00	1060,48	1330,90	1670,28
Pradinės investicijos	I	-	-	-	-	-
Perdirbimo kaštai, mlrd. JAV dol.	1,073	1,347	1,690	2,121	2,662	3,341
Gamybos kaštai, mlrd. JAV dol.	2,323	2,915	3,658	4,591	5,762	7,231
Viso išlaidų, mlrd. JAV dol.	3,396 + I	4,261	5,348	6,712	8,423	10,571
Pardavimų pelnas, mlrd. JAV dol.	16,675	20,927	26,264	32,961	41,366	51,914
Sumažintas išmetamo anglies dioksido kiekis, mln. kg	274,06	343,94	431,65	541,72	679,86	853,22
Anglies dioksido kreditai, mlrd. JAV dol.	0,001	0,002	0,002	0,003	0,003	0,004
Sutaupyta energijos kiekis, mlrd. MJ	4,10	5,15	6,46	8,11	10,18	12,77
Sutaupyta energijos kaina, mlrd. JAV dol.	0,126	0,158	0,198	0,248	0,311	0,391
Bendra nauda, mlrd. JAV dol.	16,802	21,086	26,463	33,211	41,680	52,309

Pagal diskonto normą $r = 0,1$ apskaičiuojamas $NPV = \sum_{t=0}^T \frac{(B_t - C_t)}{1,1^t} = 114,69 - I$ mlrd. JAV dolerių. Tuomet maksimalus investicijų I dydis, su kuriuo perdirbimo atvejo NPV prilygsta tradicinės baterijų gamybos NPV, yra $I = 114,69 - 63,18 = 51,51$ mlrd. JAV dolerių. Vadinasi, jei įmanoma įdiegti reikiamą infrastruktūrą perdirbimo projekto įgyvendinimui su mažesnėmis nei 51,51 mlrd. JAV dolerių investicijomis, projekto NPV bei investicijų grąžos norma yra didesnės ir projektas ekonomiškai efektyvesnis už įprastinį variantą.

Analogiškai atliekama pakartotinio panaudojimo projekto kaštų ir naudos analizė. Naujos baterijos surinkimo iš pakartotiniam panaudojimui dalių kaina susideda iš degradacijos įvertinimo testų, išardymo, supakavimo kaštų, baterijos valdymo sistemos naujinimų. Apibendrinus visas išlaidas, susijusias su baterijos paruošimu pakartotiniam panaudojimui, gaunama apdorojimo kaina lygi 40 JAV dolerių už 1 kWh [57].

Prie kaštų taip pat pridedamas investicijų nežinomas I . Baterijų surinkimui ir transportavimui reikalinga infrastruktūra perdirbimo ir apdorojimo pakartotiniam apdorojimui atvejais yra vienoda. Reikalingas investicijų dydis gali skirtis tik dėl įrenginių, patalpų kainos, darbuotojų specialistų apmokymo išlaidų ir atlyginimų. Dėl paprastumo tyrimo metu laikoma, kad investicijos šiais aspektais abejais atvejais taip pat yra vienodos. Ličio jonų baterijų apdorojimo pakartotiniam panaudojimui kaštų ir naudos vertės pateiktos 9 lentelėje:

9 lentelė. Ličio jonų baterijų apdorojimo pakartotiniam panaudojimui kaštų ir naudos analizė

Metai	2025	2026	2027	2028	2029	2030
Baterijų paklausa, išreikšta mln. kWh	145,00	181,98	228,38	286,62	359,70	451,43
Baterijų paklausa, išreikšta mln. kg	536,50	673,31	845,00	1060,48	1330,90	1670,28
Pradinės investicijos	I	-	-	-	-	-
Apdorojimo kaštai, mlrd. JAV dol.	5,800	7,279	9,135	11,465	14,388	18,057
Viso išlaidų, mlrd. JAV dol.	$5,800 + I$	7,279	9,135	11,465	14,388	18,057
Pardavimų pelnas, mlrd. JAV dol.	16,675	20,927	26,264	32,961	41,366	51,914
Sumažintas išmetamo anglies dioksido kiekis, mln. kg	6487,89	8142,31	10218,60	12824,34	16094,54	20198,65
Anglies dioksido kreditai, mlrd. JAV dol.	0,031	0,039	0,049	0,062	0,077	0,097
Sutaupyta energijos kiekis, mlrd. MJ	92,58	116,18	145,81	182,99	229,65	288,22
Sutaupyta energijos kaina, mlrd. JAV dol.	2,833	3,555	4,462	5,600	7,027	8,819
Bendra nauda, mlrd. JAV dol.	19,539	24,521	30,774	38,622	48,470	60,830

Pagal diskonto normą $r = 0,1$ apskaičiuojamas $NPV = \sum_{t=0}^T \frac{(B_t - C_t)}{1,1^t} = 117,54 - I$ mlrd. JAV dolerių. Tuomet maksimalus investicijų I dydis, su kuriuo perdirbimo atvejo NPV prilygsta tradicinės baterijų gamybos NPV, yra $I = 117,54 - 63,18 = 54,36$ mlrd. JAV dolerių.

Darant prielaidą, kad investicijų dydis I vienodas perdirbimo ir pakartotinio panaudojimo atvejais, galima abiejų atvejų NPV palyginti tiesiogiai. Pakartotinio panaudojimo NPV didesnis $117,54 - I - (114,69 - I) = 2,85$ mlrd. JAV dolerių. Galima teigti, jog pakartotinio panaudojimo projektas ekonomiškai efektyvesnis už perdirbimo projektą.

6. Rizikos vertinimas

Analizuojamų baterijų gamybos projektų ekonominę vertę gali paveikti įvairūs rizikos veiksniai. Veiksniai, išskirstyti pagal rizikos lygį, pateikti 10 lentelėje.

10 lentelė. Ličio jonų baterijų gamybos projektų ekonominę vertę veikiančios rizikos veiksniai

Rizikos lygis	Veiksniai	Poveikis	Rizikos prevencijos priemonės
Žema rizika	Įrangos technologinis senėjimas	Netinkamai išnaudojamas kapitalas Nepalanki padėtis konkurencijos atžvilgiu	Gebėjimas lanksčiai įsigyti ir parduoti įrangą Partnerystė su technologinių inovacijų kūrėjais
	Specialistų trūkumas	Darbo užmokesčio išaugimas Kokybės užtikrinimo spragos	Apmokymų praktikos programos Partnerystė su aukštosiomis mokyklomis
Vidutinė rizika	Degradacijos įverčių neapibrėžtumas	Neužtikrinamas numatytas baterijos kokybiško veikimo laikas	Baterijų būsenų vertinimo tobulinimas Garantijos suteikimas
	Transporto trikdžiai	Eksporto, importo ribojimai Tarifai, mokesčiai	Strategiška patalpų lokacijos atranka Partnerystė su keliais transporto tiekėjais
	Griežtesni aplinkosaugos reglamentai	Baudos už taisyklių nesilaikymą Visuomenės priešiškus	Aplinkosaugos vadyba, auditas Veiklų skaidrumas Visuomenės įtraukimas
Aukšta rizika	Krintanti baterijų kaina	Mažėja pelningumo įvertis Mažesnė paklausa	Vertės pasiūlymas per aukštą kokybę
	Baterijų perdirbimo standartizavimas	Saugumo standartų įvedimas Perdirbimo procesų suvienodinimas	Išardymo, surinkimo procesų standartizavimas Baterijų sandaros standartizavimas
	Tiekimo grandinės trikdžiai	Tarptautinės prekybos ribojimai Konfliktų sukeltas tiekėjų praradimas	Tiekėjų diversifikavimas Tiekimo grandinės sudarymas šalies viduje

Žemai rizikai priskiriami veiksniai, kurių susidarymo tikimybė maža arba poveikis nagrinėjamiems projektams silpnas. Pavyzdžiui, specialistų trūkumo išvengti nesunku kuriant apmokymo programas, todėl veiksnio tikimybė maža. Įrangos technologinis senėjimas skatina inovacijas, tad šio veiksnio poveikis gali būti teigiamas. Tačiau, tam svarbu užtikrinti galimybę įsigyti naujausią įrangą.

