

Zustandsbestimmung von Lithium-Ionen-Zellen durch maschinelle Lernmethoden

Sebastian Martin Pohlmann, M. Sc.

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Elektrische Energiesysteme und Informationstechnik der Universität der Bundeswehr München zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)

angenommenen Dissertation.

Gutachterin/Gutachter:

1. Prof. Dr. rer. nat. Antje Neve
2. Prof. Dr.-Ing. Thomas Weyh

Die Dissertation wurde am 05.11.2025 bei der Universität der Bundeswehr München eingereicht und durch die Fakultät für Elektrische Energiesysteme und Informationstechnik am 18.02.2026 angenommen. Die mündliche Prüfung fand am 16.03.2026 statt.

Danksagung

Die Dissertation ist während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Intelligente Verteilte Systeme an der Universität der Bundeswehr München entstanden. Ich bin dankbar für die Möglichkeit, meine Forschungen in einem Umfeld, das von höchster Professionalität, Zielstrebigkeit, aber auch von großer Freiheit in Forschung und Bildung geprägt war, durchzuführen zu dürfen.

Zuerst möchte ich mich bei Prof. Dr. Antje Neve bedanken für die hervorragende Betreuung, das wertvolle Feedback und die Unterstützung während meiner gesamten Zeit am Institut. Als nächstes möchte ich mich bei Prof. Dr. Thomas Weyh bedanken für seine Betreuung und die Forschungsmöglichkeiten, die er am Institut für Elektrische Energieversorgung geschaffen hat.

Besonderer Dank gilt auch Dr. Manuel Kuder, der die große Leidenschaft für die Forschung vorlebt und maßgeblich daran beteiligt war, dass das Team am Institut so existiert. Danke an meine Kollegen Johannes, Julian, Tobias, Wolfgang, Wolfgang, Nina, Farhad und besonders Andreas und Dominic für die Hilfe, die Motivation und den gemeinsamen Weg durch die Promotion.

Meinen Eltern, Dorothea und Andreas, danke ich aus tiefstem Herzen für ihre bedingungslose Unterstützung, den Rückhalt und die Hilfe. Vielen Dank an meine Schwester Kathrin für die unzähligen Korrekturschleifen bei Veröffentlichungen und der Dissertation. Zuletzt danke ich meinen Freunden für die Ablenkung, den gemeinsamen Sport und die schönen Momente in stressigen Zeiten.

München, Oktober 2025

Sebastian Pohlmann

„Wir sollten nichts im Leben fürchten,
aber alles verstehen.“

– Marie Curie

Abstract

Lithium-Ion-Batteries are the key technology for the electrification of the mobility industry and the transition to a sustainable transportation sector. Because of their high energy and power density in combination with a long cycle life, they have taken on a dominant role in the field of electrochemical energy storage systems. In order to optimize the operation of the batteries and to ensure safe and efficient charge and discharge cycles, it is, however, crucial to determine the condition of the battery at all times. While battery parameters as voltage, current, and temperature are measurable, conditions like the state-of-charge or the state-of-health are not directly measurable. This work presents new condition determination techniques for lithium-ion-batteries based on machine learning algorithms. For the development of all models, the whole process from data selection, over data preprocessing to model evaluation is taken into account. At first, the determination of the state-of-charge is optimized by means of artificial neural networks and by creating artificial data points for a robust model training. The lowest mean absolute error for the test dataset could be obtained with a value of 0,44% based on a convolutional neural network. For the estimation of the state-of-health, a single model, in this case a gaussian process regression, for three different types of lithium-ion-batteries is developed. The mean absolute error for the testing dataset is 1,33%. Both models, for the state-of-charge and for the state-of-health estimation, aim to find a function to determine the condition based on the battery parameters voltage, current, and temperature. Lastly, the change of the impedance over the cycle life of batteries is analyzed. The aging experiments result in over 25000 impedance spectra over the degradation of lithium-ion-batteries. The state-of-charge with the highest correlation between capacity and impedance is identified at a state-of-charge of 10%. After selecting the impedance at different measurement frequencies based on their correlation to the capacity, a support vector regression model is trained with the impedance values to estimate the state-of-health. The model shows a mean absolute error of 0,86% and validates the correlation results. In comparison to the other model for the state-of-health estimation, the impedance is used instead of the battery parameters voltage, current, and temperature. The proposed approaches demonstrate the high potential of data-driven models to estimate the condition of a battery and can significantly improve the condition monitoring of the battery management system. This is crucial for further advancements for stationary and mobile applications, and therefore for the overall move to a sustainable mobility and efficient energy storage solutions in the future.

Keywords: Lithium-Ion-Battery, Battery Degradation, Machine Learning, Condition Monitoring, Electrochemical Impedance Spectroscopy

Zusammenfassung

Lithium-Ionen-Batterien sind die Schlüsseltechnologie für die Elektrifizierung des Transportsektors und für den Übergang zu einer nachhaltigen Mobilität. Aufgrund ihrer hohen Energie- und Leistungsdichten in Kombination mit einer hohen Zyklenfestigkeit dominieren sie den Markt der elektrochemischen Speicher. Dennoch weisen sie weiteres Optimierungspotential auf, das genutzt werden muss, um sichere sowie effiziente Lade- und Entladezyklen zu gewährleisten. Dafür ist es unerlässlich, den Zustand der Batteriezelle hoch genau zu bestimmen. Die Zustände, wie der Lade- oder der Alterungszustand, sind aber im Gegensatz zu den Batterieparametern, wie Strom, Spannung und Temperatur, nicht direkt messbar. In dieser Arbeit werden datengetriebene Modelle basierend auf Algorithmen des Maschinellen Lernens verwendet, um den Zustand von Lithium-Ionen-Batterien zu schätzen. Dabei wird der gesamte Entwicklungsprozess von Datenauswahl über Datenvorverarbeitung bis hin zur Evaluation der Modelle berücksichtigt. Zuerst wird der Ladezustand mit künstlichen neuronalen Netzen bestimmt. Dabei werden Datenpunkte künstlich erstellt, um das Training der Modelle zu optimieren. Mit einem faltenden neuronalen Netzwerk wird ein geringster Testfehler von 0,44% erzielt. Bei der Bestimmung des Alterungszustandes wird ein Modell basierend auf einer Gauß-Prozess-Regression entwickelt, das für die Schätzung der Degradation von drei verschiedenen Arten von Lithium-Ionen-Batterien verwendet werden kann. Dabei wird ein mittlerer Fehler auf den Testdatensatz von 1,33% erreicht. Beide Modelle, zur Bestimmung des Lade- sowie des Alterungszustandes, zielen darauf ab, einen formelmäßigen Zusammenhang zwischen den messbaren Batterieparametern, Strom, Spannung und Temperatur, und den nicht messbaren Zuständen zu bestimmen. Als letztes wird die Bestimmung der Impedanz über den Lebenszyklus der Batterien betrachtet und optimiert. Aus den durchgeführten Alterungstests der Lithium-Ionen-Batterien entstehen über 25000 Impedanzspektren, die über verschiedene Umgebungsbedingungen und Zustände analysiert werden. Auf Basis der Korrelationswerte zwischen Impedanz und Kapazität kann der Ladezustand von 10% als geeigneter Zustand für eine elektrochemische Impedanzmessung identifiziert werden. Die Korrelationswerte werden zusätzlich für die Merkmalsextrahierung aus den Impedanzspektren verwendet und bilden somit die Grundlage für ein weiteres Schätzmodell für den Alterungszustand. Dabei wird eine Stützvektormaschine entwickelt, die mithilfe von Impedanzwerten den Alterungszustand mit einem mittleren Fehler auf Testdaten von 0,86% schätzen kann. Darüber hinaus können die Ergebnisse der Korrelationsanalyse mit den Ergebnissen des Schätzmodells validiert werden. Durch die entwickelten Modelle zur Schätzung des Zustandes von Lithium-Ionen-Batterien kann die Überwachung der einzelnen Zellen verbessert und der Betrieb des gesamten Batteriesystems optimiert werden. Diese Fortschritte sind von höchster Relevanz, egal ob für mobile oder stationäre Anwendungen von Lithium-Ionen-Batterien, um in Zukunft nachhaltige und effiziente Energiespeicherlösungen zu ermöglichen.

Stichworte: Lithium-Ionen-Batterie, Batteriedegradation, Maschinelles Lernen, Zustandsüberwachung, Elektrochemische Impedanzspektroskopie

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Ausgangssituation	1
1.2	Zielsetzung	2
1.3	Struktur der Dissertation	3
2	Grundlagen Lithium-Ionen-Batterien	7
2.1	Aufbau einer Lithium-Ionen-Zelle	7
2.2	Parameter und Zustände	8
2.3	Degradation	13
3	Grundlagen Maschinelles Lernen	15
3.1	Modelle	15
3.1.1	Überanpassung und Dimensionsreduktion	17
3.1.2	Lineare Regression	20
3.1.3	Stützvektormaschine	22
3.1.4	Gauß-Prozess-Regression	25
3.2	Künstliche Neuronale Netze	27
3.2.1	Multi-Layer Perceptron	28
3.2.2	Convolutional Neural Network	31
3.2.3	Rekurrente Neuronale Netze	32
4	Stand der Technik	37
4.1	Einführung	37
4.2	Ladezustandsbestimmung von Lithium-Ionen Batterien	38
4.3	Gesundheitszustandsbestimmung von Lithium-Ionen Batterien	42
4.4	Impedanzbestimmung von Lithium-Ionen Batterien	46
4.5	Zusammenfassung und Forschungslücken	48
5	Datenquellen und Batterietests	51
5.1	Datenquellen	51
5.2	Batterietests	52
6	Ladezustandsbestimmung durch Maschinelles Lernen	57
6.1	Data Augmentation Methoden	57
6.2	Ergebnisse	60
7	Gesundheitszustandsbestimmung durch Maschinelles Lernen	67
7.1	Datensatz	67
7.2	Datenvorverarbeitung	68

7.3	Ergebnisse und Diskussion	70
7.3.1	Einfluss der Hauptkomponentenanalyse	70
7.3.2	Manuelle Merkmalsextraktion	70
7.3.3	Einfluss der Oversampling Strategie	72
7.3.4	Modellvergleich und finales Schätzmodell	72
8	Datengetriebene Optimierung der Impedanzbestimmung	79
8.1	Impedanzbestimmung mithilfe Ersatzschaltbildmodellen	79
8.1.1	Ersatzschaltbildmodell	79
8.1.2	Testdaten und Schätzmodell	80
8.1.3	Ergebnisse und Diskussion	81
8.2	Zusammenhang zwischen Impedanz und Kapazität	84
8.2.1	Korrelationsergebnisse	84
8.2.2	Ergebnisse der Schätzmodelle und Diskussion	88
9	Zusammenfassung und Ausblick	95
9.1	Zusammenfassung	95
9.2	Ausblick	98
	Abkürzungsverzeichnis	99
	Verzeichnis der Formelzeichen	101
	Abbildungsverzeichnis	103
	Tabellenverzeichnis	105
	Algorithmen	107
	Publikationsliste	109
	Literaturverzeichnis	113

1 Einleitung

1.1 Ausgangssituation

Die Vereinten Nationen haben im Jahr 2015 die Agenda 2030 verabschiedet und sich damit zu 17 globalen Zielen für eine bessere Zukunft verpflichtet [1]. Ein Ziel im Sinne der Nachhaltigkeit ist die Förderung und Weiterentwicklung von bezahlbarer und sauberer Energie. Hinzu kommen weitere Maßnahmen zum Klimaschutz, um den CO_2 -Ausstoß zu reduzieren und die globale Erwärmung auf 1,5 °C zu begrenzen. Bis zum Jahr 2045 soll Deutschland als eines der ersten Industrieländer klimaneutral werden [2, 3].

Um diese Ziele zu erreichen, muss der Transportsektor auf erneuerbare Energien umsteigen. Eine Technologie, die maßgeblich am Erfolg des Umstiegs beteiligt ist, sind Lithium-Ionen-Zellen. Sie sind die Schlüsseltechnologie als elektrochemischer Energiespeicher für diverse Anwendungen in der Unterhaltungselektronik bis hin zur Energiespeicherung bei Batterieelektrischen Fahrzeugen (BEVs) [4]. Grund dafür sind die hohen Energie- und Leistungsdichten bei einer gleichzeitig hohen Zyklenfestigkeit [5]. Ein Vergleich der gravimetrischen Leistungs- und Energiedichten zwischen Superkondensatoren, Blei-Säure-Batterien, Redoxflow-Batterien, Nickel-Cadmium Batterien (NiCd), Nickel-Metallhydrid-Batterien (NiMH) und Lithium-Ionen-Batterien, aufgeteilt in die Zellchemien Lithiumtitanat (LTO), Lithium-Eisenphosphat (LFP) sowie Nickel-Mangan-Cobalt (NMC) mit Kohlenstoff (C) und einem Gemisch aus Kohlenstoff und Silizium (C+Si), ist in Abb. 1.1 dargestellt.

Wie in der Abbildung erkennbar ist, weisen Lithium-Ionen-Batterien hohe Energie- und Leistungsdichten auf und decken, abhängig von der genauen Zellchemie, ein breites Spektrum ab. Dadurch nehmen sie eine dominante Rolle auf dem Markt der Energiespeichersysteme im Vergleich zu anderen elektrochemischen Speichern ein [7]. Dennoch müssen die Entwicklung und besonders der Betrieb weiter optimiert werden, um die Konkurrenzfähigkeit gegenüber konventionellen Verbrennerfahrzeugen zu gewährleisten. Da Lithium-Ionen-Batterien komplexe elektrochemische Systeme sind, die stark von den Umgebungs- und Belastungsbedingungen abhängig sind, ist die Zustandsbestimmung erschwert [8]. Während Batterieparameter, wie Strom, Spannung und Temperatur, messbar sind, sind die Zustände, wie der State-of-Charge (SoC) oder der State-of-Health (SoH), nicht direkt messbar. Die genaue Schätzung dieser Zustände ist aber von höchster Relevanz, um Sicherheit, Langlebigkeit sowie einen effizienten und robusten Betrieb des Batteriesystems sicherzustellen. Dabei geraten besonders datengetriebene Schätzmethode in den Fokus, da nicht die einzelnen elektrochemischen Prozesse innerhalb der Zelle nachgebildet werden müssen, sondern der formelmäßige Zusammenhang zwischen den Batterieparametern und den Zuständen angenähert wird [9]. Dies führt zu geringeren Entwicklungszeiten, geringerer benötigter Rechenleistung und Anwendbarkeit auf mehrere Zelltypen [10]. Einziger Nachteil ist die hohe Abhängigkeit von einem verlässlichen Datensatz, was besonders bei Batterien mit schier unendlichen Möglichkeiten an Umgebungs- und Belastungsbedingungen zu

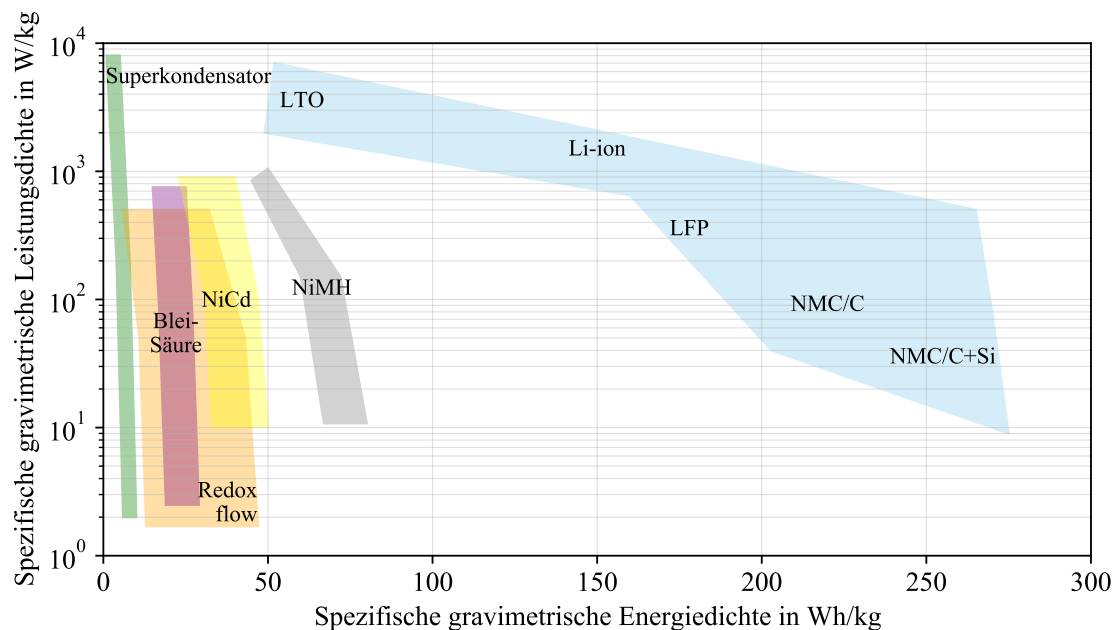


Abbildung 1.1: Spezifische gravimetrische Leistungs- und Energiedichte im Vergleich für verschiedene Speichertechnologien nach [6]. Zusätzliche Unterteilung der Lithium-Ionen-Batterien nach unterschiedlichen Zellchemien.