Vidutinei rizikai galima priskirti veiksnius, kurių poveikis stipresnis, tačiau jų prevencijai galima pritaikyti efektyvias priemones. Baterijų degradacijos vertinimo tikslumas aktyviai tiriamas ir tobulinamas, todėl įverčių neapibrėžtumas yra laikina problema. Strategiška patalpų lokacijos atranka turėtų būti atliekama dar prieš vykdant projektą, tad transporto trikdžiai yra minimizuojami nuo projekto planavimo pradžios. Galiausiai, siekiant sudaryti griežtėjantiems reglamentams atsparų projektą, veiklų skaidrumas turėtų būti vienas iš tikslų.

Aukštos rizikos veiksniai gali smarkiai paveikti siūlomų projektų ekonominį efektyvumą, o rizikos prevencinės priemonės šiems veiksniams gali būti nepatikimos. Ateinantiems metams numatyta krintanti baterijų kaina tyrime nenagrinėta. Tačiau kainos kitimo poveikis pelningumo įverčiui ir baterijų paklausai gali smarkiai pakeisti daromas išvadas apie projektų ekonominį efektyvumą.

Tyrimo metu baterijų pakartotinio panaudojimo ekonominis efektyvumo įvertis neženkliai aukštesnis už perdirbimo atvejo įvertį. Baterijų perdirbimas vystomas daugiau laiko, todėl

perdirbimo procesų standartizavimas artimesnis, nei apdorojimo pakartotiniam panaudojimui. Standartizavus perdirbimo procesus įrangos bei specialistų apmokymo išlaidos sumažėtų ir perdirbimo atvejis taptų ekonomiškai efektyvesnis. Tuomet gali sumažėti susidomėjimas pakartotiniu panaudojimu ir sulėtėti naujų inovacijų kūrimas, iki kol šis žiedinės ekonomikos sprendimas būtų visiškai apleistas.

Nenuspėjama geopolitinė situacija, sukelta konfliktų, atsiradusių tarifų, gali smarkiai paveikti ar net nutraukti tiekimo grandinę. Todėl būtina diversifikuoti tiekėjus, bei išnaudoti tiekimo galimybes projekto vykdymo šalies viduje.

3.7. Rekomendacijos

Adaptyvaus PMCMC algoritmo universalumas matomas įvertinus dviejų skirtingų realių baterijų būsenas. Modelis geba prisitaikyti ir prie statinio, ir prie dinaminio testo duomenų. Tačiau yra stebimas nevienodas modelio rezultatų neapibrėžtumas. Baterijos EVE LF173 dinaminio testo duomenimis nustatytos $f_{OCV}(SOC)$ parametrinės išraiškos ir SOC įverčio neapibrėžtumas mažas, o SOH įverčio neapibrėžtumas didesnis. Tuo tarpu baterijos EVE LF105 statinio testo duomenimis gautos $f_{OCV}(SOC)$ parametrinės išraiškos ir SOC įverčio neapibrėžtumas ženkliai didesnis, o SOH įverčio neapibrėžtumas mažesnis, lyginant su EVE LF173. Baterijos degradacijai įvertinti galima pasirinkti panaudoti tą būsenos įvertį, kurio neapibrėžtumas mažesnis. Tačiau toks nesutapimas tarp modelio rezultatų kelia poreikį atlikti algoritmo validaciją su daugiau skirtingos rūšies baterijų duomenų, kurie būtų išgauti dinamiško krovimo sąlygomis.

Pilno adaptyvaus PMCMC algoritmo skaičiavimų laikas gali siekti virš 20 valandų, priklausomai nuo duomenų rinkinio dydžio. Skaičiavimus paspartinti galima pritaikius lygiagretųjį programavimą dalelių filtro algoritmui, pasitelkiant tam skirtus specializuotus paketus: LibBi, Birch. Tačiau lygiagreta programavimo galimybės baterijos valdymo sistemos procesoriuje ribotos, todėl reikalinga perkelti skaičiavimus į debesiją.

Ekonominė kaštų ir naudos analizė dėl paprastumo atlikta apibendrintai. Analizėje daromos įvairios prielaidos: baterijų ir jų medžiagų kainos laikomos pastovios tiriamame 5 metų laikotarpyje, naudojami apibendrinti gamybos, perdirbimo ir apdorojimo kaštai, neskaidant į atskiras sąnaudų dedamąsias, pradinių investicijų dydžiai įtraukiami į išlaidas kaip nežinomieji, nėra nagrinėjamos šešėlinės kainos, į kaštus neįtraukiamos kasmet susidaranti įrangos palaikymo, taisymo, keitimo išlaidos. Tikslesnius projektų ekonominio efektyvumo įvertinimus galima gauti atlikus išsamesnę ekonominę analizę, ištiriant darbo rinkos dinamiką, baterijų ir jų medžiagų kainų prognozes, įvertinant infrastruktūros sudarymo, patalpų įrengimo ir prietaisų įsigijimo galimybes piniginių vertėmis. Reikiamus duomenis gali būti paprasčiau surinkti apsiribojus tyrimus atlikti vieno regiono, pavyzdžiui, šalies mastu. Globaliuoju atveju skaičiavimuose naudojami įvairių rodiklių vidurkiai gali sukelti netikslumų.

Kaštų ir naudos analizėje lyginamų alternatyvių projektų ekonominio efektyvumo įverčių neapibrėžtumą galima mažinti nustačius projektų jautrumą rizikos veiksniams. Tokie rizikos veiksniai, kaip baterijų kainų kritimas, darbo rinkos dinamika, aplinkosaugos reglamentų griežtėjimas, naujų tarifų ir prekybos ribojimų atsiradimas, technologinės inovacijos, gali smarkiai paveikti analizės rezultatus. Daromos išvados apie vieno ar kito projekto ekonominį pranašumą gali pasikeisti, atsižvelgus į labiausiai kritinių rizikos veiksnių kintamumą.

Išvados

1. Išanalizavus mokslinę literatūrą, kurioje apibūdinami ličio jonų baterijų būsenų vertinimo modeliai, pastebėta, kad baterijų modeliai gali būti skirstomi pagal modeliuojamų procesų pobūdį. Elektrodo ir elektrolito medžiagų lygmens modeliai apibūdina dalelių judėjimą elektrocheminių procesų metu, tačiau tokie modeliai reikalauja įvertinti daug fizikinių baterijos parametrų. Duomenimis grįsti modeliai apibūdina baterijos celę ekvivalenčia elektros grandine ir nereikalauja detalių žinių apie baterijoje vykstančius procesus – užtenka tik srovės stiprio ir įtampos matavimų laike. Dėl to šie modeliai gali būti naudojami baterijų valdymo sistemose baterijos būsenoms įvertinti ir gali būti pritaikyti degradavimui stebėti.
2. Universaliam ličio jonų baterijų būsenų vertinimui sudarytas adaptyvus Dalelių Markovo grandinės Monte Karlo algoritmas. Kiekvienoje algoritmo iteracijoje dalelių filtras taikomas aproksimuoti baterijos įkrovos būsenos x_t skirstinį, kuris padeda įvertinti analitiškai neapskaičiuojamą tikėtinumo funkciją. Tuomet atliekamas Markovo grandinės Monte Karlo metodo žingsnis modelio parametrų imčiai generuoti. Adaptyvaus algoritmo pirmajame etape padengiama parametrų θ erdvė maksimizuojant naujų kandidačių θ' priėmimo dažnį bei šuolio atstumą. Antrojo ir trečiojo etapų metu parametrų θ grandinė artėja tikslinio aposteriorinio skirstinio, atitinkamai mažinant stebinių y_t skirstinio dispersiją ir didinant duomenų imtį. Tokiu būdu algoritmas geba prisitaikyti prie įvairios sandaros baterijų dinamiškų duomenų.
3. Algoritmo skaičiavimų metu įvertinama priklausomybės tarp atvirosios grandinės įtampos ir įkrovos būsenos funkcijos $f_{OCV}(SOC)$, reikalingos baterijos būsenoms vertinti, parametrinė išraiška. Eksperimentais nustatyta, jog labiausiai $f_{OCV}(SOC)$ kreivę atitinka 13 laipsnio polinomas su dviem logaritmų terminais. Nustatyta, jog Markovo grandinės šuolį reguliuojantis koeficientas $\tau = 0,86$ maksimizuoja parametrų θ erdvės padengimą pirmame adaptyvaus algoritmo etape. Pastebėta, kad dalelių, aproksimuojančių sistemos būsenos x_t skirstinį, skaičius tiesiškai veikia algoritmo skaičiavimų trukmę. Eksperimentiškai nustatyta, kad minimalus dalelių skaičius, reikalingas aproksimuoti būsenų x_t aposteriorinį skirstinį yra 400.
4. Adaptyviu Dalelių Markovo grandinės Monte Karlo algoritmu įvertinus ekvivalenčios grandinės modelio parametrus apskaičiuoti baterijų EVE LF173 ir EVE LF105 įkrovos ir kokybiško veikimo būsenų įverčiai. Baterijos įkrovos būseną gaunama interpoliuojant $f_{OCV}(SOC)$ atvirkštinę funkciją ir kaip argumentą panaudojant atvirosios grandinės įtampą V_{OCV} , gaunamą pagal srovės stiprio I ir išėjimo įtampos V matavimų duomenis bei vidinės varžos R įvertį. Įkrovos būsenos vertinimą pagal naujus baterijos duomenis galima atlikti periodiškai atnaujinant modelio parametrus. EVE LF173 baterijos dinaminio testo duomenimis įvertintas kokybiško veikimo būsenos skirstinys, kurio vidurkis 0,6789, standartinis nuokrypis 0,0458. Nustatyta stipri baterijos degradacija. Baterijos EVE LF105 statinio testo duomenimis nustatytas kokybiško veikimo būsenos skirstinio vidurkis lygus 0,9924, standartinis nuokrypis 0,0135. Ši baterija yra artima naujai pagamintai baterijai.
5. Pagal realius baterijų testų duomenis atliktas būsenų įvertinimas parodo sudaryto modelio gebėjimą universaliai prisitaikyti prie skirtingų baterijų ir duomenų, gautų nevienodomis sąlygomis. Degradacijai įvertinti galima pasirinkti tą būsenos įvertį, kuris pasižymi mažesniu neapibrėžtumu. Tolimesnei adaptyvaus Dalelių Markovo grandinės Monte Karlo algoritmo validacijai yra reikalingi fiziniai eksperimentai ir hiperparametrų derinimas su kitos cheminės sandaros baterijų dinaminiais duomenimis.
6. Baterijų būsenų vertinimo ekonominį poveikį ir vertę galima pagrįsti atlikta kaštų ir naudos analize. Nagrinėti trys ličio jonų baterijų gamybos atvejai ir nustatyta, jog gamyba iš perdirbtų

medžiagų bei baterijų apdorojimas pakartotiniam panaudojimui, vykdomi globaliu mastu, yra ekonomiškai efektyvesni už baterijų gamybą iš naujai išgautų medžiagų, jei pradinės investicijos, būtinos įdiegti reikalingą infrastruktūrą, neviršija atitinkamai 51,51 ir 54,36 mlrd. JAV dolerių. Padarius prielaidą, kad baterijų perdirbimo ir pakartotinio panaudojimo atvejais pradinės investicijos yra lygiavertės, palyginta projektų grynoji vertė dabartyje pagal diskonto normą 0,1. Atlikus kaštų ir naudos analizę 5 metams, pakartotinio panaudojimo projekto grynoji vertė dabartyje 2,85 mlrd. JAV dolerių didesnė už baterijų perdirbimo projekto grynąją vertę dabartyje.

7. Kaštų ir naudos analizėje nagrinėjamų alternatyvių projektų jautrumo įvairiems rizikos veiksniams įvertis gali padėti nustatyti projektų ekonominio efektyvumo neapibrėžtumą. Priklausomai nuo baterijų ir jų medžiagų kainų kitimo, darbo rinkos dinamikos, aplinkosaugos reglamentų, tarifų pokyčių, tarptautinės prekybos ribojimų ir technologijų inovacijų gali pasikeisti atvejų palyginimo išvados. Ekonominės analizės susiaurinimas iš globalaus lygio iki tam tikro regiono lygmens gali padėti patikslinti kainų įverčius bei prognozes ir išvengti nežinomų dedamųjų.

Literatūros sąrašas

1. MANTHIRAM, Arumugam. An Outlook on Lithium Ion Battery Technology. *ACS Cent. Sci.* [interaktyvus]. 2017, 3(10), p. 1063-1069 [žiūrėta 2024-05-31]. Prieiga per: doi: 10.1021/acscentsci.7b00288
2. ZUBI, G., R. DUFO-LOPEZ, M. CARVALHO ir G. PASAOGLU. The lithium-ion battery: State of the art and future perspectives. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* [interaktyvus]. 2018, 89 [žiūrėta 2024-05-31]. Prieiga per: doi: 10.1016/j.rser.2018.03.002
3. MARKETSANDMARKETS. Lithium-ion Battery Materials Market by Battery Chemistry (LFP, LCO, NMC, NCA, LMO), Material (Cathode, Anode, Electrolyte), Application (Portable Device, Electric Vehicle, Industrial), & Region – Global Forecast to 2029 [interaktyvus]. 2024 [žiūrėta 2025-05-18]. Prieiga per internetą: <https://www.marketsandmarkets.com/Market-Reports/lithium-ion-battery-materials-market-23313535.html>
4. MARKETSANDMARKETS. Lithium-ion Battery Market by Type (NMC, LFP, LCO, LTO, LMO, NCA), Capacity (Below 3,000 mAh, 3,001 mAh-10,000 mAh, 10,001 mAh-60,000 mAh, Above 60,000 mAh), Voltage (Below 12V, 12V-36V, Above 36V), Application and Region – Global Forecast to 2033 [interaktyvus]. 2023 [žiūrėta 2024-05-31]. Prieiga per internetą: <https://www.marketsandmarkets.com/Market-Reports/lithium-ion-battery-market-49714593.html>
5. BERRY, Chris. The Paradox of Green Growth: Challenges and Opportunities in Decarbonizing the Lithium-Ion Supply Chain. *Critical Minerals, the Climate Crisis and the Tech Imperium*. Cham: Springer, Cham, 2023. ISBN 978-3-031-25577-9. Prieiga per: doi: 10.1007/978-3-031-25577-9_6
6. UM, J. H., S. KIM, J. HYUN, M. KIM, S. LEE ir S. YU. Real-Time Visualizing Nucleation and Growth of Electrodes for Post-Lithium-Ion Batteries. *Acc. Chem. Res.* [interaktyvus]. 2023, 56, 4, p. 440-451 [žiūrėta 2024-05-31]. Prieiga per: doi: 10.1021/acs.accounts.2c00652
7. HAN, X., L. LU, Y. ZHENG, X. FENG, Z. LI, J. LI ir M. OUYANG. A review on the key issues of the lithium ion battery degradation among the whole life cycle. *eTransportation* [interaktyvus]. 2019, 100005 [žiūrėta 2024-05-31]. Prieiga per: doi: 10.1016/j.etrans.2019.100005
8. RAHMAN, T. ir T. ALHARBI. Exploring Lithium-Ion Battery Degradation: A Concise Review of Critical Factors, Impacts, Data-Driven Degradation Estimation Techniques, and Sustainable Directions for Energy Storage Systems. *Batteries* [interaktyvus]. 2024, 10(7), 220 [žiūrėta 2025-05-27]. Prieiga per: doi: 10.3390/batteries10070220
9. GUO, J., Y. LI, K. PEDERSEN ir D.-I. STROE. Lithium-Ion Battery Operation, Degradation, and Aging Mechanism in Electric Vehicles: An Overview. *Energies* [interaktyvus]. 2021, 14(17), 5220 [žiūrėta 2025-05-27]. Prieiga per: doi: 10.3390/en14175220
10. HONG, J., F. LIANG, J. YANG ir S. DU. An exhaustive review of battery faults and diagnostic techniques for real-world electric vehicle safety. *Journal of Energy Storage* [interaktyvus]. 2024, 99(A), 113234 [žiūrėta 2025-05-27]. Prieiga per: doi: 10.1016/j.est.2024.113234
11. ZHAO, E., P. D. WALKER, N. C. SURAWSKI ir N. S. BENNETT. Assessing the life cycle cumulative energy demand and greenhouse gas emissions of lithium-ion batteries. *Journal of Energy Storage* [interaktyvus]. 2021, 43, 103193 [žiūrėta 2024-05-31]. Prieiga per: doi: 10.1016/j.est.2021.103193