Herausforderungen führt [11]. Dennoch zeigen datengetriebene Modelle großes Potential, da sie ohne Hintergrundwissen über die vergangenen Belastungen der Zellen den Zustand hochgenau schätzen und somit entscheidend zur Optimierung des Betriebs des gesamten Batteriesystems beitragen können.

1.2 Zielsetzung

Ziel dieser Dissertation ist die gesamtheitliche Optimierung der Zustandsbestimmung von Lithium-Ionen-Batterien durch den Einsatz von Algorithmen aus dem Bereich Künstliche Intelligenz (KI) und im Speziellen dem Bereich Maschinelles Lernen (ML). Grundlage dafür bildet die Erstellung eines Datensatzes und die Durchführung von Batterieexperimenten, die den Alterungsverlauf von Batteriezellen repräsentieren. Darauf aufbauend soll die Schätzung des SoC und des SoH im Bezug auf Genauigkeit, Robustheit und benötigte Rechenleistung optimiert werden. Zusätzlich soll analysiert werden, in wie weit künstlich erstellte Batteriedaten reale Experimente ersetzen können. Zentrales Ziel der Arbeit ist die Optimierung der Überwachung der einzelnen Batteriezellen, um effiziente Lade- und Entladezyklen sowie eine lange Lebensdauer der Zellen zu gewährleisten. Dazu gehört neben der Bestimmung des SoC und des SoH auch die Analyse der Impedanz der Zelle. Dies betrifft nicht nur die Bestimmung der Impedanz, sondern auch die Interpretation der Impedanz im Zusammenhang mit dem Alterungsverhalten der Batteriezellen. Somit können folgende Forschungsfragen formuliert werden, die durch die Arbeit beantwortet werden sollen:

1. Können Simulationsdaten und künstlich erstellte Daten reale Experimente ersetzen und das Training von ML Modellen verbessern?
2. Wie kann die Bestimmung des SoC und des SoH durch die Datenvorverarbeitung optimiert und gleichzeitig der Rechenaufwand reduziert werden?
3. Kann ein einzelnes datengetriebenes Modell zur SoH Bestimmung von Lithium-Ionen-Batterien für mehrere Zellarten verwendet werden und welche Merkmale sind dafür entscheidend?
4. An welchem Zeitpunkt im Lebenszyklus einer Batteriezelle sollte eine Elektrochemische Impedanz Spektroskopie (EIS) Messung mit maximalem Informationsgewinn durchgeführt werden?
5. Kann die Kapazität einer Batteriezelle mithilfe von Impedanzdaten geschätzt werden und welche Merkmale aus einem Impedanzspektrum sind dafür relevant?

1.3 Struktur der Dissertation

Diese Dissertation beschäftigt sich mit der Optimierung der Zustandsbestimmung von Lithium-Ionen-Batterien durch datengetriebene Modelle. Dazu werden zuerst in Kapitel 2 die Grundlagen der Lithium-Ionen-Batterien erklärt. Dabei werden die Batterieparameter, die Zustände und das Alterungsverhalten genauer erläutert. Dieses Kapitel stellt das Wissen im Bereich Lithium-Ionen-Batterien vor, das notwendig ist, um die Experimente und Datensätze zu verstehen. Obwohl die einzelnen elektrochemischen Prozesse einer Zelle nicht direkt abgebildet werden, ist es trotzdem wichtig, den Aufbau, die Funktionsweise und die Alterungsmechanismen zu verstehen. In Kombination mit Kapitel 3, in welchem die verwendeten ML Modelle erklärt werden, bilden beide Kapitel die Grundlage für den praktischen Teil der Arbeit. Detaillierter wird in Kapitel 3 die relevante Theorie der Algorithmen für diese Arbeit erklärt und auf Probleme der ML Verfahren eingegangen. Dies betrifft Themen von der Vorverarbeitung der Daten bis hin zur Evaluation der Schätzmodelle. Anschließend werden in Kapitel 4 der Stand der Technik mit den bestehenden Modellen im Forschungsumfeld vorgestellt und die Forschungslücken herausgearbeitet, die durch diese Arbeit geschlossen werden sollen. Dabei findet eine weitere Aufteilung in bestehende Modelle zur Bestimmung des SoC, Modelle zur Bestimmung des SoH und die Optimierung der Impedanzbestimmung statt. Nach den Grundlagen-Kapiteln werden in Kapitel 5 die verwendeten Datenquellen und die durchgeführten Batterietests vorgestellt. Da die Qualität von datengetriebenen Modellen stark vom verwendeten Datensatz abhängig ist, ist dieses Kapitel von hoher Relevanz, um die Ergebnisse der verschiedenen Schätzverfahren beurteilen zu können. Dabei wird zwischen externen Datenquellen und den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Batterieexperimenten unterschieden. Anschließend folgen die drei Ergebniskapitel, aufgeteilt in die Bestimmung des Ladezustandes in Kapitel 6, Bestimmung des Gesundheitszustandes in Kapitel 7 und die datengetriebene Optimierung der Impedanzbestimmung in Kapitel 8. Die Ergebnisse dieser drei Themenbereiche werden vorgestellt und im Zusammenhang mit bestehenden Modellen und

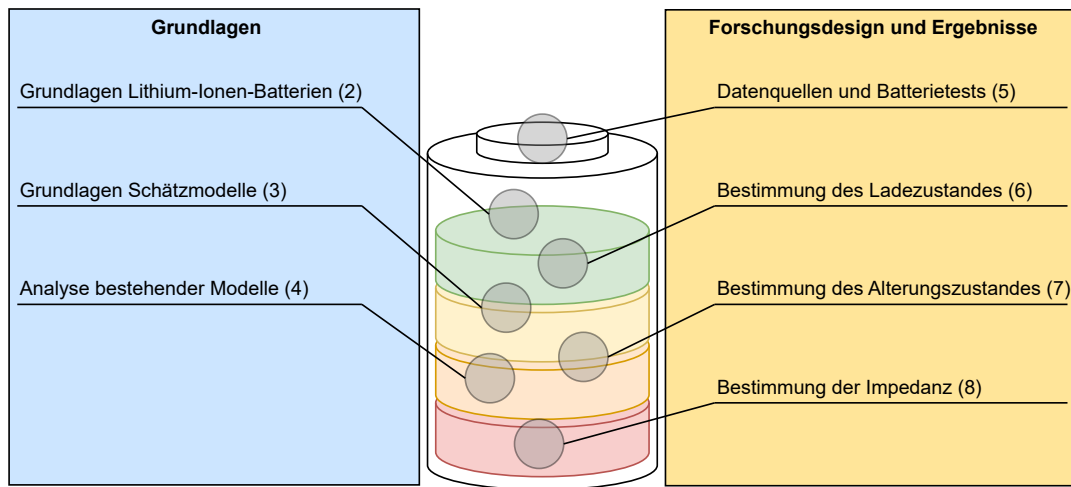


Abbildung 1.2: Aufbau und Struktur der Dissertation aufgeteilt in Grundlagen Lithium-Ionen-Batterien (2), Grundlagen Maschinelles Lernen (3) und Stand der Technik (4) sowie Datenquellen und Batterietests (5), Ladezustandsbestimmung durch Maschinelles Lernen (6), Gesundheitszustandsbestimmung durch Maschinelles Lernen (7) und datengetriebene Optimierung der Impedanzbestimmung (8).

Anwendungsmöglichkeiten in der Praxis diskutiert. Abschließend folgt eine Zusammenfassung und der Ausblick auf zukünftige Arbeiten im Bezug auf Fortschritte im Bereich KI. Insgesamt lässt sich die Arbeit in Kapitel zur Erläuterung der Grundlagen (Kapitel 2 - Kapitel 4) sowie Kapitel für die Vorstellung des Forschungsdesigns und der Ergebnisse (Kapitel 5 - Kapitel 8) aufteilen. Während bei den Grundlagen der theoretische Hintergrund erklärt und damit das Verständnis der Arbeit ermöglicht wird, zeigen die Kapitel zum Forschungsdesign die Methodik, welche die Batterieexperimente und die Modellierungsansätze beinhaltet. Abschließend werden die Ergebnisse der Modelle zur Zustandsschätzung von Lithium-Ionen-Batterien dargestellt und im Rahmen einer Anwendung und im Vergleich zu weiteren Modellen diskutiert. Die Unterscheidung der Hauptkapitel der Arbeit sind in Abb. 1.2 zusammengefasst.

Ein besonderes Augenmerk liegt auf den im Rahmen der Arbeit entstandenen Veröffentlichungen. Dabei bildet jeweils eine Journal-Veröffentlichung die Grundlage für ein Ergebniskapitel. Diese sind in Abb. 1.3 als Säulen gekennzeichnet. Zusätzlich sind die Erkenntnisse aus mehreren Konferenz-Veröffentlichungen in die Arbeit eingeflossen. Diese sind farblich für die jeweiligen Themenbereiche in Abb. 1.3 markiert. Eine Zusammenfassung der durch die Arbeit entstandenen Veröffentlichungen ist in der Publikationsliste auf Seite 109 dargestellt.

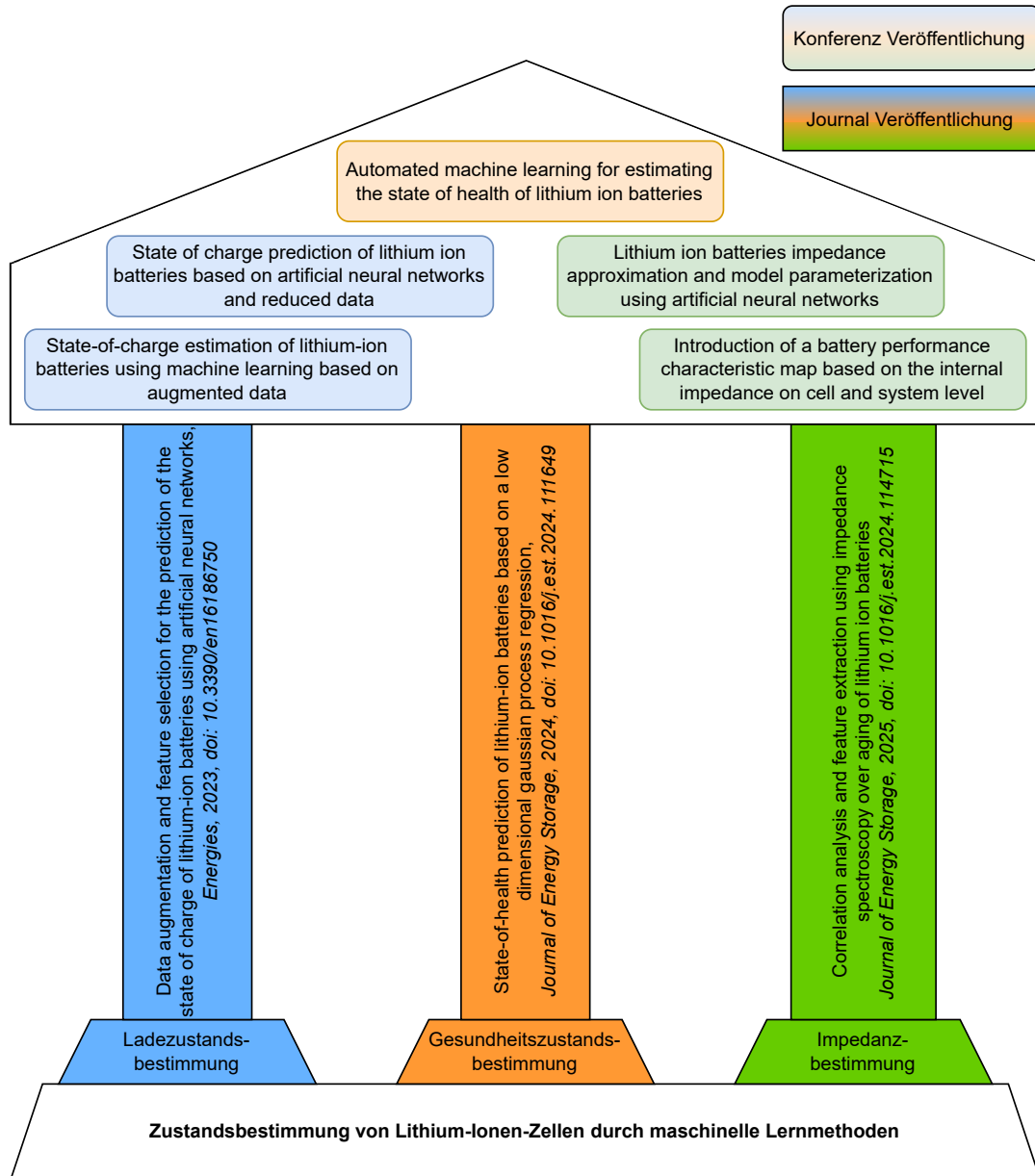


Abbildung 1.3: Veröffentlichungen im Zusammenhang dieser Dissertation. Grundlage für die drei Ergebnis Kapitel bilden drei Journal-Veröffentlichungen. Zusätzlich sind weitere Konferenz-Veröffentlichungen entstanden, die farblich nach Themenbereich markiert sind.

2 Grundlagen Lithium-Ionen-Batterien

Batterien sind elektrochemische Energiespeicher, welche die in den verwendeten Materialien enthaltene chemische Energie durch Redox-Reaktionen in elektrische Energie umwandeln [12]. Es wird zwischen Primär- und Sekundärbatterien unterschieden. Während Primärbatterien nur einmal entladen werden können, sind Sekundärbatterien wiederaufladbar. Lithium-Ionen-Batterien sind Sekundärbatterien und werden folglich nach DIN 40729-1 (1985) den Akkumulatoren zugeordnet [13].

In diesem Kapitel werden der Aufbau und die Struktur einer Lithium-Ionen-Zelle vorgestellt und die Parameter einer Batteriezelle erklärt. Aufbauend darauf werden verschiedene Alterungsmechanismen vorgestellt, die zu einer Degradation der Kapazität von Lithium-Ionen-Batterien führen.

2.1 Aufbau einer Lithium-Ionen-Zelle

Lithium-Ionen-Zellen funktionieren nach dem Prinzip einer galvanischen Zelle. Während der Entladung wird durch die Oxidation an der Anode (negative Elektrode) und die gleichzeitige Reduktion an der Kathode (positive Elektrode) elektrische Energie freigesetzt [14]. Bei der Ladung werden die entsprechenden Reaktionen umgekehrt.