12. THOMPSON, D. L., J. M. HARTLEY, S. M. LAMBERT, M. SHIREF, G. D. J. HARPER ir kt. The importance of design in lithium ion battery recycling – a critical review. *Green Chem.* [interaktyvus]. 2020, 22, 7585 [žiūrėta 2025-05-27]. Prieiga per: doi: 10.1039/d0gc02745f
13. BAUM, Z. J., R. E. BIRD, X. YU ir J. MA. Lithium-Ion Battery Recycling—Overview of Techniques and Trends. *ACS Energy Letters* [interaktyvus]. 2022, 7(2), p. 712-719 [žiūrėta 2025-05-27]. Prieiga per: doi: 10.1021/acsenenergylett.1c02602
14. HU, X., X. DENG, F. WANG, Z. DENG, X. LIN, R. TEODORESCU. A Review of Second-Life Lithium-Ion Batteries for Stationary Energy Storage Applications. *Proceedings of the IEEE* [interaktyvus]. 2022, 110(6), p. 735-753 [žiūrėta 2025-05-27]. Prieiga per: doi: 10.1109/JPROC.2022.3175614
15. JOHN, Alexa St. Automaker needs for EV materials mean battery refurbishment is taking off. Meet 10 outfits poised to cash in on the alternative to battery recycling. *Business Insider* [interaktyvus]. 2022 [žiūrėta 2025-05-27]. Prieiga per internetą: <https://www.businessinsider.com/hot-companies-racing-reuse-refurbishment-electric-vehicle-batteries-2022-8>
16. SHAHJALAL, M., P. K. ROY, T. SHAMS, A. FLY, J. I. CHOWDHURY, M. R. AHMED ir K. LIU. A review on second-life of Li-ion batteries: prospects, challenges, and issues. *Energy* [interaktyvus]. 2022, 241, 122881 [žiūrėta 2025-05-27]. Prieiga per: doi: 10.1016/j.energy.2021.122881
17. HUA, Y., S. ZHOU, Y. HUANG, X. LIU, H. LING, X. ZHOU, C. ZHANG ir S. YANG. Sustainable value chain of retired lithium-ion batteries for electric vehicles. *Journal of Power Sources* [interaktyvus]. 2020, 478, 228753 [žiūrėta 2024-05-31]. Prieiga per: doi: 10.1016/j.jpowsour.2020.228753
18. SHRIVASTAVA, P., P. A. NAIDU, S. SHARMA, B. K. PANIGRAHI ir A. GARG. Review on technological advancement of lithium-ion battery states estimation methods for electric vehicle applications. *Journal of Energy Storage* [interaktyvus]. 2023, 64, 107159 [žiūrėta 2025-05-27]. Prieiga per: doi: 10.1016/j.est.2023.107159
19. LELIE, M., T. BRAUN, M. KNIPS, H. NORDMANN, F. RINGBECK, H. ZAPPEN ir D. U. SAUER. Battery Management System Hardware Concepts: An Overview. *Appl. Sci.* [interaktyvus]. 2018, 8(4), 534 [žiūrėta 2024-05-31]. Prieiga per: doi: 10.3390/app8040534
20. SARTORI, D., G. CATALANO, M. GENCO, C. PANCOTTI, E. SIRTORI, S. VIGNETTI ir C. DEL BO. *Guide to Cost-Benefit Analysis of Investment Projects*. Luxembourg: Publications Office of the European Union, 2015. ISBN 978-92-79-34796-2. Prieiga per: doi: 10.2776/97516
21. SHIVELY, Gerald. *An Overview of Benefit-Cost Analysis* [interaktyvus]. 2012 [žiūrėta 2024-05-31]. Prieiga per internetą: https://www.researchgate.net/publication/255661807_An_Overview_of_Benefit-Cost_Analysis
22. LIU, J., C. HU, A. KIMBER ir Z. WANG. Uses, Cost-Benefit Analysis, and Markets of Energy Storage Systems for Electric Grid Applications. *Journal of Energy Storage*. [interaktyvus]. 2020, 8, 101731 [žiūrėta 2024-05-31]. Prieiga per: doi: 10.1016/j.est.2020.101731
23. GONG, Y., Y. YU, K. HUANG, J. HU ir C. LI. Evaluation of lithium-ion batteries through the simultaneous consideration of environmental, economic and electrochemical performance indicators. *Journal of Cleaner Production*. [interaktyvus]. 2018, 170, p. 915-923 [žiūrėta 2024-05-31]. Prieiga per: doi: 10.1016/j.jclepro.2017.09.189

24. JAFARI, M., K. KHAN, ir L. GAUCHIA. Deterministic models of Li-ion battery aging: It is a matter of scale. *Journal of Energy Storage*. [interaktyvus]. 2018, 20, p. 67-77 [žiūrėta 2025-01-29]. Prieiga per: doi: 10.1016/j.est.2018.09.002
25. VERMEER, W., G. R. C. MOULI ir P. BAUER. A Comprehensive Review on the Characteristics and Modeling of Lithium-Ion Battery Aging. *IEEE Transactions on Transportation Electrification*. [interaktyvus]. 2022, 8, 2, p. 2205-2232 [žiūrėta 2025-01-29]. Prieiga per: doi: 10.1109/TTE.2021.3138357
26. VETTER, J., P. NOVAK, M. R. WAGNER, C. VEIT, K.-C. MOLLER ir kt. Ageing mechanisms in lithium-ion batteries. *Journal of Power Sources*. [interaktyvus]. 2005, 147, 1-2, p. 269-281 [žiūrėta 2025-01-29]. Prieiga per: doi: 10.1016/j.jpowsour.2005.01.006
27. BERLINER, M. D., H. ZHAO, S. DAS, M. FORSUELO, B. JIANG ir kt. Nonlinear Identifiability Analysis of the Porous Electrode Theory Model of Lithium-Ion Batteries. *Journal of The Electrochemical Society*. [interaktyvus]. 2021, 168, 090546 [žiūrėta 2025-01-29]. Prieiga per: doi: 10.1149/1945-7111/ac26b1
28. JOKAR, A., B. RAJABLOO, M. DESILETS ir M. LACROIX. Review of simplified Pseudo-two-Dimensional models of lithium-ion batteries. *Journal of Power Sources*. [interaktyvus]. 2016, 327, p. 44-55 [žiūrėta 2025-01-29]. Prieiga per: doi: 10.1016/j.jpowsour.2016.07.036
29. LAUE, V., F. RODER ir U. KREWER. Practical identifiability of electrochemical P2D models for lithium-ion batteries. *Journal of Applied Electrochemistry*. [interaktyvus]. 2021, 51, p. 1253-1265 [žiūrėta 2025-01-29]. Prieiga per: doi: 10.1007/s10800-021-01579-5
30. LI, J., K. ADEWUYI, N. LOTFI, R. G. LANDERS ir J. PARK. A single particle model with chemical/mechanical degradation physics for lithium ion battery State of Health (SOH) estimation. *Applied Energy*. [interaktyvus]. 2018, 212, p. 1178-1190 [žiūrėta 2025-01-29]. Prieiga per: doi: 10.1016/j.apenergy.2018.01.011
31. ZHOU, J., B. XING ir C. WANG. A review of lithium ion batteries electrochemical models for electric vehicles. *E3S Web of Conferences*. [interaktyvus]. 2020, 185, 04001 [žiūrėta 2025-01-29]. Prieiga per: doi: 10.1051/e3sconf/202018504001
32. TIAN, J., Y. WANG ir Z. CHEN. An improved single particle model for lithium-ion batteries based on main stress factor compensation. *Journal of Cleaner Production* [interaktyvus]. 2021, 278, 123456 [žiūrėta 2025-01-29]. Prieiga per: doi: 10.1016/j.jclepro.2020.123456
33. HUANG, K., Y. WANG ir J. FENG. Research on equivalent circuit Model of Lithium-ion battery for electric vehicles. *2020 3rd World Conference on Mechanical Engineering and Intelligent Manufacturing (WCMEIM)* [interaktyvus]. 2020, p. 492-496 [žiūrėta 2025-05-27]. Prieiga per: doi: 10.1109/WCMEIM52463.2020.00109
34. YANG, N., Y. FU, H. YUE, J. ZHENG, X. ZHANG ir kt. An improved semi-empirical model for thermal analysis of lithium-ion batteries. *Electrochimica Acta*. [interaktyvus]. 2019, 311, p. 8-20 [žiūrėta 2025-01-29]. Prieiga per: doi: 10.1016/j.electacta.2019.04.129
35. ZHENG, Y., Y. CUI, X. HAN ir M. OUYANG. A capacity prediction framework for lithium-ion batteries using fusion prediction of empirical model and data-driven method. *Energy*. [interaktyvus]. 2021, 237, 121556 [žiūrėta 2025-01-29]. Prieiga per: doi: 10.1016/j.energy.2021.121556
36. LEBEL, F.-A., S. WILKE, B. SCHWEITZER, M.-A. ROUX, S. AL-HALLAJ ir J. P. F. TROVAO. A Lithium-Ion Battery Electro-Thermal Model of Parallelized Cells. *2016 IEEE*

- 84th Vehicular Technology Conference (VTC-Fall). [interaktyvus]. 2016, 84, p. 1-6 [žiūrėta 2025-01-29]. Prieiga per: doi: 10.1109/VTCFall.2016.7880858
37. DONG, G., W. HAN ir Y. WANG. Dynamic Bayesian Network-Based Lithium-Ion Battery Health Prognosis for Electric Vehicles. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*. [interaktyvus]. 2021, 68, p. 10949-10958 [žiūrėta 2025-01-29]. Prieiga per: doi: 10.1109/TIE.2020.3034855
 38. TANG, X., C. ZHOU, K. YAO, J. LU, Y. XIA ir F. GAO. Aging trajectory prediction for lithium-ion batteries via model migration and Bayesian Monte Carlo method. *Applied Energy*. [interaktyvus]. 2019, 254, 113591 [žiūrėta 2025-01-29]. Prieiga per: doi: 10.1016/j.apenergy.2019.113591
 39. KIM, S., S. KIM, Y. Y. CHOI ir J. CHOI. Uses, Bayesian parameter identification in electrochemical model for lithium-ion batteries. *Journal of Energy Storage*. [interaktyvus]. 2023, 71, 108129 [žiūrėta 2025-01-29]. Prieiga per: doi: 10.1016/j.est.2023.108129
 40. ADACHI, M., T. KUHN, B. HORSTMAN, A. LATZ, M. A. OSBORNE ir D. A. HOWEY. Bayesian Model Selection of Lithium-Ion Battery Models via Bayesian Quadrature. *IFAC-PapersOnLine*. [interaktyvus]. 2023, 56, 2, p. 10521-10526 [žiūrėta 2025-01-29]. Prieiga per: doi: 10.1016/j.ifacol.2023.10.1073
 41. ZHANG, X., Q. MIAO ir Z. LIU. Remaining useful life prediction of lithium-ion battery using an improved UPF method based on MCMC. *Microelectronics Reliability*. [interaktyvus]. 2017, 75, p. 288-295 [žiūrėta 2025-01-29]. Prieiga per: doi: 10.1016/j.microrel.2017.02.012
 42. FEARNHEAD, P. ir L. MELIGKOTSIDOU. Augmentation schemes for particle MCMC. *Statistics and Computing*. [interaktyvus]. 2015, 26, p. 1293-1306 [žiūrėta 2025-01-29]. Prieiga per: doi: 10.1007/s11222-015-9603-4
 43. MINGAS, G., L. BOTTOLO ir C.-S. BOUGANIS. Particle MCMC algorithms and architectures for accelerating inference in state-space models. *International Journal of Approximate Reasoning*. [interaktyvus]. 2017, 83, p. 413-433 [žiūrėta 2025-01-29]. Prieiga per: doi: 10.1016/j.ijar.2016.10.011
 44. SADDEN, Euan. New global battery energy storage systems capacity doubles in 2023, IEA says. *S&P Global* [interaktyvus]. 2024 [žiūrėta 2025-01-29]. Prieiga per internetą: <https://www.spglobal.com/commodity-insights/en/news-research/latest-news/metals/042524-new-global-battery-energy-storage-systems-capacity-doubles-in-2023-ia-says>
 45. MARKETSANDMARKETS. Second-life Battery Market by Battery Type (Lithium-ion Battery, Lead Acid Battery), Application (Stationary (Power & Energy Storage), Motive), and Region (North America, Europe, Asia Pacific, and Rest of the World) - Global Forecast to 2030 [interaktyvus]. 2025 [žiūrėta 2025-05-27]. Prieiga per internetą: <https://www.marketsandmarkets.com/Market-Reports/second-life-battery-market-247281850.html>
 46. BHUTADA, Govind. The Key Minerals in an EV Battery. *Elements by Visual Capitalist*. [interaktyvus]. 2022 [žiūrėta 2025-05-27]. Prieiga per internetą: <https://elements.visualcapitalist.com/the-key-minerals-in-an-ev-battery/>
 47. ARULAMPALAM, M. S., S. MASKELL, N. GORDON ir T. CLAPP. A tutorial on particle filters for online nonlinear/non-Gaussian Bayesian tracking. *IEEE Transactions on Signal Processing*, [interaktyvus]. 2002, 50, 2, p. 174-188 [žiūrėta 2025-05-11]. Prieiga per: doi: 10.1109/78.978374

48. ALMAHRI, R ir H. AN. Evaluating economic and environmental viability of recycling lithium-ion battery for electric vehicles in the middle east: a case study in the UAE. *Humanities and Social Sciences Communications*, [interaktyvus]. 2025, 15, 508 [žiūrėta 2025-05-11]. Prieiga per: doi: 10.1057/s41599-025-04629-x
49. BOBBA, S., F. MATHIEUX, F. ARDENTE, G. A. BLENGINI, M. A. CUSENZA, A. PODIAS ir A. PFRANG. Life Cycle Assessment of repurposed electric vehicle batteries: an adapted method based on modelling energy flows. *Journal of Energy Storage*, [interaktyvus]. 2018, 19, p. 213-225 [žiūrėta 2025-05-11]. Prieiga per: doi: 10.1016/j.est.2018.07.008
50. KHAN, F. M. N. U., M. G. RASUL, A. S. M. SAYEM ir N. MANDAL. Maximizing energy density of lithium-ion batteries for electric vehicles: A critical review. *Energy Reports*, [interaktyvus]. 2023, 9(11), p. 11-21 [žiūrėta 2025-05-11]. Prieiga per: doi: 10.1016/j.egy.2023.08.069
51. LIU, Y., R. ZHANG, J. WANG ir Y. WANG. Current and future lithium-ion battery manufacturing. *iScience Perspective*, [interaktyvus]. 2021, 24(4), 102332 [žiūrėta 2025-05-11]. Prieiga per: doi: 10.1016/j.isci.2021.102332
52. MURRAY, Cameron. Lithium-ion battery pack prices fall 20% in 2024 amidst 'fight for market share'. *Energy Storage News*, [interaktyvus]. 2024 [žiūrėta 2025-05-11]. Prieiga per internetą: <https://www.energy-storage.news/lithium-ion-battery-pack-prices-fall-20-in-2024-amidst-fight-for-market-share/>
53. CURRAN, Patrick. The Economics Around Lithium-Ion Battery Recycling Are Strong and Growing. *GLG*, [interaktyvus]. 2021 [žiūrėta 2025-05-11]. Prieiga per internetą: <https://glginsights.com/articles/the-economics-around-lithium-ion-battery-recycling-are-strong-and-growing/>
54. HARTY, Julia. Six key trends in the battery recycling market. *Fastmarkets*, [interaktyvus]. 2023 [žiūrėta 2025-05-11]. Prieiga per internetą: <https://www.fastmarkets.com/insights/six-key-trends-battery-recycling-market/>
55. L., Jennifer. Carbon Credits in 2024: What to Expect in 2025 and Beyond (\$250B by 2050). *CarbonCredits.com*, [interaktyvus]. 2025 [žiūrėta 2025-05-11]. Prieiga per internetą: <https://carboncredits.com/carbon-credits-in-2024-what-to-expect-in-2025-and-beyond-250b-by-2050/>
56. THUNDER SAID ENERGY. Global electricity prices vs. CO2 intensities? [interaktyvus]. 2025 [žiūrėta 2025-05-11]. Prieiga per internetą: <https://thundersaidenergy.com/downloads/global-electricity-prices-vs-co2-intensities/>
57. ANTHONY. Second Life Batteries. *Engineering Cheat Sheet*, [interaktyvus]. 2024 [žiūrėta 2025-05-11]. Prieiga per internetą: <https://engineeringcheatsheet.com/second-life-batteries/>