Im Rahmen dieser Arbeit werden Zellen mit dem Anodenmaterial Graphit und dem Kathodenmaterial Nickel-Mangan-Cobaltoxid (NMC) betrachtet. Prognosen zeigen die mittelfristige Dominanz dieser Materialien gegenüber anderen Materialien wie beispielsweise Lithium-Eisenphosphat (LFP) [15]. Insgesamt ist die Wahl des Aktivmaterials von Faktoren wie der Lebensdauer, Sicherheit, Kosten und dem elektrochemischen Verhalten abhängig [16]. Der Stromkollektor der Anode besteht aus Kupfer, der Kollektor der Kathode aus Aluminium. In Abb. 2.1 ist das Funktionsprinzip einer Lithium-Ionen-Zelle während der Entladung dargestellt. Dabei werden die Lithium-Ionen aus der Anode ausgelagert (Deinterkalation) und in das Metallschichtoxid der Kathode eingelagert (Interkalation). Die Zelle ist mit einer Elektrolytflüssigkeit durchtränkt, welche den Ionentransport ermöglicht. Kathode und Anode werden durch einen porösen, elektronisch isolierenden Separator getrennt, um einen internen Kurzschluss zu vermeiden [17]. Dieser besteht in kommerziellen Zellen meist aus Polymeren, wie Polypropylen (PP) oder Polyethylen (PE) [16].

Abhängig von Oxidation und Reduktion an den jeweiligen Elektroden wird eine Lithium-Ionen-Zelle reversibel ge- und entladen. Die chemische Reaktion für eine Vollzelle ist in (2.1) dargestellt [18].



MO_2 ist dabei das Metalloxid, in diesem Fall eine Kombination aus Ni, Mn und Co. Die Entladereaktion findet von links nach rechts statt, da hierbei die positive Elektrode

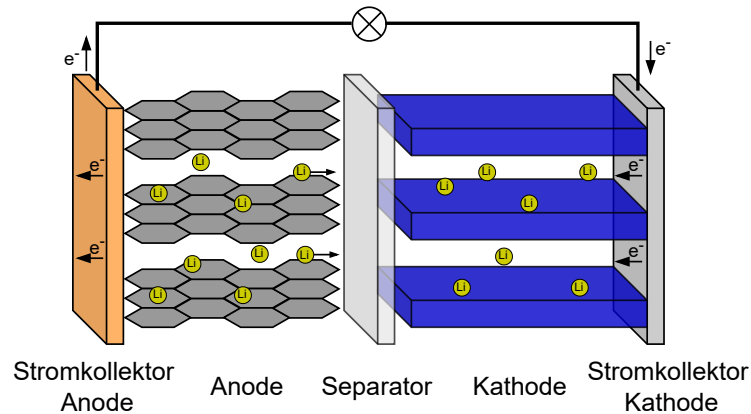


Abbildung 2.1: Wirkprinzip einer Lithium-Ionen-Zelle während der Entladung mit Separator, Kathode, Anode und den jeweiligen Ableitern nach [17].

reduziert wird. Folglich findet die Ladung in umgekehrter Richtung statt [19]. Bei den ersten Lade- und Entladezyklen wird die sogenannte Solid Electrolyte Interphase (SEI) Schicht aufgebaut, die zu einem initialen Kapazitätsverlust führt. Der Aufbau der Schicht ist unter anderem abhängig vom Elektrolyten, der Anodenoberfläche und der Stromstärke während den Zyklen. Ein gleichmäßiger Aufbau ist von hoher Relevanz, da die SEI Faktoren wie Sicherheit, Lebensdauer und Leistung der Lithium-Ionen-Zelle entscheidend beeinflusst [20].

Prinzipiell werden drei verschiedene Bauformen von Lithium-Ionen-Batterien unterschieden:

- Zylindrische Zelle
- Prismatische Zelle
- Pouch Zelle

Die Bauform beeinflusst Parameter wie Energie- und Leistungsdichte direkt. Je weniger das Gehäuse wiegt und je dichter das Aktivmaterial gepackt werden kann, desto höher sind die Werte für Energie- und Leistungsdichte. Die Wahl der Form wird zusätzlich von Faktoren wie Oberflächen/Volumenverhältnis für die Kühlung oder von mechanischen Stabilitätsanforderungen beeinflusst. Die aktuell verwendeten Bauformen der Original Equipment Manufacturers (OEMs) und die Prognosen für das Jahr 2030 sind in Tabelle 2.1 dargestellt [21].

2.2 Parameter und Zustände

Ziel dieser Arbeit ist es, eine mathematische Funktion zu approximieren, die den Zusammenhang zwischen den messbaren Batterieparametern und den nicht-messbaren Zuständen der Batteriezelle beschreibt. Zu den messbaren Parametern gehören Strom, Spannung und

OEM	2023	2030
Volkswagen AG	Prismatisch, Pouch	Prismatisch , Pouch
RNM Allianz	Prismatisch , Pouch	Prismatisch, Pouch
BMW Group	Prismatisch	Prismatisch, Zylindrisch
GM Group	Prismatisch , Pouch	Prismatisch , Pouch , Zylindrisch
Daimler AG	Prismatisch	
Toyota Motor Corporation	Prismatisch	
Hyundai Motor Group	Prismatisch , Pouch	
Mazda Motor Corporation	Prismatisch	Prismatisch , Zylindrisch
Ford Motor Company	Prismatisch , Pouch	Prismatisch
Stellantis N.V.	Prismatisch , Pouch	Prismatisch , Pouch
Suzuki, Subaru Corporation	Prismatisch	
Tesla, Inc.	Prismatisch, Zylindrisch	

Tabelle 2.1: Verwendete Zellformen von OEMs im Jahr 2023 und Prognose für das Jahr 2030. Die dominierende Bauform ist fett markiert [21].

Temperatur. Die Batteriezustände sind der Alterungszustand und der Ladezustand. Hinzu kommt die Bestimmung der Impedanz. Die Messung ist aufwendig und ist nur unter Laborbedingungen hochgenau. In der Anwendung besteht weiteres Optimierungspotential zur direkten Messung oder Schätzung der Impedanz. Erschwerend kommt hinzu, dass die Impedanz von den Batterieparametern und den Zuständen abhängig und somit immer nur für einen bestimmten Arbeitspunkt gültig ist. Im Folgenden werden die Batteriezustände sowie die Impedanz genauer erläutert.

Alterungszustand

Der Alterungs- oder Gesundheitszustand SoH ist ein Maß für die Kapazitätsdegradation. Wie in (2.2) gezeigt, ist er das Verhältnis der aktuellen Kapazität zur ursprünglich verfügbaren Kapazität.

$$SoH = \frac{Q_{now}}{Q_{initial}} \quad (2.2)$$

Beginnend bei 1 nimmt die Kapazität und somit der SoH über die Lebensdauer ab. Unterschreitet der SoH einen bestimmten Wert, ist das Lebensende der Batteriezelle erreicht. Bei Automobilanwendungen ist dies typischerweise bei einem Wert von 0,8 der Fall.

Ladezustand

Der Ladezustand wird als SoC bezeichnet. Er ist das Verhältnis zwischen der restlichen Ladungsmenge in der Zelle, die noch verbraucht werden kann, und der insgesamt noch verfügbaren Kapazität am aktuellen Punkt im Lebenszyklus. Dies ist in (2.3) dargestellt.

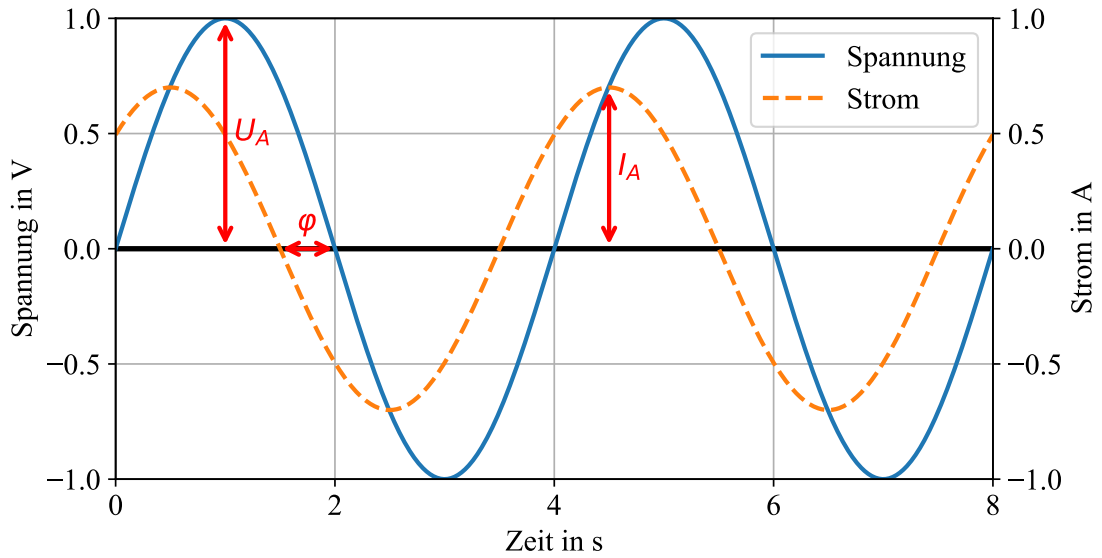


Abbildung 2.2: Impedanz als Verhältnis zwischen komplexer Spannung und komplexem Strom einer Lithium-Ionen-Batterie. Die Impedanz setzt sich zusammen aus dem Verhältnis zwischen Strom und Spannung sowie der Phasenverschiebung zwischen beiden. Zusätzlich sind die Amplituden für Strom und Spannung markiert.

$$SoC = \frac{Q_{rest}}{Q_{now}} \quad (2.3)$$

Impedanz

Die Impedanz ist der komplexe Widerstand einer Zelle und somit Gegenstück zum Stromfluss durch eine Zelle. Sie ist definiert als das Verhältnis zwischen der komplexen Spannung und dem komplexen Strom. Diese entsteht, da Strom und Spannung nicht in Phase sind. Somit ist die Impedanz nicht nur das Verhältnis zwischen Strom und Spannung, wie es der Widerstand ist, sondern es kommt ein Anteil durch die Phasenverschiebung φ hinzu. Dies ist in Abb. 2.2 visualisiert.

Eine Methode, um die Impedanz zu messen, ist die EIS. Dabei wird die Batteriezelle im galvanostatischen Modus mit einem sinusförmigen Strom $I(t)$ angeregt und die Spannungsantwort $U(t)$ gemessen. Im potentiostatischen Modus ist dies andersherum. Dies wird für verschiedene Frequenzen wiederholt und resultiert in einem Impedanzspektrum in Abhängigkeit von der Frequenz [22]. Die dazugehörigen Formeln sind in (2.4) und (2.5) dargestellt.

$$U(t) = U_A \sin(2\pi ft) = U_A \sin(\omega t) \quad (2.4)$$

$$I(t) = I_A \sin(\omega t + \varphi) \quad (2.5)$$

Mithilfe der Eulerschen Formel in (2.6) können Spannungs- und Stromsignal wie in (2.7) und (2.8) umgeschrieben werden.

$$e^{i\varphi} = \cos(\varphi) + i\sin(\varphi) \quad (2.6)$$

$$U(t) = U_A e^{i\omega t} \quad (2.7)$$

$$I(t) = I_A e^{i\omega t - i\varphi} \quad (2.8)$$

Die komplexe Impedanz ist das Verhältnis zwischen Strom und Spannung und kann mittels (2.9) berechnet werden [23].

$$Z' = \frac{U(t)}{I(t)} = \frac{U_A e^{i\omega t}}{I_A e^{i\omega t - i\varphi}} = Z_A (\cos(\varphi) + i\sin(\varphi)) = Z_{real} + iZ_{im} \quad (2.9)$$

Der Impedanzverlauf wird typischerweise im sogenannten Nyquist Plot dargestellt, bei dem der negative Imaginärteil der Impedanz über dem Realteil der Impedanz aufgetragen wird. Dies ist in Abb. 2.3 dargestellt. Grob kann das Spektrum in drei Bereiche aufgeteilt werden: Hochfrequenz-, Mittelfrequenz- und Niederfrequenzbereich. Im MHz bis in den kHz Bereich, bei induktivem Verhalten, können die einzelnen Impedanzen der elektrischen Kontaktierung zwischen Aktivmaterial und Ableiter, den Korngrenzen und dem Elektrolyten zugeordnet werden. Im kHz bis Hz Bereich wird die SEI, der Ladungstransfer und die poröse Elektrode mit kapazitiven und resistiven Widerstandseffekten abgebildet. Im Hz bis μ Hz Bereich zeigen sich Diffusionseffekte im Elektrolyten und im Feststoff bei kapazitivem Verhalten [24].

Die Dynamik einer Lithium-Ionen-Zelle kann durch ein Ersatzschaltbildmodell nachgebildet werden. Typischerweise werden diese Modelle durch EIS Messungen parametrisiert. Das am häufigsten verwendete Ersatzschaltbildmodell ist in Abb. 2.4 dargestellt und besteht aus der Ruhespannung U_0 , dem Innenwiderstand R_i , zwei RC Gliedern mit einem parallelen Widerstand und einem Kondensator sowie einem Warburg Element. Bei steigender Anzahl der RC Glieder steigt auch die Genauigkeit des Modells. Aufgrund steigender Komplexität ist ein Ersatzschaltbildmodell mit zwei RC Gliedern ein geeigneter Kompromiss zwischen Genauigkeit und Rechenaufwand [25].

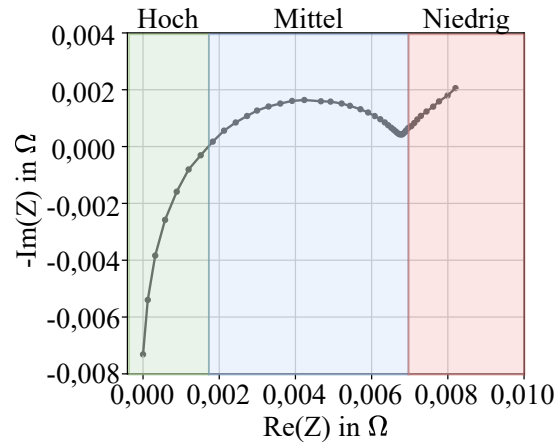


Abbildung 2.3: Beispielhafter Verlauf eines Impedanzspektrums einer Lithium-Ionen-Batterie mit dem Realteil der Impedanz auf der x-Achse und dem negativen Imaginärteil der Impedanz auf der y-Achse. Zusätzlich sind der Hochfrequenz-, der Mittelfrequenz- und der Niederfrequenzbereich farblich markiert.

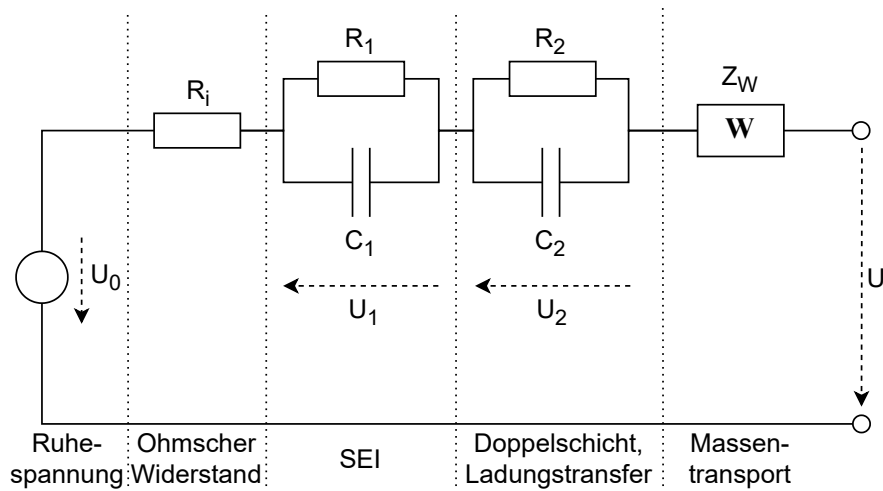


Abbildung 2.4: Meist verwendetes Ersatzschaltbildmodell einer Lithium-Ionen-Batterie mit den dazugehörigen elektrochemischen Prozessen nach [26]. Typischerweise wird das Ersatzschaltbildmodell durch EIS Messungen parametrisiert.