Priedai

1 priedas. Su baigiamuoju projektu susijusi mokslinė veikla

1. Nuo 2024 m. spalio 1 d. iki 2025 m. balandžio 30 d. dalyvauta Lietuvos mokslo tarybos projekte *Studentų tyrimai semestrų metu, vykdytas tyrimas „Būsenų erdvės modelio parametrų vertinimas derinant dalelių filtracijos ir MCMC metodus“*.
2. Skaitytas pranešimas 2025 m. gegužės 21 d. tema „*Equivalent Circuit Models for Lithium-ion Battery Cell Aging Estimation: Review and Developments*“ tarptautinėje konferencijoje *21st International Conference of Young Scientists on Energy and Natural Sciences Issues (CYSENI 2025)* Kaunas, Lietuva, geg. 20-22, 2025. Pranešimo santrauka:

Equivalent Circuit Models for Lithium-ion Battery Cell Aging Estimation: Review and Developments

E. Juozapaitis¹, T. Iešmantas¹, R. Alzbutas^{1,2}

¹ *Kaunas University of Technology, Faculty of Mathematics and Natural Sciences
Studentu Str. 50, LT-51368, Kaunas, Lithuania*

Email: edvinas.juozapaitis@ktu.edu

² *Lithuanian Energy Institute, Breslaujos Str. 3, LT-44403, Kaunas, Lithuania*

Abstract

Lithium-ion batteries are widespread in home appliances, portable electronics and electric vehicles. The high energy density boasted by lithium-ion batteries allows them to be compact, while also effective for energy storage. The long-life cycling of these batteries makes them appealing not only for commercial electronics, but also for use in grid energy storage. However, the aging process of a lithium-ion battery, described by the degradation of energy storage capacity and output current, inhibits long-term usage of these batteries and poses safety risks for the consumer.

Real-time monitoring of key battery quality indicators such as the state of charge (SOC) and state of health (SOH) is essential for optimizing the remaining useful life and determining the end-of-life of a battery, which in turn decreases resource consumption for replacement manufacturing. Various models, simulating the working processes within a battery, have been proposed in scientific literature over several decades with the goal of estimating the quality of the battery and predicting its remaining lifespan. These models range from material level electrochemical process simulations to entire battery module aging approximations using readings of individual cells.

This study focuses on equivalent circuit models (ECM) which are used to model lithium-ion batteries at the cell level utilizing time-dependent measures of current, voltage and impedance. These models are characterized by relatively simple mathematical expressions and realization, which allows for implementation within battery management systems (BMS) for real-time diagnostics. The review covers ECMs, their strengths and weaknesses, as well as improvements proposed in the literature. Findings show that ECMs are highly accurate and are widely used in online SOC estimation due to simple calculations. However, these models require large amounts of data to train. Often, accelerated aging data is used to train ECMs, but this proves detrimental to model accuracy when real testing data is used. Finally, cell level models such as the ECM tend to generalize the factors influencing the aging process: some degradation at the material level is left unexplained.

The study concludes with an introduction of a novel ECM application with state-space Bayesian parameter estimation. The relationship between SOC and open circuit voltage (OCV) is fitted to a curve, which changes as the battery ages and is therefore useful to estimate for diagnostics. Initial parameter identification and subsequent updating with aging battery data is performed using a combination of Markov Chain Monte Carlo and particle filter methods. The approach is compatible with dynamic battery data and therefore is useful for monitoring the health of a battery in commercial use. Model implementation within a BMS is challenging due to required computational resources, however, calculation acceleration and distributed computing opportunities are discussed.

This research was funded by the Research Council of Lithuania using student research project No. S-ST-24-115 funds.

3. *Skaitytas pranešimas 2025 m. gegužės 22 d. tema „Dalelių filtracijos ir MCMC metodų pritaikymas būsenų erdvės modelio parametrams vertinti“ Lietuvos mokslo tarybos organizuotoje projekto Studentų tyrimai semestrų metu baigiamoje konferencijoje „Naujoji karta su LMT“, Vilnius, Lietuva, geg. 22, 2025. Pranešimo santrauka:*

Dalelių filtracijos ir MCMC metodų pritaikymas būsenų erdvės modelio parametrams vertinti

E. Juozapaitis¹, R. Alzbutas^{1,2}

¹ *Kauno technologijos universitetas*

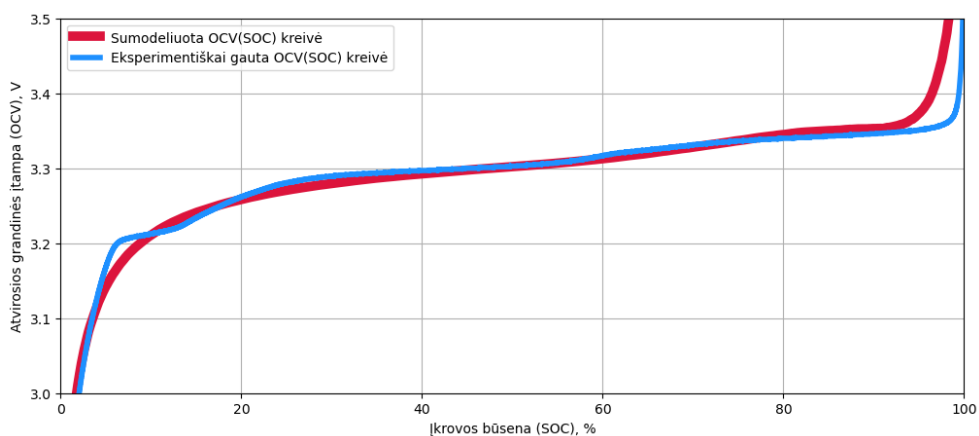
² *Lietuvos energetikos institutas*

Būsenų erdvės modeliai plačiai taikomi inžinerijos, robotikos, ekologijos, finansų ir kitose srityse. Būsenų erdvės modeliai apibendrina kitus laiko eilutės ar dinaminės sistemoms tirti skirtus tiesinius ir netiesinius modelius [1, 2] ir padeda efektyviai stebėti ir prognozuoti nuo laiko priklausomus duomenis [3]. Būsenų erdvės modelį apibrėžia nestebimas stochastinis procesas – sistemos būsena x_t , kuri dažniausiai nusako tyrėją dominančią sistemos dinamiką, ir stebiniai y_t , gaunami tam tikrais išmatavimais. Siekiant modeliuoti sistemos dinamiką, reikalingas efektyvus metodas būsenos ir modelio parametru θ įvertinimui panaudojant turimus stebinius.