2.3 Degradation

Die Degradation oder Alterung einer Lithium-Ionen-Zelle ist die Reduktion der verfügbaren Leistung über die Zeit. Grundsätzlich kann die Degradation in zwei Arten aufgeteilt werden: die kalendarische und die zyklische Alterung. Die kalendarische Alterung beschreibt Langzeiteffekte und ist unabhängig von der Belastung der Zelle. Sie ist maßgeblich abhängig von den Umgebungsbedingungen während der Lagerung. Das Hauptaugenmerk liegt in dieser Arbeit auf der zyklischen Alterung. Das ist die Degradation, die durch die Belastung der Zelle verursacht wird. Einfluss darauf haben besonders die Umgebungsbedingungen und die Stromstärken beim Laden und Entladen der Batterie. Eine Erhöhung des Nennstroms bei einer C-Rate von 1 C auf 3 C kann beispielsweise zu einer Reduktion der Lebensdauer um bis zu 40% führen [27]. Eine der wichtigen Alterungsmechanismen ist das Lithium Plating. Darunter wird das Abscheiden von reinem Lithiummetall und die Anlagerung an der Anode verstanden. Das abgelagerte Lithium steht nicht mehr für den Ionen Transport zur Verfügung und somit wird die Kapazität der Zelle reduziert. Zusätzlich wird dadurch die SEI Schicht beschädigt, was eine weitere Degradation zur Folge hat. Eine homogene SEI Schicht ist unerlässlich für eine hohe Zyklenstabilität, gute Ionenleitfähigkeit und gute Adhäsionseigenschaften an der Graphitoberfläche [28]. Wird diese beschädigt, kann es zu weiterem Lithium Plating an einzelnen Partikeln und Kristalliten kommen. Besonders hohe Ladeströme und niedrige Temperaturen verstärken die Ablagerung von Lithium [29]. Wachsen die Ablagerungen weiter an, wird von Dendritenwachstum gesprochen. Dies kann bei fortschreitendem Wachstum zwischen Anode und Kathode zu einem Kurzschluss der Zelle führen. Zusätzlich können sich einzelne Metallpartikel des abgelagerten Lithiums lösen und die Zelle beschädigen [30].

Neben den chemischen Alterungsmechanismen kommt es auch zu mechanischen Alterungsmechanismen. Die Einlagerung der Lithium Ionen während Ladung und Entladung in Anode und Kathode bewirkt eine Volumenänderung von ungefähr 3% bei der positiven und ungefähr 10% bei der negativen Elektrode [31]. Durch die Expansion und Kontraktion kommt es langfristig zu einer Beschädigung der Zelle. Dies kann auch dazu führen, dass die SEI Schicht aufbricht. Die Nachbildung der Passivierungsschicht resultiert in weiterem Lithiumverlust. Neben den langfristigen Folgen kann es durch die mechanischen Spannungen zu Rissbildungen im Aktivmaterial kommen. Die Partikel können auseinander brechen und sind somit nicht mehr elektrisch angebunden. Dies kann zu einer akuten Zerstörung der Zelle führen [32].

Zusammenfassend sind die wichtigsten Degradationsmechanismen, die in einer Lithium-Ionen-Zelle auftreten können, Lithium Plating, Dendritenbildung, SEI Formierung, Metallauflösung, Gasentwicklung, Volumenänderung und Strukturänderung [33]. Der Fokus dieser Arbeit liegt auf der Bestimmung des SoH unabhängig von dem zugrundeliegenden Alterungsmechanismus. Dennoch können die Ergebnisse aus Kapitel 7 genutzt werden, um die Alterung wieder auf einen bestimmten Degradationsmechanismus zurückzuführen. Besonders auch die Ergebnisse aus der Impedanzbestimmung in Kapitel 8 können im Zusammenhang mit den Degradationsmechanismen verwendet werden, da die verschiedenen Bereiche des Spektrums einzelnen elektrochemischen Prozessen zugeordnet werden können.

In diesem Kapitel wurde die Struktur und der Aufbau einer Lithium-Ionen-Zelle erläutert. Nachdem die Parameter einer Lithium-Ionen-Batterie vorgestellt wurden, werden die

wichtigsten Degradationsmechanismen erklärt. Der Zustand einer Lithium-Ionen-Batterie ist stark von den Parametern und den Umgebungsbedingungen abhängig. So können verschiedene Kombinationen von Parametern zu scheinbar demselben Zustand führen. Obwohl in dieser Arbeit ein rein datengetriebener Zusammenhang zwischen den Parametern und den Batteriezuständen approximiert werden soll, ist es dennoch wichtig, die verschiedenen Batterieparameter und die Alterungsmechanismen zu verstehen. Die in diesem Kapitel erläuterten Grundlagen bilden die Basis, um die Batteriedaten aus den Experimenten und den weiteren Datenquellen, vorgestellt in Kapitel 5, zu verstehen. Diese Daten werden in den in Kapitel 3 vorgestellten ML Modellen verwendet, um die Ergebnisse für die Schätzung des SoC in Kapitel 6 und des SoH in Kapitel 7 zu liefern. Sie bilden somit die Grundlage für alle Ergebnisse dieser Arbeit.

3 Grundlagen Maschinelles Lernen

ML ist ein Teilgebiet der KI, in dem Lernalgorithmen mithilfe von Leistungskriterien, wie Beispieldaten oder Erfahrungswerten aus der Vergangenheit, ein komplexes Modell entwickeln [34]. Die Art der Wissensrepräsentation in diesen Modellen kann anschließend auf neue, unbekannte Daten angewendet werden. Besonders bei Problemstellungen, die zu komplex für analytische Beschreibungen sind, kann ML verwendet werden, um Zusammenhänge aus Beispieldaten zu lernen [35]. ML ist stark verknüpft mit dem Themenfeld Data Science, bei dem aus Daten Muster erkannt und Schlussfolgerungen gezogen werden. Dies ist in Abb. 3.1 anhand des Knowledge Discovery in Databases (KDD) Prozesses dargestellt. Der Prozess beginnt mit der Datenauswahl und endet nach Schritten der Datenverarbeitung mit der Extrahierung und der Interpretation von Wissen. Zur Erkennung von Mustern werden häufig Methoden des ML verwendet [36].

In diesem Kapitel werden die verschiedenen verwendeten ML Algorithmen vorgestellt. Zuerst werden allgemeine mathematische Grundlagen bei der Nutzung von ML Modellen erklärt und anschließend die einzelnen Verfahren erläutert. Dabei werden neben den klassischen ML Verfahren, wie der linearen Regression, der Stützvektormaschine oder Support Vector Machine (SVM) und der Gauß Prozess Regression (GPR), auch Künstliche Neuronale Netze (KNNs) erläutert. Diese beinhalten nicht nur vorwärtsgerichtete KNNs, sondern auch Rekurrente Neuronale Netze (RNNs), welche für die Verarbeitung von Zeitreihen geeignet sind. Da einige Modelle erst vor wenigen Jahren im englischsprachigen Raum entwickelt wurden, gibt es Begriffe, für die keine geeignete Übersetzung existiert. Außerdem soll die Vergleichbarkeit zu anderen Publikationen erhalten bleiben. Deshalb wird in diesem Kapitel nach der Einführung der Begriffe auf Deutsch und Englisch im Weiteren der englische Begriff verwendet, wenn dies im Sprachgebrauch oder in der Literatur so üblich ist. In Kombination mit den vorgestellten Batteriedaten in Kapitel 5 werden die Modelle angewendet, um den Zustand von Lithium-Ionen-Batterien zu schätzen. Die Ergebnisse der Modelle folgen in Kapitel 6, Kapitel 7 und Kapitel 8.

3.1 Modelle

Beim ML werden drei verschiedene Bereiche unterschieden:

- überwachtes Lernen
- unüberwachtes Lernen
- bestärkendes Lernen

Ziel des ML ist es, den Zusammenhang zwischen zwei oder mehr Mengen zu beschreiben, siehe (3.1).

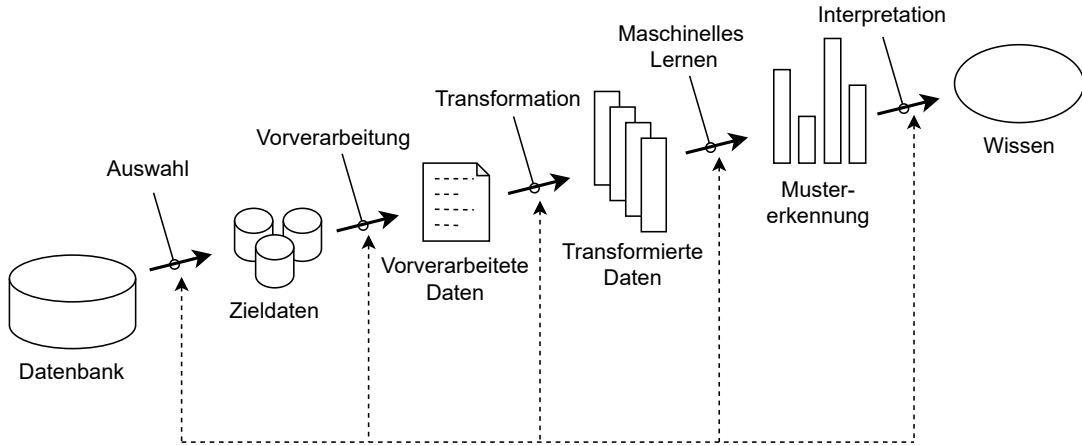


Abbildung 3.1: KDD-Prozess zur Verarbeitung von Daten und Extrahierung von Wissen nach [36].

$$f : X \rightarrow Y \quad (3.1)$$

Beim überwachten Lernen sind Beispieldaten (X_i, Y_i) mit $i = 1, \dots, n$ vorhanden. Diese Daten werden verwendet, um das Modell zu trainieren. Der Zusammenhang zwischen den Eingangs- oder Merkmalsdaten X_i und den Ausgangs- oder Zielwertdaten Y_i wird gelernt und kann anschließend auf unbekannte Daten angewendet werden [37].

Beim unüberwachten Lernen sind dagegen nur Merkmalsdaten vorhanden. Ziel ist es, aufgrund von Gemeinsamkeiten Muster und Strukturen in den Daten zu erkennen. Diese können dann beispielsweise in verschiedenen Gruppen geclustert werden [38].

Das bestärkende Lernen ist ein Sonderfall, da hierbei das System mit seiner Umwelt interagiert. Durch die Aktionen wird die Umgebung verändert, was zu einer positiven oder negativen Rückmeldung führt. Dabei werden sogenannte Belohnungsfunktionen eingesetzt. Das System hat das Ziel, die Belohnung zu maximieren, und orientiert sein Verhalten daran [38].

Im Rahmen dieser Arbeit mit dem Anwendungsfeld der Zustandsbestimmung von Lithium-Ionen-Batterien werden Batterietests durchgeführt, um die Zusammenhänge zwischen Batterieparametern und Batteriezuständen zu bestimmen. Daher werden hauptsächlich Verfahren des überwachten Lernens verwendet.

Die Modelle des ML werden in dieser Arbeit anhand von Standardmetriken bewertet. Diese sind der Mean Absolute Error (MAE) in (3.2), der Root Mean Square Error (RMSE) in (3.3) und der R^2 -Wert in (3.4). Dabei sind y_i die realen Werte, y_i^* die geschätzten Werte des Modells, $\bar{y}$ der Mittelwert der realen Werte und n die Anzahl der Werte.

$$MAE(y_i, y_i^*) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - y_i^*| \quad (3.2)$$

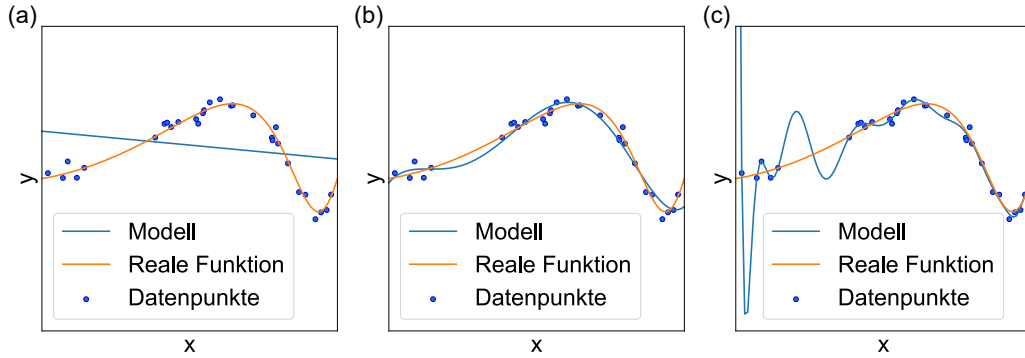


Abbildung 3.2: Unter- und Überanpassung eines Modells an Datenpunkte. Die Schätzmodelle basieren auf einer Funktion ersten Grades in (a), einer Funktion fünften Grades in (b) und 15. Grades in (c). Die Darstellung zeigt die Unteranpassung in (a), die Überanpassung in (c) und ein passendes Modell in (b) nach [39].

$$RMSE(y_i, y_i^*) = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - y_i^*)^2} \quad (3.3)$$

$$R^2(y_i, y_i^*) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - y_i^*)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (3.4)$$

3.1.1 Überanpassung und Dimensionsreduktion

Ein häufiges Problem beim überwachten Lernen ist die Überanpassung an die Trainingsdaten. Dabei werden die Zusammenhänge in den Trainingsdaten sehr genau approximiert, und diese können nicht mehr generalisiert werden. Dies führt zu niedrigen Fehlern bei Trainingsdaten, aber zu hohen Fehlern bei unbekannten Daten. Das Gegenteil ist die Unteranpassung. Dabei ist die Komplexität des Schätzmodells zu gering und die Zusammenhänge der Daten können nicht passend approximiert werden. Die Phänomene der Unter- sowie Überanpassung sind in Abb. 3.2 visualisiert.

Dabei wird in (a) eine Unteranpassung des Modells mit einer Funktion ersten Grades dargestellt. Das lineare Modell kann die Zusammenhänge der Datenpunkte nicht abbilden. Während in (b) mit einer Funktion fünften Grades die reale Funktion approximiert werden kann, ist in (c) die Überanpassung dargestellt. Das Modell mit einer Funktion 15. Grades durchläuft so gut wie jeden Datenpunkt und nähert den Verlauf sehr genau an. Dadurch wird die Annäherung an die reale Funktion aber verschlechtert und die Ergebnisse auf unbekannte Datenpunkte werden schlechter. Die Methoden, welche eingesetzt werden, um Überanpassung zu verhindern, heißen Regularisierungsverfahren.

Eine zusätzliche Möglichkeit, die Überanpassung zu reduzieren, ist die Extrahierung von

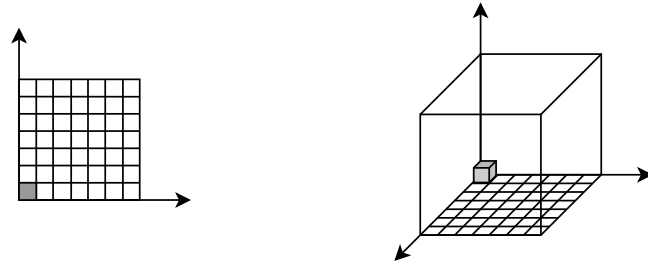


Abbildung 3.3: Fluch der Dimensionalität mit Anteil eines Teilgebietes bei steigender Dimensionalität in 2-D und 3-D nach [40]. Das Problem beschreibt die repräsentative Abdeckung eines Teilgebietes für das Gesamtgebiet bei steigender Dimension.

einzelnen Merkmalen aus dem gesamten Datensatz. Dabei gilt: je höherdimensional ein Problem ist, desto mehr Daten werden benötigt. Dies wird auch Fluch der Dimensionalität genannt, wie in Abb. 3.3 erklärt ist. Beispielhaft wird ein Problem in einem Hyperwürfel mit 10000 gleichverteilten Datenpunkten angenommen, die durch ein Teilgebiet angenähert werden sollen. Da in der Realität nie alle Daten vorhanden sind, kann immer nur ein Subbereich dafür verwendet werden, das Problem zu beschreiben. Wird ein Subgebiet mit Kantenlänge 0,1 betrachtet, stehen im 2-D Fall 100 Datenpunkte zur Verfügung. Da das Subgebiet 1% des Gesamtgebiet ausmacht, enthält es bei Gleichverteilung auch 1% der Punkte. Im 3-D Fall belegt der Würfel nur 0,1% des Gesamtvolumens und enthält folglich auch nur 10 Datenpunkte. Bei steigender Dimension reduziert sich die Anzahl der Datenpunkte im Unterraum nicht-linear. Die Beschreibung eines Problems wird dadurch komplexer. Somit sollte besonders bei geringer Datenmenge eine Reduktion der Dimension angestrebt werden [40].

Ziel ist es folglich, die Dimension des Problems zu reduzieren, die Aussagekraft der Daten aber zu erhalten. Dafür gibt es verschiedene Algorithmen zur Dimensionsreduktion. Beispiele sind die Singulärwertzerlegung (SWZ) und die Hauptkomponentenanalyse (HKA), welche die Kovarianzmatrix nutzen und deren Ziel es ist, die Varianz der Daten trotz reduzierter Dimension konstant zu halten. Bei der SWZ wird eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ in drei Matrizen U , Σ und V^T zerlegt, wie in (3.5) gezeigt ist. Dabei sind U und V orthogonal und Σ ist eine Diagonalmatrix mit den Singulärwerten.

$$A = U \Sigma V^T \quad \text{mit } U \in \mathbb{R}^{m \times m}, \Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}, V \in \mathbb{R}^{n \times n} \quad (3.5)$$

Die Singulärwerte σ_i berechnen sich aus der Wurzel der Eigenwerte λ_i der Matrix A , wie in (3.6) dargestellt ist.

$$\sigma_i = \sqrt{\lambda_i} \quad (3.6)$$

Nach der Durchführung der SWZ können bestimmte Singulärwerte auf null gesetzt werden und so die Dimension der Ursprungsmatrix reduziert werden. Da die Singulärwerte

meist stark abfallen, findet dabei wenig Informationsverlust statt. Das Verfahren wird oft eingesetzt, um die Anzahl an Pixeln bei der Bildverarbeitung zu reduzieren [41].

Die HKA ist ein Projektionsverfahren, das eng mit der SWZ verwandt ist. Dabei werden die Daten linear in einen neuen Koordinatenraum transformiert. Gleichzeitig bleibt ein großer Anteil der ursprünglichen Varianz in den Hauptkomponenten erhalten. Die Hauptkomponenten sind die dominanten Eigenvektoren der Kovarianzmatrix. Diese werden durch die größten Eigenwerte bestimmt. Nach der Berechnung können, ähnlich wie bei der SWZ, nicht relevante Eigenwerte der Kovarianzmatrix gleich null gesetzt und somit die Dimension der ursprünglichen Matrix reduziert werden. Die gewählten Eigenvektoren sind die Hauptkomponenten im neuen Koordinatenraum [42]. Beide Verfahren sind weit verbreitet bei der Dimensionsreduktion und werden oft angewendet, um komplexe Probleme in einer niedrigen Dimension darzustellen.

Neben verschiedenen Verfahren zur Dimensionsreduktion gibt es andere Ansätze, um Merkmale aus Rohdaten zu extrahieren. Oft werden statistische Parameter angewendet und beispielsweise die Korrelation zwischen den Eingangsdaten und den Zielwerten berechnet. Die Merkmale mit den höchsten Korrelationen werden anschließend in dem ML Modell verwendet. Ein Beispiel für einen Korrelationskoeffizienten ist die Pearson Korrelation r , welche den linearen Zusammenhang zwischen zwei Variablen beschreibt. Sie ist die normierte Kovarianz. Der Wertebereich der Pearson Korrelation liegt zwischen -1 und 1. Bei einem Wert von -1 liegt eine perfekte negative und bei einem Wert von 1 eine perfekte positive lineare Korrelation vor. Grob lassen sich die Bereiche $< |0,3|$ als schwache Korrelation, $|0,3| - |0,7|$ als mittlere Korrelation und $> |0,7|$ als starke Korrelation einteilen. Die Formel ist in (3.7) dargestellt.

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} \quad (3.7)$$

Ein weiterer Korrelationskoeffizient ist die Distanz Korrelation mit einem Wertebereich von 0 bis 1. Dabei entsprechen Werte nahe 0 einer geringen Korrelation und Werte nahe 1 einer hohen Korrelation. Die Distanz-Korrelation $dCor$, dargestellt in (3.8), ist das Verhältnis zwischen Kovarianz $dCov$ in (3.9) und der Distanz-Varianz $dVar$ in (3.15) [43]. A und B sind dabei Matrizen mit den Distanzen der Variablen x und y , wie in (3.10) und (3.11) dargestellt ist. Diese Matrizen werden mithilfe der Mittelwerte der i-ten Spalte $\bar{a}_i$, des Mittelwerts der j-ten Spalte $\bar{a}_{.j}$ und des gesamten Mittelwerts der Matrix $\bar{a}_{..}$, wie in (3.12) und (3.13) gezeigt ist, zentriert. Die Formel für die Bestimmung der Mittelwerte ist beispielhaft für die Matrix A in (3.14) dargestellt. Die Distanz-Varianz deckt dabei den Spezialfall ab, bei dem die Variablen der Distanz-Kovarianz identisch sind [44].

$$dCor(x, y) = \frac{dCov(x, y)}{\sqrt{dVar(x) \cdot dVar(y)}} \quad (3.8)$$

$$dCov^2(x, y) = \frac{1}{n^2} \sum_{i,j} A_{ij} B_{ij} \quad (3.9)$$

$$a_{ij} = \|x_i - x_j\| \quad (3.10)$$

$$b_{ij} = \|y_i - y_j\| \quad (3.11)$$

$$A_{ij} = a_{ij} - \bar{a}_{i\cdot} - \bar{a}_{\cdot j} + \bar{a}_{\cdot\cdot} \quad (3.12)$$

$$B_{ij} = b_{ij} - \bar{b}_{i\cdot} - \bar{b}_{\cdot j} + \bar{b}_{\cdot\cdot} \quad (3.13)$$

$$\bar{a}_{i\cdot} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n a_{ij}, \quad \bar{a}_{\cdot j} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n a_{ij}, \quad \bar{a}_{\cdot\cdot} = \frac{1}{n^2} \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \quad (3.14)$$

$$\text{dVar}(X) = \text{dCov}(X, X) \quad (3.15)$$

Beide Koeffizienten bieten die Möglichkeit, Merkmale aus Rohdaten zu extrahieren und somit die Dimension der Problems zu reduzieren. Während die Pearson Korrelation rein lineare Zusammenhänge beschreibt, werden mit der Distanz-Korrelation auch nicht-lineare Zusammenhänge abgedeckt.

3.1.2 Lineare Regression

Die lineare Regression basiert auf der Annahme, dass der Zusammenhang zwischen zwei Mengen X , bestehend aus einzelnen Datenpunkten $(x_{11}, \dots, x_{ik})$, und Y , bestehend aus $(y_1, \dots, y_i)$, linear approximiert werden kann. Dafür soll mithilfe von Gewichtungswerten w_i und einem Biaswert b eine Funktion $f : X \rightarrow Y$ ermittelt werden, die den Zusammenhang beschreibt. Diese Funktion ist in (3.16) gezeigt [45].

$$\hat{y}_i = w_1 x_{i1} + w_2 x_{i2} + \dots + w_k x_{ik} + b \quad (3.16)$$

Um das Problem zu lösen und die optimalen Gewichtungswerte zu finden, wird eine sogenannte Kostenfunktion verwendet, die den Fehler zwischen den realen Werten aus Y mit den prognostizierten Werten $\hat{y}_i$ vergleicht. Typischerweise wird dafür der quadratische Fehler verwendet. Die Kostenfunktion mit dem mittleren quadratischen Fehler ist in (3.17) gezeigt.

$$MSE(\hat{y}_i, y_i) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (\hat{y}_i - y_i)^2 \quad (3.17)$$

Es gibt zwei verschiedene Arten, die Gewichtungswerte zu berechnen. Die erste Möglichkeit ist die Verwendung der Normalengleichung, bei der die Gewichtsmatrix mit einer einzigen Formel bestimmt werden kann, welche die Kostenfunktion minimiert. Die Normalengleichung ist in (3.18) dargestellt.

$$\mathbf{W} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y} \quad (3.18)$$

Die Normalengleichung bietet eine Lösung ohne iterative Anpassung der Gewichtungswerte. Dennoch kann sie nicht immer angewendet werden. Grund dafür ist die numerische

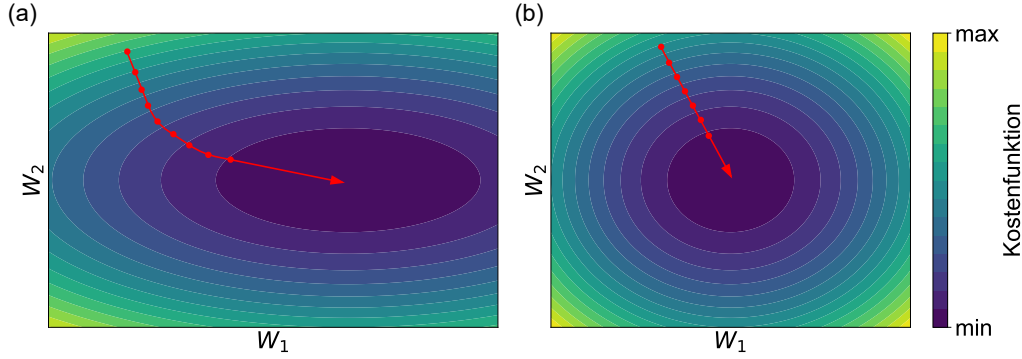


Abbildung 3.4: Gradientenverfahren dargestellt anhand einer konvexen Kostenfunktion mit unskalierten Merkmalen in (a) und skalierten Merkmalen in (b) nach [46]. Ziel dabei ist es, die Gewichtungswerte zu bestimmen, bei denen die Kostenfunktion minimal ist.

Instabilität, wenn die Matrix $(X^T X)$ schlecht konditioniert ist. Dies ist der Fall, wenn hohe Korrelationen zwischen den einzelnen Merkmalen bestehen. Zusätzlich ist die Berechnung der Inversen rechen- und speicherintensiv. Ein Mittel, um die Konditionierung der Matrix zu bestimmen, ist die Berechnung der Determinanten. Liegt diese nahe bei 0, ist die Matrix nahezu singulär, was die Bestimmung der Gewichtungswerte erschwert und zusätzlich die Gefahr für numerische Fehler erhöht.

Die zweite Möglichkeit, die Gewichtungswerte zu bestimmen, ist das Gradientenverfahren. Dabei werden die Gewichtungswerte iterativ angepasst und die Kostenfunktion schrittweise minimiert. Zusätzlich wird hierbei eine Lernrate α eingeführt, die beschreibt, in welchem Maß die Gewichtungswerte pro Iteration angepasst werden. Wird die Lernrate zu klein gewählt, ist eine höhere Anzahl an Iterationen nötig, bevor der Fehler konvergiert. Bei einer zu großen Lernrate kann das Minimum der Kostenfunktion übersprungen und somit nicht erreicht werden. Besonders bei nicht quadratischen Funktionen ist dies eine Gefahr, die bei der Wahl der Lernrate berücksichtigt werden muss. Deshalb werden hauptsächlich konvexe Funktionen als Verlustfunktion verwendet, da diese schüsselförmig sind und keine lokalen Minima aufweisen. Als Beispiel ist eine Kostenfunktion in Abb. 3.4 für unskalierte Merkmale in (a) und gleich skalierte Merkmale in (b) dargestellt. Beim Gradientenverfahren werden die Gewichte schrittweise so angepasst, dass die Kostenfunktion minimiert wird. Ist beispielsweise der Wertebereich eines Merkmals kleiner als der eines anderen Merkmals, ist auch eine größere Änderung des dazugehörigen Gewichts nötig, um das Minimum der Kostenfunktion zu erreichen. Daraus resultiert die längliche Form der Kostenfunktion [46].

Um das Gradientenverfahren zu implementieren, müssen die partiellen Ableitungen nach den einzelnen Gewichtungswerten nach (3.19) berechnet werden.

$$\frac{\partial}{\partial w_k} MSE(\mathbf{W}) = \frac{2}{m} \sum_{i=1}^m (\mathbf{W}^T x_i - y_i) x_k \quad (3.19)$$

Die Ableitung wird anschließend genutzt, um die Gewichtungswerte mit der Lernrate α anzupassen, wie in (3.20) gezeigt wird.

$$w_{t+1} = w_t - \alpha \frac{\partial}{\partial w} MSE(\mathbf{W}) \quad (3.20)$$

Auch bei linearen Modellen, kann es zu einer Überanpassung kommen. Drei Regularisierungsverfahren, die dagegen eingesetzt werden, sind die Lasso-Regression, die Ridge-Regression und die Elastic Net Regression. Dabei wird der ursprünglichen Kostenfunktion J ein weiterer Term zur Regularisierung hinzugefügt. Bei der Lasso-Regression ist dies die L_1 -Norm der Gewichtungswerte, wie in (3.21) gezeigt ist.

$$J(w) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (\hat{y}_i - y_i)^2 + \lambda \sum_{k=1}^p |w_k| \quad (3.21)$$

Dabei ist λ ein Hyperparameter, durch den festgelegt wird, in welchem Maß regularisiert wird. Im Gegensatz zur Lasso-Regression wird bei der Ridge-Regression die L_2 -Norm als Strafterm verwendet. Die dazugehörige Formel ist in (3.22) dargestellt.

$$J(w) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (\hat{y}_i - y_i)^2 + \lambda \sum_{k=1}^p w_k^2 \quad (3.22)$$

Bei beiden Regularisierungsverfahren werden Strafterme für hohe Gewichtungswerte eingeführt. Während bei der Ridge-Regression hohe Gewichtungswerte reduziert werden, können sie bei der Lasso-Regression sogar auf 0 gesetzt werden. Das dritte Verfahren, die Elastic Net Regression, ist die Kombination von Lasso- und Ridge Regression. Mit einem zusätzlichen Hyperparameter β wird festgelegt, wie beide Regressionsverfahren kombiniert werden. Die Formel dafür ist in (3.23) gezeigt [46].

$$J(w) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (\hat{y}_i - y_i)^2 + \beta \lambda \sum_{k=1}^p |w_k| + (1 - \beta) \lambda \sum_{k=1}^p w_k^2 \quad (3.23)$$

3.1.3 Stützvektormaschine

Die SVM wurde ursprünglich für die binäre Klassifikation entwickelt. Sie basiert auf der Trennung von Datenpunkten durch Trennlinien oder Trennebenen mit größtmöglichem Abstand zu den jeweiligen Datenpunkten. Die nächstgelegenen Punkte zur Trennebene sind entscheidend für die Lage und werden als Stützvektoren bezeichnet [46]. Im Gegensatz zur Klassifikation, bei der der Abstand zwischen den Punkten und der Trennebene maximiert wird, wird der Abstand bei der Stützvektorregression (SVR) minimiert, um den Verlauf der Datenpunkte zu approximieren. Ähnlich wie bei jedem Regressionsproblem wird eine Funktion $f(x)$ gesucht, um Zielwerte y_i zu schätzen, die durch Merkmale x_{ij} beschrieben werden. Um die Regression zu verstehen, müssen erst die Grundlagen der Stützvektor-Klassifikation berücksichtigt werden. Dabei wird zwischen der Soft-Margin und der Hard-Margin Klassifikation unterschieden. Als Margin wird der Abstand zwischen den nächsten Punkten und der Trennebene bezeichnet. Bei der Hard-Margin Klassifikation wird die

lineare Separierbarkeit vorausgesetzt. Die Form der Trennebene mit Gewichtungswerten w und Bias b ist in (3.24) dargestellt [47].