Būsenų erdvės modelio parametru įvertinimo būdai aktyviai nagrinėjami literatūroje. Priklausomai nuo modelio specifikacijos, parametru θ identifikavimo problema sprendžiama įvairiai. Tiesiniams Gauso tipo modeliams taikomas Kalmano filtras [4], o netiesiniams – tikėtinumo maksimizavimas [5, 6], matricių faktorizavimas [7] ir kiti. Bajeso metodai, kaip dalelių filtras, yra populiarūs parametru θ įvertinimo uždaviniui spręsti, nes suteikia galimybę įvertinti ne tik parametrus, bet ir jų neapibrėžtumą išreiškiant per skirstinius bei juos atnaujinant surinkus naujų duomenų. Tačiau, taikant dalelių filtrą gaunami mažiau tikslūs rezultatai esant ilgesnio laiko duomenimis – būsenos skirstinio aproksimacija suprastėja dėl pakartotinio dalelių perrinkimo [8]. Markovo grandinės Monte Karlo (MCMC) metodas – kitas dažnai taikomas apytikslio skaičiavimo Bajeso metodas parametru θ skirstinių aproksimavimui, efektyvus paprastesniems – tiesiniams Gauso tipo arba baigtinės būsenų erdvės modeliams. Kitu atveju, siūlomųjų skirstinių sudarymas sudėtingas [8]. Šių metodų junginys – Dalelių MCMC (angl. *Particle Markov Chain Monte Carlo*, PMCMC) – išsprendžia metodų apribojimus ir sujungia privalumus. Kiekvienoje MCMC iteracijoje vykdomas dalelių filtras sugeneruoja būsenų x_t kandidačių rinkinį, o MCMC iteracija atlieka parametru θ atnaujinimą.

Projekto metu sudaromas ir tiriamas būsenų erdvės modelis, apibūdinantis ličio jonų baterijos įkrovos būseną (angl. *State of Charge*, SOC). Baterijos duomenys, srovės stipris ir įtampa, išmatuoti iškrovimo bei įkrovimo metu, yra stebiniai, kuriais naudojantis apmokomas modelis taikant PMCMC algoritmą. Sąryšis tarp baterijos įkrovos būsenos ir atvirosios grandinės įtampos (angl. *Open Circuit Voltage*, OCV) yra svarbi charakteristika, reikalinga kokybiško veikimo būsenai (angl. *State of Health*, SOH) bei likusiam baterijos kokybiško veikimo laikui (angl. *Remaining Useful Life*, RUL) įvertinti. OCV priklausomybės nuo SOC parametrinė išraiška įtraukiama į būsenų erdvės modelį – tokiu būdu atliekamas parametrų skirstinių įvertinimas.

Sudaryto modelio validacija atliekama panaudojant realius ličio jonų baterijų duomenis, gautus iš baterijų valdymo sistemas kuriančios UAB EMUS. Panaudojant statinių testų ir dinaminių testų duomenis (panašesnius į praktinius baterijų vartojimo atvejus) gauta OCV priklausomybė nuo SOC vaizduojanti kreivė. Ši sumodeliuota kreivė lyginama su kreive, gauta atliekant fizinius eksperimentus su išardyta baterija.



1 pav. OCV priklausomybės nuo SOC kreivė, gauta PMCMC metodu (raudona) ir eksperimentiškai (mėlyna).

Duomenimis grįstu modeliu gauta OCV priklausomybės nuo SOC kreivė atitinka eksperimentiškai gautą priklausomybę 10–90% įkrovos būsenos intervale, kuriame operatyvios baterijos įkrova laikosi didžiąją dalį veikimo laiko. Tačiau, PMCMC algoritmo praktinis taikymas baterijų valdymo sistemose yra sudėtingas: esant ribotiems skaičiavimo resursams svarbu atsižvelgti ne tik į skaičiavimų tikslumą, bet ir į spartą. Būsenų erdvės modelis, įtraukiantis papildomą varžos komponentę(-es) į nestebimąjį procesą, ar aukštos eilės polinomas, apibrėžiantis OCV ir SOC sąryšį, gali padėti tiksliau apibūdinti sistemos dinamiką ir sumažinti rezultatų neapibrėžtumą, bet reikalingi papildomi skaičiavimo resursai gali nusverti tikslumo padidėjimo privalumą.

Projekto metu atliekamas modelio tikslumui ir skaičiavimų spartai įtaką darančių veiksnių tyrimas. Nagrinėjamas balansas tarp skaičiavimų spartos ir rezultatų tikslumo, keičiant Dalelių MCMC modelio tokius hiperparametrus, kaip dalelių bei iteracijų skaičių, ir priklausomybės tarp OCV ir SOC parametrų skaičių. Taip pat tiriamas parametrų skirstinių konvergavimas pradedant nuo skirtingų apriorinių skirstinių, ir tikrinamas reikalingas informacijos kiekis duomenyse. Galiausiai, atliekamas skaičiavimo procesų tyrimas, nustatant ilgiausiai truncančius algoritmo žingsnius ir apžvelgiamos skaičiavimų išlygiagretinimo galimybės.

Padėka

Autoriai dėkoja UAB EMUS už suteiktus baterijų statinių ir dinaminių testų duomenis bei eksperimentinių tyrimų rezultatus. Tyrimas finansuotas Lietuvos mokslo tarybos (LMT) Studentų tyrimai semestrų metu projekto Nr. S-ST-24-115 lėšomis.

Literatūra

- [1] Frigola, R., Lindsten, F., Schön, T. B., Rasmussen, C. E. Bayesian Inference and Learning in Gaussian Process State-Space Models with Particle MCMC. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2013, 26, p. 3156-3164.
- [2] Frigola, R., Chen, Y., Rasmussen, C. E. Variational Gaussian Process State-Space Models. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2014, 28(2), p. 3680-3688.
- [3] Eleftheriadis, S., Nicholson, T. F.W., Deisenroth, M. P., Hensman, J. Identification of Gaussian process state space models. *Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems*, 2017, 31, p. 5315-5325.
- [4] Chopin, N., Papaspiliopoulos, O. *An Introduction to Sequential Monte Carlo*. Springer Nature Switzerland. 2020. 378 p.
- [5] Schön, T. B., Wills, A., Ninness, B. System identification of nonlinear state-space models. *Automatica*, 2011, 47(1), p. 39-49.
- [6] Gu, Y., Liu, J., Li, X., Chou, Y., Ji, Y. State space model identification of multirate processes with time-delay using the expectation maximization. *Journal of the Franklin Institute*, 2019, 356(3), p. 1623-1639.
- [7] Yu, C., Ljung, L., Verhaegen, M. Identification of structured state-space models. *Automatica*, 2018, 90, p. 54-61.
- [8] Andrieu, C., Doucet, A., Holenstein, R. Particle Markov Chain Monte Carlo Methods. *Journal of the Royal Statistical Society Series B: Statistical Methodology*, 2010, 72(3), p. 269-342.