$$w^\top x + b = 0 \quad (3.24)$$

Die nächst gelegenen Punkte, also die Stützvektoren, liegen auf parallelen Grenzebenen zur Trennebene und können durch (3.25) beschrieben werden.

$$w^\top x + b = \pm 1 \quad (3.25)$$

Der Abstand zwischen Grenzebene und Trennebene, also folglich der Abstand zwischen den Stützvektoren und der Trennebene, ist in beide Richtungen gleich. Die Distanz d zwischen einem Punkt und einer Ebene kann mit (3.26) berechnet werden. Da der Wert für die Stützvektoren ± 1 beträgt, kann der Abstand zwischen den Grenzebenen r mit (3.27) bestimmt werden [48].

$$d = \frac{|w^\top x + b|}{\|w\|} \quad (3.26)$$

$$r = \frac{1}{\|w\|} + \frac{1}{\|w\|} = \frac{2}{\|w\|} \quad (3.27)$$

Dadurch kann das Maximierungsproblem für den Abstand r in ein Minimierungsproblem für w umgewandelt werden, in welchem die Zielfunktion J in (3.28) minimiert wird. Dabei muss die Nebenbedingung in (3.29) erfüllt sein.

$$J(w) = \frac{1}{2} \|w\|^2 \quad (3.28)$$

$$y_i(w^\top x + b) \geq 1 \quad (3.29)$$

Für die Lösung des Problems mit Nebenbedingung werden Lagrange Multiplikatoren verwendet. Dabei wird die Nebenbedingung mit der Zielfunktion in (3.30) kombiniert. Das entstandene duale Problem kann gelöst werden, indem die Lagrange Funktion L hinsichtlich w und b minimiert und hinsichtlich α maximiert wird. Dazu wird L jeweils nach w und b abgeleitet und gleich 0 gesetzt. Die Ergebnisse können anschließend wieder in L eingesetzt werden, woraus die Funktion $W(\alpha)$, dargestellt in (3.31), entsteht [49].

$$L(w, b, \alpha) = \frac{1}{2} \|w\|^2 - \sum_{i=1}^m \alpha_i (y_i(w^\top x_i + b) - 1) \quad (3.30)$$

$$W(\alpha) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m y_i y_j x_i^\top x_j \alpha_i \alpha_j + \sum_{j=1}^m \alpha_j \quad (3.31)$$

Mit den Karush-Kuhn-Tucker (KKT) Bedingungen für die Optimierung von nicht-linearen Optimierungsproblemen mit Nebenbedingungen und den optimalen Lösungen α^* kann w mit (3.32) und b mit (3.33) berechnet werden [49, 50].

$$w = \sum_{i=1}^m \alpha_i^* y_i x_i \quad (3.32)$$

$$b = y_i - \sum_{i=1}^m \alpha_i^* y_i x_i^\top x_j \quad (3.33)$$

Wird statt der Klassifikation eine Regression durchgeführt, wird keine Trennebene, sondern eine Ebene für eine bestmögliche Approximation der Daten gesucht. Zur Verlustfunktion wird zusätzlich der Parameter ϵ eingeführt, der einen Toleranzbereich definiert. In diesem Bereich werden Fehler toleriert und nur größere Abweichungen bestraft. Die gesuchte Funktion $f(x)$ und die Verlustfunktion sind in (3.34) und (3.35) dargestellt.

$$f(x) = w^\top x + b \quad (3.34)$$

$$L_\epsilon(y_i, f(x)) = \max(0, |y_i - f(x)| - \epsilon) \quad (3.35)$$

Die Zielfunktion $J(w)$ in (3.36) wird im Regressionsfall also nicht maximiert, sondern minimiert. Zusätzlich werden die Parameter C für die Regularisierung und ζ_i sowie ζ_i^* eingeführt, die Abweichungen außerhalb des ϵ -Toleranzbereichs erlauben, um das Problem zu lösen.

$$J(w) = \frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^m (\zeta_i + \zeta_i^*) \quad (3.36)$$

Ähnlich wie bei der Klassifikation werden Lagrange Multiplikatoren eingeführt, um das Problem zu lösen. Dabei wird das Maximum der Funktion in (3.37) gesucht. Daraus folgt die Schätzfunktion und somit die gesuchte Funktion der SVR in (3.38). In beiden Formeln gibt $K(x_i, x_j)$ eine Kernel Funktion an, die es ermöglicht, nicht-lineare Zusammenhänge in Daten zu modellieren [49].

$$W(\alpha, \alpha^*) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m (\alpha_i - \alpha_i^*)(\alpha_j - \alpha_j^*) K(x_i, x_j) - \epsilon \sum_{i=1}^m (\alpha_i + \alpha_i^*) + \sum_{i=1}^m y_i (\alpha_i - \alpha_i^*) \quad (3.37)$$

$$f(x) = \sum_{i=1}^m (\alpha_i - \alpha_i^*) K(x_i, x_j) + b \quad (3.38)$$

Die Kernel Funktion wird verwendet, um die Daten in eine höhere Dimension zu transformieren, ohne den Rechenaufwand massiv zu erhöhen. Sind Daten im Originalraum nicht linear trennbar, kann der Kernel Trick angewendet werden, um die Daten zu transformieren und somit linear separierbar zu machen. Der Kernel-Trick mit Transformation der ursprünglichen Daten in einen höher-dimensionalen Raum zur linearen Separierung ist in Abb. 3.5 visualisiert [51].

Kernel Funktionen spielen aber nicht nur bei SVMs, sondern auch bei GPRs eine wichtige

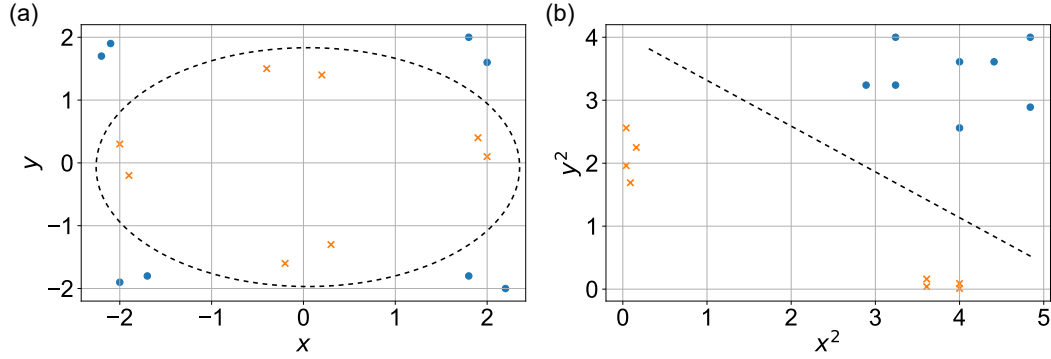


Abbildung 3.5: Originalmerkmalsraum mit nicht-linearer Klassifikation (a) und transformierter Merkmalsraum durch Quadrierung mit linearer Klassifikation (b) nach [51].

Rolle. Diese werden im nächsten Abschnitt genauer erläutert sowie die mathematischen Grundlagen von Kernel Funktionen genauer definiert.

3.1.4 Gauß-Prozess-Regression

Eine GPR ist ein nicht parametrisches Wahrscheinlichkeitsmodell für die Vorhersage von Verteilungen von Variablen. Ähnlich wie bei der linearen Regression wird eine Funktion f in (3.39) gesucht, die eine Datenverteilung approximieren kann. Zusätzlich wird der Term ε eingeführt, der das Rauschen der Daten beschreibt. Es wird angenommen, dass dieser Term unabhängig von der Funktion ist, normalverteilt um den Mittelwert null liegt und die Standardabweichung σ^2 besitzt [52].

$$y = f(x) + \varepsilon \quad (3.39)$$

$$\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2) \quad (3.40)$$

Um die nicht-lineare Funktion zwischen Eingangs- und Ausgangsvariablen zu approximieren, wird eine sogenannte Mapping-Funktion verwendet. Die explizite Berechnung dieser Mapping Funktion kann aber sehr komplex und rechenaufwändig werden. Deswegen werden Kernel Funktionen verwendet, die den Skalarproduktraum zwischen zwei Variablen berechnen, ohne die Transformation der Daten wie bei der Mapping Funktion direkt auszuführen. Die Kernel Funktion in (3.41) wird genutzt, um die Zusammenhänge zwischen Datenpaaren nachzubilden.

$$k(x_i, x_j) = \phi(x_i)^\top \phi(x_j) \quad (3.41)$$

Jede Funktion zwischen zwei Regressionsvektoren, die als Skalarprodukt zwischen zwei Basisfunktionen, wie in (3.41) gezeigt ist, dargestellt werden kann, ist eine Kernel Funktion.

Das bedeutet auch, dass jede Funktion eine Kernel Funktion ist, wenn sie eine Gram Matrix K mit den einzelnen Kernel Funktionen generiert. Daraus folgt, dass $k_{i,j} = k_{j,i}$ gilt, wenn $k_{i,j} = [K_{i,j}]$ gilt. Bekannte Beispiele für Kernel Funktionen sind der lineare Kernel mit dem Biasterm σ_b^2 , einem Skalierungsfaktor für die Varianz σ_v^2 und dem Parameter c zur Zentrierung der Daten in (3.42), der Periodische Kernel mit einem Parameter p für die Periode und der Längenskala l in (3.43), der Radial Basis Function (RBF) Kernel in (3.44) mit der Längenskala l und der Varianz σ^2 oder der Rational Quadratic Kernel mit dem zusätzlichen Parameter α , der die Veränderung der Längenskalen beschreibt in (3.45) [53].

$$k(x, x') = \sigma_b^2 + \sigma_v^2(x - c)(x' - c) \quad (3.42)$$

$$k(x, x') = \sigma^2 \exp \left(-\frac{2}{l^2} \sin^2 \left(\frac{\pi}{p} \|x - x'\| \right) \right) \quad (3.43)$$

$$k(x, x') = \sigma^2 \exp \left(-\frac{\|x - x'\|^2}{2l^2} \right) \quad (3.44)$$

$$k(x, x') = \sigma^2 \left(1 + \frac{\|x - x'\|^2}{2\alpha l^2} \right)^{-\alpha} \quad (3.45)$$

Bei der GPR wird die Verteilung der y Werte berechnet. Dies geschieht durch die bedingte Wahrscheinlichkeit $p(y|x)$ von y in Abhängigkeit von x . Die Wahrscheinlichkeit für die Modellierung soll anhand der gegebenen Daten maximiert werden. Unterschieden wird dabei zwischen der Prior und der Posterior Verteilung. Die Prior Verteilung in (3.46) wird als grundlegende Funktion definiert. Dabei wird eine Mittelwertsfunktion $m(x)$ und eine Kernel Funktion $k(x, x')$ verwendet [54, 55].

$$f(x) \sim \mathcal{GP}(m(x), k(x, x')) \quad (3.46)$$

Die Posterior Verteilung wird anschließend anhand der vorliegenden Daten und der Wahrscheinlichkeit für die Modellierung mit einer bestimmten Funktion f in (3.47) berechnet. Die Evidenz ist dabei die Wahrscheinlichkeit, die Zielwerte y ohne die Abhängigkeit der Parameter w zu approximieren [52].

$$p(f|x, y, w) = \frac{\text{Wahrscheinlichkeit} \times \text{Prior}}{\text{Evidenz}} = \frac{p(y|f, x, w)p(f|w)}{p(y|x, w)} \quad (3.47)$$

Die GPR kombiniert Bayesische Modellierungsmethoden mit Kernel Funktionen. Bei dem eigentlichen Regressionsproblem wird das Modell durch die Mittelwertsfunktion und die Kovarianzfunktion beschrieben. Die Mittelwertsfunktion beschreibt dabei den erwarteten Wert für jeden Punkt x , während die Kovarianz- oder Kernel Funktion die Korrelation zwischen den Daten beschreibt. Für Eingabedaten (x, y) mit den jeweiligen Matrizen (X, Y) ist die Mittelwertsfunktion $m(x)$ in (3.48) und die Kovarianzfunktion $cov(f)$ in (3.49) dargestellt. I beschreibt dabei die Einheitsmatrix, s^2 das Rauschen und K die Gram Matrix mit den Kernel Funktionen $K_{ij} = k(x_i, x_j)$ [56].

$$m(x) = k(x', X)[K + s_{noise}^2 I]^{-1}Y \quad (3.48)$$

$$\text{cov}(f) = k(x', x') - k(x', X)[K + \sigma^2 I]^{-1}k(X, x') \quad (3.49)$$

Das Ergebnis der GPR ist eine Verteilung von Funktionen. Um dies in eine Vorhersage von Punkten zu transformieren, wird eine Verlustfunktion L eingeführt, die anschließend mithilfe der Daten (x^*, y^*) minimiert wird. Grundsätzliche Annahme bei der GPR ist die Normalverteilung. Deshalb wird von der Funktionsverteilung der Mittelwert μ^* gebildet, was die geringsten Fehler bei einer normalverteilten Unsicherheit bietet. Die Formeln für die optimale Vorhersage sowie der Erwartungswert der Posterior Verteilung μ^* sind in (3.50) und (3.51) angegeben [57].

$$y_{\text{opt}}|x^* = \text{argmin} \int L(y^*, y_{\text{pred}}) \times p(y^*|x^*, X, Y) dy^* \quad (3.50)$$

$$\mu^* = k_{X, x^*}^\top (K + \sigma^2 I)^{-1} Y \quad (3.51)$$

Die Auswahl der Kernel Funktion ist entscheidend, um die Daten zu approximieren. Einige Kernels wurden bereits vorgestellt. Diese können unterschieden werden in isotropische und nicht-isotropische Funktionen. Ein isotropischer Kernel besitzt nur eine Längenskala. Die Eingangsvariablen werden somit gleich behandelt, was zu Problemen führen kann, wenn die Relevanz von einzelnen Eingangsvariablen unterschiedlich ist. Bei einem nicht-isotropischen Kernel, beispielsweise einem Automatic Relevance Determination (ARD) Kernel, kann jede Eingangsvariable eine eigene Längenskala aufweisen. Dadurch wird die Relevanz der einzelnen Eingangsvariablen analysiert und der Einfluss von bestimmten Variablen reduziert. Im Gegensatz zur Modellierung von glatten Funktionen mit isotropischen Kernen, kann es bei dem ARD Kernel zur Überanpassung kommen. Die nicht-isotrope Variante des RBF Kernels mit einer Diagonalmatrix für die verschiedenen Längenskalen ist in (3.52) gezeigt [55].

$$k(x, x') = \sigma^2 \cdot \exp \left(-0.5(x - x')^\top \text{diag}\left(\frac{1}{l}\right)(x - x') \right) \quad (3.52)$$

Zusätzlich ist es möglich, verschiedene Kernel zu kombinieren, um eine Datenverteilung bestmöglich zu approximieren. Eine GPR ist ein Wahrscheinlichkeitsmodell, das neben der Punktvorhersage auch die Wahrscheinlichkeiten der Schätzungen berechnet. Besonders dadurch und auch durch die Flexibilität basierend auf den Kernel Funktionen ist eine GPR besonders gut dafür geeignet Zusammenhänge in vergleichsweise kleinen Datensätzen zu bestimmen und gilt deshalb als mächtiges Werkzeug für die Zeitreihenanalyse.