2 priedas. Adaptyvaus Dalelių Markovo grandinės Monte Karlo algoritmo realizacijos Python kodo fragmentas

```
# Importuojami reikalingi paketai
import pandas as pd
import numpy as np
import particles
from particles import distributions as dists
from particles import state_space_models as ssm
from particles.collectors import Moments
from particles import mcmc
import matplotlib.pyplot as plt

# Nuskaitomi baterijos testo duomenys
bat = pd.read_csv('EVELF173_dynamic.csv')
T1=np.arange(0,bat.shape[0],1)/2
u_exogenous=-np.array(bat['Current'])
data=np.array(bat['Voltage'])

# Duomenų imties sudarymas žingsniu kas 1000-i
idx=np.arange(0,160000,1000)
T1=T1[idx]
u_exogenous=u_exogenous[idx]
data=data[idx]
dt1=np.diff(T1)
dt1=np.append(dt1,dt1[-1])
dt_exogenous=dt1

# Apibrėžiamas ekvivalenčios grandinės būsenų erdvės modelis
class ECM(ssm.StateSpaceModel):
    def __init__(self,
                 a1=0,a2=0,a3=0,a4=0,a5=0,a6=0,a7=0,a8=0,
                 a9=0,a10=0,a11=0,a12=0,a13=0,a14=0,a15=0,a16=0,
                 sigma=0,C=1.0,R=0,u=0,dt=1.0):
        self.a1 = a1
        self.a2 = a2
        self.a3 = a3
        self.a4 = a4
        self.a5 = a5
        self.a6 = a6
        self.a7 = a7
        self.a8 = a8
        self.a9 = a9
        self.a10 = a10
        self.a11 = a11
        self.a12 = a12
        self.a13 = a13
        self.a14 = a14
        self.a15 = a15
        self.a16 = a16
        self.sigma=sigma
        self.C=C
        self.R=R
        self.u = u_exogenous
        self.dt=dt_exogenous
    def PX0(self): # Distribution of X_0
        return dists.Normal(loc=0.99,scale=0.01)
    def PX(self, t, xp): # Distribution of X_t given X_{t-1}=xp (p=past)
        return dists.Normal(loc=xp[:] - self.dt[t]/(self.C*3600)*self.u[t],scale=self.sigma)
    def PY(self, t, xp, x): # Distribution of Y_t given X_t=x (and possibly X_{t-1}=xp)
        x[x[:]<0]=0
        x[x[:]>1]=1

        soc=self.a1+self.a2*np.log(x[:]+0.00001)+self.a3*np.log(1-x[:]+0.00001)+\
        self.a4*x[:]+self.a5*x[:]**2+self.a6*x[:]**3+self.a7*x[:]**4+self.a8*x[:]**5+\
        self.a9*x[:]**6+self.a10*x[:]**7+self.a11*x[:]**8+self.a12*x[:]**9+\
        +self.a13*x[:]**10+self.a14*x[:]**11+self.a15*x[:]**12+self.a16*x[:]**13

        return dists.Normal(loc=soc-self.R*self.u[t],scale=40)
```

```

# Pasirenkami aprioriniai parametru skirstiniai
prior_dict = {
    'a1': dists.Normal(loc=0,scale=10),
    'a2': dists.Normal(loc=0,scale=10),
    'a3': dists.Normal(loc=0,scale=10),
    'a4': dists.Normal(loc=0,scale=10),
    'a5': dists.Normal(loc=0,scale=10),
    'a6': dists.Normal(loc=0,scale=10),
    'a7': dists.Normal(loc=0,scale=10),
    'a8': dists.Normal(loc=0,scale=10),
    'a9': dists.Normal(loc=0,scale=10),
    'a10': dists.Normal(loc=0,scale=10),
    'a11': dists.Normal(loc=0,scale=10),
    'a12': dists.Normal(loc=0,scale=10),
    'a13': dists.Normal(loc=0,scale=10),
    'a14': dists.Normal(loc=0,scale=10),
    'a15': dists.Normal(loc=0,scale=10),
    'a16': dists.Normal(loc=0,scale=10),

    'sigma': dists.TruncNormal(mu=0, sigma=1, a=0., b=10.),
    'C': dists.TruncNormal(mu=100, sigma=50, a=0., b=1000.),
    'R': dists.TruncNormal(mu=0, sigma=1, a=0., b=10.)
}
my_prior = dists.StructDist(prior_dict)
theta0 = my_prior.rvs(size=1)

# Vykdomas 1-asis adaptyvaus algoritmo etapas
my_pmmh = mcmc.PMMH(ssm_cls=ECM, prior=my_prior, data=data, Nx=400,
                    niter=100000, verbose=10, adaptive=True, theta0=theta0,
                    scale=0.86, rw_cov=0.86 ** 2 * np.eye(19))
my_pmmh.smc_options = {'collect': 'off', 'ESSrmin':0.01, 'resampling':'stratified' }
my_pmmh.run();

# Vykdomi 2-asis ir 3-asis algoritmo etapai
data_step=[1000,1000,1000,1000,1000,1000,1000,1000,500,200,100,50,20]
y_sigma=[20,10,2,1,0.8,0.5,0.3,0.2,0.2,0.2,0.2,0.2,0.2]
for k in range(0,13):

    bat = pd.read_csv('EVELF173_dynamic.csv')
    T1=np.arange(0,bat.shape[0],1)/2
    u_exogenous=-np.array(bat['Current'])
    data=np.array(bat['Voltage'])

    idx=np.arange(0,160000,data_step[k])
    T1=T1[idx]
    u_exogenous=u_exogenous[idx]
    data=data[idx]
    dt1=np.diff(T1)
    dt1=np.append(dt1,dt1[-1])
    dt_exogenous=dt1

    class ECM(ssm.StateSpaceModel):
        def __init__(self,
                    a1=0,a2=0,a3=0,a4=0,a5=0,a6=0,a7=0,a8=0,
                    a9=0,a10=0,a11=0,a12=0,a13=0,a14=0,a15=0,a16=0,
                    sigma=0,C=1.0,R=0,u=0,dt=1.0):
            self.a1 = a1
            self.a2 = a2
            self.a3 = a3
            self.a4 = a4
            self.a5 = a5
            self.a6 = a6
            self.a7 = a7
            self.a8 = a8
            self.a9 = a9
            self.a10 = a10
            self.a11 = a11
            self.a12 = a12

```

```

        self.a13 = a13
        self.a14 = a14
        self.a15 = a15
        self.a16 = a16
        self.sigma=sigma
        self.C=C
        self.R=R
        self.u = u_exogenous
        self.dt=dt_exogenous
    def PX0(self): # Distribution of X_0
        return dists.Normal(loc=0.99,scale=0.01)
    def PX(self, t, xp): # Distribution of X_t given X_{t-1}=xp (p=past)
        return dists.Normal(loc=xp[:]-self.dt[t]/(self.C*3600)*self.u[t],scale=self.sigma)
    def PY(self, t, xp, x): # Distribution of Y_t given X_t=x (and possibly X_{t-1}=xp)
        x[x[:]<0]=0
        x[x[:]>1]=1

        soc=self.a1+self.a2*np.log(x[:]+0.00001)+self.a3*np.log(1-x[:]+0.00001)+\
        self.a4*x[:]+self.a5*x[:]**2+self.a6*x[:]**3+self.a7*x[:]**4+self.a8*x[:]**5+\
        self.a9*x[:]**6+self.a10*x[:]**7+self.a11*x[:]**8+self.a12*x[:]**9+\
        +self.a13*x[:]**10+self.a14*x[:]**11+self.a15*x[:]**12+self.a16*x[:]**13

        return dists.Normal(loc=soc-self.R*self.u[t],scale=y_sigma[k])

    if k == 0:
        interval = 100000-1
    else:
        interval = 20000-1

    my_pmmh.prior=my_prior
    my_pmmh.theta0=my_pmmh.chain.theta[[interval]]
    my_pmmh.ssm_cls=ECM
    my_pmmh.data=data
    my_pmmh.niter=20000
    my_pmmh.verbose=5
    my_pmmh.Nx=400
    my_pmmh.scale=0.5

    my_pmmh.smc_options = {'collect': 'off','ESSrmin':0.5,'resampling':'stratified' }
    my_pmmh.run();

# Apskaičiuojamas f_OCV(SOC) parametrinės išraiškos vidurkis
soc=np.arange(0,1.001,0.001)
start=1000
stop=20000
for i in range(1, 17):
    exec(f'a{i} = np.mean(my_pmmh.chain.theta["a{i}"][start:stop])')

OCV_mean=a1+a2*np.log(soc+0.0000001)+a3*np.log(1-soc+0.0000001)+a4*soc+a5*soc**2+a6*soc**3\
+a7*soc**4+a8*soc**5+a9*soc**6+a10*soc**7+a11*soc**8+a12*soc**9\
+a13*soc**10+a14*soc**11+a15*soc**12+a16*soc**13

# Grafiškai pavaizduojama f_OCV(SOC) vidurkio kreivė, palyginama su eksperimentiškai gauta kreive
exp_curve = pd.read_csv('EVELF173_expCurve.csv')
fig, ax = plt.subplots()
ax.plot(soc[1:],OCV_mean[1:],color='crimson',linewidth=7)
ax.plot(exp_curve.SOC,exp_curve.OCV,linewidth=3,c='dodgerblue')
ax.legend(['f_OCV skirstinio įverčio vidurkis',
          'Eksperimentiškai gauta kreivė'])
plt.xlabel('Įkrovos būseną (SOC)')
plt.ylabel('Atvirosios grandinės įtampa (OCV), V')
plt.ylim(2.9,3.6)
plt.grid()

```