3.2 Künstliche Neuronale Netze

KNNs sind Systeme für die Informationsverarbeitung, deren Grundstruktur auf der Funktionsweise des menschlichen Nervensystems und Gehirns basiert. Grundlegende Einheit eines KNN ist das Modell eines Neurons, welches von McCulloch und Walter Pitts 1943 entwickelt wurde [58]. Das erste einfache Modell, das sogenannte Perzeptron, wurde 1957 von Frank Rosenblatt entwickelt und gilt bis heute als Grundlage für KNNs [59]. Der Durchbruch gelang aber erst ab 1990, als grundlegende Fortschritte im Bereich des Deep

Learnings erzielt wurden. Deep Learning beschreibt die Anwendung von mehrschichtigen KNNs. Mittlerweile existieren neben den vorwärts gerichteten Netzen, wie dem Multi Layer Perceptron (MLP), unter anderem das Convolutional Neural Network (CNN) als gefaltetes neuronales Netz sowie RNNs, bei denen der Informationsfluss auch rückwärts gerichtet sein kann [60]. Bekannte Vertreter dafür sind Netzarchitekturen wie das Long Short-Term Memory (LSTM) und das Gated Recurrent Unit (GRU). Besonders im Bereich der Sprachverarbeitung und der generativen KI zeigt die Transformer-Architektur die besten Ergebnisse [61]. In diesem Abschnitt werden die Theorie der verschiedenen KNNs vorgestellt und die Unterschiede in der jeweiligen Struktur verdeutlicht. Beginnend mit vorwärts gerichteten Netzen werden anschließend gefaltete sowie rekurrente Netze erläutert.

3.2.1 Multi-Layer Perceptron

Ein MLP ist ein vergleichsweise simples vorwärts gerichtetes neuronales Netz. Dabei werden die Informationen von der Eingangsschicht bis hin zur Ausgabeschicht in eine Richtung weiter gegeben. Ein KNN besteht aus einer Eingabeschicht, einer oder mehreren Zwischenschichten und einer Ausgabeschicht. Die kleinste Einheit jeder Schicht ist das künstliche Neuron, bei dem alle Eingabesignale x_i mit den dazugehörigen Gewichtungswerten w_i multipliziert und anschließend mit dem Biaswert b summiert werden. Die Summe wird anschließend in einer Aktivierungsfunktion θ genutzt, bei der das Ausgabesignal des Neurons bestimmt wird, wie in (3.53) gezeigt ist. Dabei gibt es verschiedene Funktionen, die entweder einzeln oder in Kombination in KNNs genutzt werden. Häufig verwendete Funktionen sind Sigmoidfunktionen, wie die logistische Funktion in (3.54), der Tangens Hyperbolicus in (3.55), die Heaviside Funktion in (3.56) und die Rectified Linear Unit (ReLU) Funktion in (3.57) [62].

$$z(x) = \sum_{i=1}^m w_i x_i + b \quad (3.53)$$

$$\theta(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}} \quad (3.54)$$

$$\theta(z) = \frac{e^z - e^{-z}}{e^z + e^{-z}} \quad (3.55)$$

$$\theta(z) = \begin{cases} 0, & \text{wenn } z \leq 0 \\ 1, & \text{wenn } z > 0 \end{cases} \quad (3.56)$$

$$\theta(z) = \begin{cases} 0, & \text{wenn } z \leq 0 \\ z, & \text{wenn } z > 0 \end{cases} \quad (3.57)$$

Besitzt ein Netz mehrere Schichten an Neuronen, wird von einem MLP gesprochen. Dabei werden die verschiedenen mathematischen Funktionen eines Neurons miteinander verschachtelt. Das berechnete Signal der Aktivierungsfunktion wird weitergeben und ist in Kombination mit den jeweiligen Gewichtungswerten wieder Eingangssignal in das nächste Neuron. Die Struktur sowie das Wirkprinzip eines MLP ist in Abb. 3.6 dargestellt.

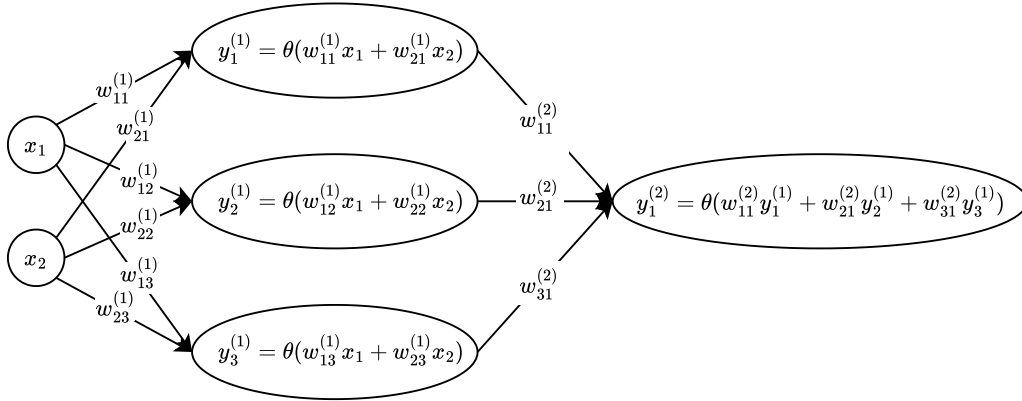


Abbildung 3.6: Wirkprinzip eines vorwärts gerichteten neuronalen Netzes mit einer Zwischenschicht nach [63].

Die Gewichtungswerte werden in einem ersten Schritt zufällig initialisiert und anschließend wird das Ergebnis des KNN berechnet. Dies wird mit dem realen Zielwert verglichen und die Gewichtungswerte werden dementsprechend angepasst. Dies wird als Backpropagation Algorithmus bezeichnet. Ausgehend von der Ausgabeschicht, in der berechneter und realer Zielwert direkt verglichen werden können, werden rückwärts von Ausgabeschicht zu Eingabeschicht die Gewichte angepasst. Dafür wird die sogenannte Delta-Regel verwendet. Für die Ausgabeschicht wird der Delta Wert nach (3.58) berechnet. Dabei ist θ' die Ableitung der Aktivierungsfunktion, y der reale Zielwert, $\hat{y}$ der berechnete Zielwert und x der Eingabewert. Der hochgestellte Index zeigt die Schicht, in diesem Fall die Ausgabeschicht, an [64].

$$\delta = \theta'(x^{(a)})(y - \hat{y}^{(a)}) \quad (3.58)$$

Für eine Zwischenschicht h wird der Delta Wert nach (3.59) berechnet.

$$\delta = \theta'(x^{(h)}) \sum_{h+1} w^{(h+1)} \delta^{(h+1)} \quad (3.59)$$

Die Gewichte zwischen zwei Schichten $h1$ und $h2$ werden dann mithilfe der Delta-Werte und der Lernrate α angepasst. Dies ist in (3.60) gezeigt.

$$\Delta w^{(h1,h2)} = \alpha y^{(h1)} \delta^{(h2)} \quad (3.60)$$

Durch den Backpropagation Algorithmus kann das MLP trainiert und die Gewichte in jeder Iteration angepasst werden. Ein Problem, das besonders auch bei KNNs auftritt, ist die Überanpassung. Analog zu anderen ML Algorithmen werden dagegen Regularisierungsverfahren angewendet. Bei den KNNs werden hauptsächlich drei Verfahren zur Regularisierung und damit zur Reduzierung der Überanpassung verwendet.

Das erste Verfahren ist das Early Stopping. Dabei wird neben dem Trainingsfehler auch der Validierungsfehler ausgewertet. Nachdem beide Fehler erst gegen einen bestimmten Wert konvergieren, fällt ab einer gewissen Iterationsanzahl der Trainingsfehler weiter, während der Validierungsfehler wieder steigt und es damit zur Überanpassung kommt. Beim Early Stopping wird dieser Zeitpunkt erkannt und das Modelltraining abgebrochen. Dabei wird selbst definiert, wie viele Iterationen der Validierungsfehler steigen darf, bis das Training beendet wird. Besonders wenn die Fehler stark schwanken, kann die Wahl dieses Wertes zu Problemen führen und das Training zu früh abgebrochen werden, was zu schlechteren Ergebnissen führen kann. Dennoch ist dieses Verfahren leicht zu implementieren und zusätzlich kann es bei trainingsintensiven Problemen zu einer deutlichen Zeitersparnis kommen.

Die zweite Methode ist das Dropout-Verfahren. Dabei werden Neuronen meist zufällig ausgewählt und gleich null gesetzt. Das heißt, dass diese Neuronen keine Informationen weitergeben. Besonders große Netze mit einer hohen Anzahl an Neuronen haben redundante Verbindungen. Zusätzlich wird dadurch verhindert, dass einzelne Neuronen einen höheren Einfluss auf das Ergebnis haben, was die Robustheit des Modells erhöht. Auch werden hohe Abhängigkeiten zwischen Neuronen reduziert, was die Generalisierbarkeit des Modells erhöht. Nachteil dabei ist, dass der Parameter der Dropout Rate optimiert werden muss. Bei einer zu hohen Dropout Rate kann es zur Unteranpassung des Modells kommen. Außerdem wird der Rechenaufwand durch das ständige Ein- und Ausschalten der Neuronen erhöht. Dennoch ist das Dropout-Verfahren ein effektives Verfahren, um die Überanpassung zu verhindern.

Die dritte Methode ist die Batch-Normalisierung. Dabei werden die Schichten in jeder Iteration mithilfe des Mittelwerts und der Standardabweichung normalisiert. Für eine Anzahl mit m Batches und Eingangswerten x_i ist die Berechnung des Mittelwerts μ in (3.61), der Standardabweichung σ in (3.62) und der normalisierten Werte in (3.63) dargestellt. Dabei ist ϵ ein kleiner Wert, um die Division durch 0 zu verhindern. Neben der Verbesserung der Generalisierbarkeit wird auch die Abhängigkeit zur Gewichtsinitialisierung reduziert und das Training stabilisiert, da dadurch das Risiko von sehr geringen oder sehr hohen Gradienten innerhalb der Netze verringert wird. Nachteile sind die erhöhte Komplexität und der damit verbundene höhere Rechenaufwand [65].

$$\mu = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m x_i \quad (3.61)$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (x_i - \mu)^2 \quad (3.62)$$

$$\tilde{x}_i = \frac{x_i - \mu}{\sqrt{\sigma^2 + \epsilon}} \quad (3.63)$$

Trotz der Anfälligkeit für Überanpassung sind MLPs gut dafür geeignet, kontinuierliche Funktionen verschiedener Komplexität zu approximieren. Egal ob bei Klassifikations- oder

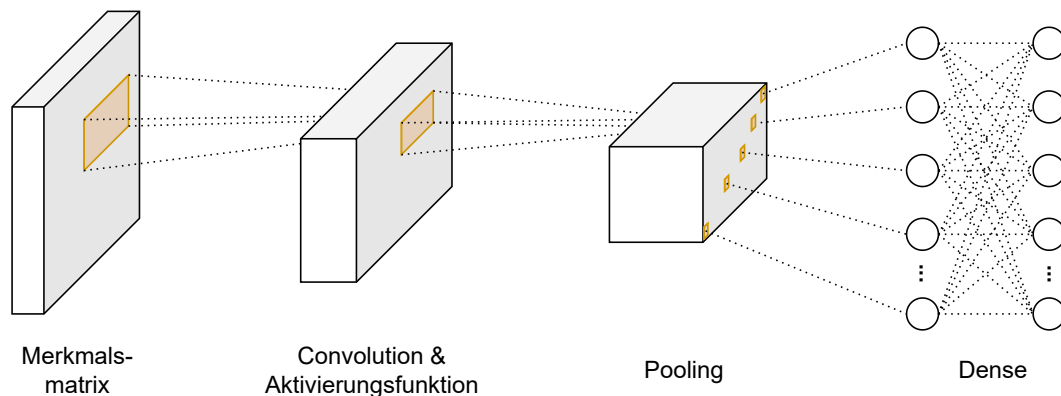


Abbildung 3.7: Wirkprinzip eines CNN mit Merkmalsmatrix, Convolution Schicht, Aktivierungsfunktion, Pooling Schicht und einer Dense Schicht nach [66].

Regressionsproblemen, zeigen sie bei der Vorhersage von kontinuierlichen oder diskreten Variablen gute Ergebnisse. Zusätzlich gelten sie als Grundlage für die Entwicklung weiterer KNNs, wie den CNNs und den RNNs, welche in den folgenden Abschnitten erläutert werden.

3.2.2 Convolutional Neural Network

Das CNN wurde ursprünglich für die Bildverarbeitung entwickelt. Dennoch wird es mittlerweile auch erfolgreich in der Sprachverarbeitung und der Analyse von Zeitreihen verwendet. Üblicherweise besteht eine CNN Schicht aus fünf Elementen. Aufgrund der englischen Sprachherkunft wird, nach der Einführung der Begriffe auf Deutsch und Englisch, meist nur der englische Begriff verwendet:

- Merkmalsmatrix/Feature Matrix
- Faltungsschicht/Convolution Layer
- Aktivierungsfunktion/Activation Function
- Pooling Schicht/Pooling Layer
- Vollständig verbundene Schicht/Dense Layer

Die Merkmalsmatrix ist das initiale Eingangssignal in das Netzwerk. Anschließend wird diese mit Filtermatrizen, vorwiegend Kernel-Funktionen, verarbeitet, um mehr Informationen aus der Merkmalsmatrix zu extrahieren. Nach der Anwendung einer Aktivierungsfunktion werden in der Pooling Schicht redundante und unwichtige Informationen verworfen. Eine Dense Schicht ist ähnlich wie beim MLP eine Schicht, in der die Neuronen vollständig miteinander verbunden sind [66]. Der Aufbau eines CNN ist in Abb. 3.7 visualisiert.

In der Convolution Schicht werden Kernels als Filter genutzt, um die Merkmalsmatrix zu "falten". Der Filter wird jeweils über Teilbereiche der Merkmalsmatrix geschoben, um lokale Informationen zu extrahieren. Dabei werden die Merkmale und der Kernel elementweise

miteinander multipliziert. Für eine $m \times n$ große Matrix ergibt das die in (3.64) dargestellte Formel mit der Convolution Matrix ω_{CNN} mit Dimension (K, L) .

$$z(m, n) = \sum_{k=0}^{K-1} \sum_{l=0}^{L-1} \omega_{CNN}(k, l) x(m + k, n + l) \quad (3.64)$$

Ein Vorteil der Convolution Schicht ist dessen Äquivarianz. Dies bedeutet, dass die Ausgabe auf dieselbe Weise transformiert wird wie die Eingabe. So ist eine Funktion $f(x)$ äquivariant zu $g(x)$, wenn $f(g(x)) = g(f(x))$ gilt. Bei der Verarbeitung von Bilddaten werden dadurch Objekte, die im Eingabebild verschoben wurden, auch in der Ausgabe der Convolution Schicht verschoben. Bezogen auf die Verarbeitung von Zeitreihen bedeutet dies, dass bestimmte Muster in Zeitreihen auch zu einem späteren Zeitpunkt erkannt werden, wenn diese in den Eingabedaten verschoben wurden. Dadurch können Muster leichter identifiziert werden, egal an welcher Position sie in den Daten vorkommen. Hinzu kommt, dass in einer Convolution Schicht die Parameter geteilt werden. Im Vergleich zum MLP, bei dem jedem Element ein Gewichtungswert zugeordnet ist, sind die Gewichtungswerte bei der Convolution Schicht miteinander verbunden. So wird statt getrennter Parameter für jedes einzelne Element nur ein Gesamtsatz an Parametern gelernt. Dadurch wird die Speicheranforderung reduziert und das Modelltraining beschleunigt [67].

Die Ergebnisse der Faltungsschicht werden im Anschluss als Eingabe in eine Aktivierungsfunktion verwendet, bevor diese in der Pooling Schicht weiter verarbeitet werden. Dabei wird die Größe der Datenmatrix reduziert und es werden entsprechend der angewendeten Pooling Funktion nur statistische Parameter nahe gelegener Datenpunkte behalten. Beispielsweise bei der sogenannten max pooling Funktion werden nur die Maximalwerte in einem definierten Bereich behalten. Weitere Beispiele für Pooling Operationen sind die Berechnung des Durchschnitts oder die Berechnung der L_2 -Norm. Im Gegensatz zur Convolution Schicht ist die Pooling Schicht invariant gegenüber kleinen Transformationen. Das heißt, dass die Bedeutung der Position von einem Muster in den Daten reduziert wird. Statt der Position des Musters ist die reine Existenz des Musters relevanter. Dadurch wird das Modell robuster und die Gefahr der Überanpassung kann reduziert werden. Besonders bei der Verarbeitung von Zeitreihen mit potentiell verrauschten Daten können durch Pooling Schichten die Abhängigkeiten von unwichtigen Schwankungen reduziert werden [67].

Obwohl CNNs ursprünglich für die Verarbeitung von Bilddaten entwickelt wurden, zeigen sie auch gute Ergebnisse für Zeitreihen. Vorteile sind die Erkennung von Mustern unabhängig von ihrem Auftreten in den Zeitreihen, die Robustheit gegenüber Rauschen und die reduzierte Gefahr von Überanpassung. Nachteile sind der mögliche Informationsverlust durch die Pooling Schichten und die begrenzte Fähigkeit zur Modellierung von Langzeitabhängigkeiten. Besonders für die Approximierung von Abhängigkeiten über längere Zeit sind RNNs, welche im folgenden Abschnitt genauer erläutert werden, eine Alternative.

3.2.3 Rekurrente Neuronale Netze

RNNs wurden entwickelt, um sequentielle Informationen zu verarbeiten. Dabei ist die Ausgabe zu einem definierten Zeitpunkt nicht nur von den vorhergehenden Eingaben, sondern auch von den vorhergehenden Berechnungen im Netzwerk abhängig. Dadurch entwickelt

das Netz ein Gedächtnis für vergangene Eingaben, die im sogenannten hidden state, also im verdeckten Zustand, der Elemente gespeichert werden. Dabei können in der Theorie beliebig lange Sequenzen gespeichert werden. Die Gewichte werden über die Zeit angepasst. In der Praxis kommt es aber bei zu großen RNNs zu sehr kleinen oder sehr großen Gradienten im Netz. Diese Probleme werden verschwindende Gradienten/vanishing gradient und explodierende Gradienten/exploding gradient genannt. Um das Problem zu verstehen, muss der Einfluss der Verlustfunktion L auf die Gewichtungswerte W betrachtet werden. Für die Anpassung über mehrere Zeitschritte t wird die Kettenregel genutzt, um die Funktion abzuleiten. Dies ist in (3.65) und (3.66) dargestellt.

$$\frac{\delta L[t]}{\delta W} = \sum_{\tau} \frac{\delta L[t]}{\delta h[t]} \frac{\delta h[t]}{\delta h[\tau]} \frac{\delta h[\tau]}{\delta W} \quad (3.65)$$

$$\frac{\delta h[t]}{\delta h[\tau]} = \frac{\delta h[t]}{\delta h[t-1]} \cdots \frac{\delta h[\tau+1]}{\delta h[\tau]} \quad (3.66)$$

Wichtig dabei ist die Multiplikation der Gradienten in (3.66). Abhängig von der gewählten Aktivierungsfunktion sind die Ableitungen kleiner als eins. Dadurch schrumpft die Matrix W exponentiell mit den früheren Zeitschritten, was dazu führt, dass diese nicht mehr zum Training beitragen. Ist die Aktivierungsfunktion so gewählt, dass die Ableitung größer eins ist, werden die Gradienten extrem groß, was zu einem instabilen numerischen Verhalten führt und dazu, dass die Modelle nicht mehr konvergieren [68].

Um dieses Problem zu lösen, wurden verschiedene Architekturen wie das LSTM und das GRU entwickelt. Das LSTM wurde 1997 von Hochreiter und Schmidhuber entwickelt und wird heute bei vielen Anwendungen eingesetzt, um die Lang- und Kurzzeitbeziehungen in Daten zu modellieren [69]. Ein LSTM besteht aus fünf nicht-linearen Elementen. Dazu kommt der interne Zustand der Zelle, der nur durch lineare Operatoren verändert wird. Die Informationen in einer LSTM Zelle werden in drei Gates verarbeitet. Die entsprechenden Formeln für die Gates und die internen Zustände sind in (3.67) - (3.72) zusammengefasst. Dabei wird zuerst das Forget Gate $\sigma_f[t]$ berechnet, um Informationen aus dem vorherigen Zustand zu löschen. Die Matrizen W sind die Gewichte, R die Matrizen für die Gewichte der rekurrenten Verbindungen und b die Bias-Vektoren [68].

$$\sigma_f[t] = \sigma(W_f x[t] + R_f h[t-1] + b_f) \quad (3.67)$$

Im Input Gate $\sigma_i[t]$ wird berechnet, welche Informationen dem Zellzustand $c[t]$ hinzugefügt werden. Diese Information wird im Kandidat Zellzustand $\tilde{c}[t]$ berechnet und dann in (3.70) hinzugefügt. $\odot$ steht dabei für die elementweise Multiplikation zwischen zwei Vektoren.

$$\sigma_i[t] = \sigma(W_i x[t] + R_i h[t-1] + b_i) \quad (3.68)$$

$$\tilde{c}[t] = \tanh(W_c x[t] + R_c h[t-1] + b_c) \quad (3.69)$$

$$c[t] = \sigma_i[t] \odot \tilde{c}[t] + \sigma_f[t] \odot c[t-1] \quad (3.70)$$

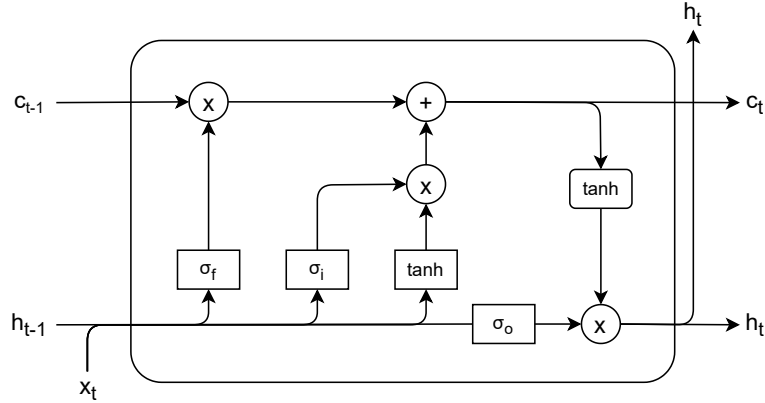


Abbildung 3.8: Wirkprinzip des LSTM nach [70]. Dies besteht aus drei verschiedenen Gates, dem Input Gate, dem Forget Gate und dem Output Gate. Mithilfe des Forget Gates wird bestimmt, welche Informationen aus dem vorherigen Zustand gelöscht werden. In Kombination mit dem Input Gate, in dem die neuen Informationen verarbeitet werden, werden im Output Gate die Informationen zur Weitergabe berechnet.

Das Output Gate $\sigma_o[t]$ berechnet, welcher Anteil aus dem verdeckten Zustand $h[t]$ der Zelle weitergegeben wird. Die finale Ausgabe des LSTM Elements wird anschließend in (3.72) berechnet.

$$\sigma_o[t] = \sigma(W_o x[t] + R_o h[t - 1] + b_o) \quad (3.71)$$

$$h[t] = \sigma_o[t] \odot \tanh(c[t]) \quad (3.72)$$

Die Architektur der LSTM Zelle ist in Abb. 3.8 visualisiert.

Im Vergleich zu einem klassischen RNN, bei dem der Zellzustand durch nicht-lineare Transformationen in jedem Zeitschritt verändert wird, werden beim LSTM die Informationen im Zellzustand durch das Forget Gate gesteuert. So wird beispielsweise bei einem Wert des Forget Gates gleich 1 und des Output Gates gleich 0 der aktuelle Zustand in den nächsten Zeitschritt weitergegeben. Da die Ableitung des Zellstandes meist nahe am Wert 1 liegt, bleibt dementsprechend auch der Gradient über viele Zeitschritte konstant. Dadurch löst das LSTM das Vanishing Gradient Problem und gilt als wichtiges Werkzeug, um Langzeitbeziehungen in Daten zu modellieren [70].

Das GRU ist eine weitere Architektur mit verschiedenen Gates, die im Jahr 2014 von Cho et al. vorgestellt wurde [71]. Im Vergleich zum LSTM ist die Struktur einfacher und es sind weniger Parameter nötig. Dabei wird das Forget und das Input Gate kombiniert zu einem Update Gate $\sigma_u[t]$ in (3.74). Dieses steuert, welche aktuellen Informationen in einem neuem Kandidaten Zellzustand übernommen werden. Hinzu kommt das Reset Gate $\sigma_r[t]$ in (3.73), das entscheidet, welche Informationen aus dem vorherigen Zustand verworfen

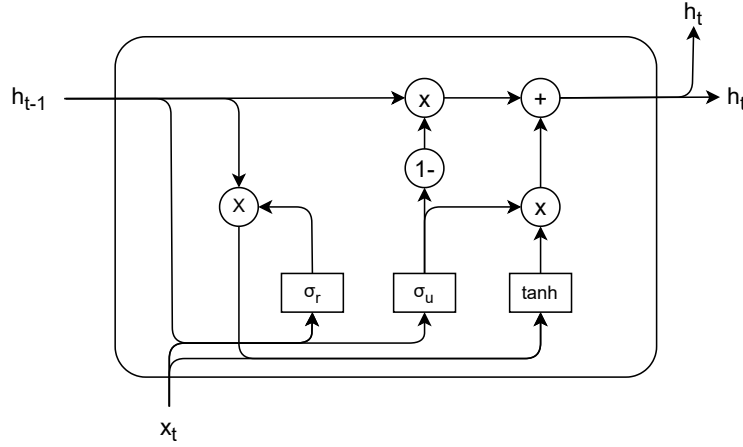


Abbildung 3.9: Wirkprinzip des GRU nach [68]. Dieses besteht aus einem Update Gate, indem die aktuell verfügbaren Informationen mit den Neuen kombiniert werden und dem Reset Gate, das für das Löschen der Informationen aus dem vorherigen Zustand zuständig ist.

werden. Der Kandidaten Zellzustand $z[t]$ wird mit (3.75) und (3.76) berechnet. Dabei beeinflusst das Reset Gate, wie viele Informationen aus dem vorherigen Zustand in den neuen Zustand eingehen. Anschließend wird der neue verdeckte Zustand $h[t]$ mit dem Kandidaten Zellzustand und dem Output Gate berechnet [68].

$$\sigma_r[t] = \sigma(W_r h[t-1] + R_r x[t] + b_r) \quad (3.73)$$

$$\sigma_u[t] = \sigma(W_u h[t-1] + R_u x[t] + b_u) \quad (3.74)$$

$$\tilde{h}[t] = h[t-1] \odot r[t] \quad (3.75)$$

$$z[t] = \tanh(W_z \tilde{h}[t-1] + R_z x[t] + b_z) \quad (3.76)$$

$$h[t] = (1 - \sigma_u[t]) \odot h[t-1] + \sigma_u[t] \odot z[t] \quad (3.77)$$

Die Architektur des GRU ist in Abb. 3.9 dargestellt.

GRUs haben im Vergleich zu LSTMs keinen separaten Zellzustand, wodurch die Komplexität geringer ist und sie damit performanter sind. Beide Arten der RNNs sind gut geeignet für die Modellierung von sequentiellen Daten. Die geringere Komplexität bei besserer Vorhersagekraft für kürzere und mittlere Sequenzen bei GRUs wird mit der höheren Leistungsfähigkeit bei Langzeitabhängigkeiten von LSTMs ausgeglichen. Beide Arten sind klassischen RNNs überlegen und finden breite Anwendung bei der Sprachverarbeitung und

der Analyse von Zeitreihen.

Zusammenfassend wurden in diesem Kapitel die verwendeten ML Modelle vorgestellt. Während die klassischen Modelle eine höhere Erklärbarkeit besitzen und gut geeignet für vergleichsweise kleinere Datensätze sind, zeigen KNNs die besten Ergebnisse für große Datensätze und fungieren dabei aber als Blackbox System. Zusätzlich haben KNNs üblicherweise eine höhere Neigung zur Überanpassung, welche bei den klassischen ML Algorithmen nicht derart ausgeprägt ist. Deshalb ist neben der Komplexität eines Modells auch die Beschaffenheit und die Struktur der Daten von hoher Bedeutung, um ein Verfahren auszuwählen. Nach den mathematischen Grundlagen, die in diesem Kapitel behandelt wurden, und der Vorstellung der Datensätze in Kapitel 5, werden die Ergebnisse der Zustandsschätzungen in Kapitel 6, Kapitel 7 und Kapitel 8 gezeigt. Die lineare Regression und die RNNs werden in Kapitel 6 genutzt, um den SoC von Lithium-Ionen-Batterien zu schätzen. Während die GPR allein für die Bestimmung des SoH in Kapitel 7 verwendet wird, werden zusätzlich die SVM und das MLP für beide Zustandsschätzungen in Kapitel 6, Kapitel 7 und Kapitel 8 genutzt.

4 Stand der Technik

In diesem Kapitel wird nach einer allgemeinen Einführung in die Thematik der Zustandsbestimmung von Lithium-Ionen-Batterien genauer auf die Schätzung der einzelnen Zustände eingegangen. Dabei werden zuerst einzelne Ansätze zur Schätzung des SoC aus der Literatur vorgestellt und diese anhand ihrer Genauigkeiten und Einsatzmöglichkeiten in der Praxis verglichen. Da die SoC Schätzung zeitkritischer und somit auch abhängiger von volatilen Daten während der Zellbelastung ist, liegt dabei der Fokus auf Robustheit und Genauigkeit. Anschließend werden existierende Modelle zur Schätzung des SoH vorgestellt. Dabei liegt der Fokus auf Wahrscheinlichkeitsmodellen und deren Aufbau. Der Einfluss der Datenbasis auf den mathematischen Aufbau der Modelle wird betrachtet und die Genauigkeiten der einzelnen Ansätze verglichen. Als letztes wird die Impedanz im Zusammenspiel mit der SoC und SoH Schätzung analysiert. Aufgrund der hohen Abhängigkeiten zwischen Impedanz und Batterieparametern/-zuständen sind weitreichende Batterieexperimente nötig, um den Zusammenhang über variierende Bedingungen zu bestimmen. Dementsprechend gibt es dafür nur vereinzelt Forschungsansätze in der Literatur. Der Fokus liegt dabei auf einer ausgewählten Veröffentlichung, die im Detail vorgestellt wird, um eine Vergleichbarkeit der in dieser Dissertation erzielten Ergebnisse zu gewährleisten. Abschließend werden die Ansätze aus der Literatur zusammen gefasst und die Herausforderungen sowie die Forschungslücken definiert.

4.1 Einführung

Um die Anforderungen an Kapazität und Spannung zu erreichen, bestehen Batteriesysteme aus mehreren einzelnen Batteriezellen. Das Batterie Management System (BMS) übernimmt dabei Aufgaben der Überwachung und der Steuerung des Systems, um einen sicheren und effizienten Betrieb des Batteriesystems zu gewährleisten. Dabei ist es von hoher Relevanz, den Zustand der einzelnen Zellen mit höchster Genauigkeit zu bestimmen. Dazu gehören der Ladezustand SoC und der Gesundheitszustand SoH. Zusätzlich wird auch die Impedanz betrachtet, die während der Batteriealterung ansteigt. Im Gegensatz zu den Batterieparametern, wie Strom, Spannung oder Temperatur können die verschiedenen Zustände nicht direkt gemessen werden. Deshalb gibt es verschiedene Ansätze zur Schätzung des Zustandes, welche aber, abhängig von dem zu bestimmenden Zustand, variieren. Einer der am meisten verwendeten elektrochemischen Algorithmen, um die Batteriedynamik zu approximieren, ist das Doyle-Fuller-Newmann Modell, welches aus nicht-linearen partiellen Differentialgleichungen besteht, um die Konzentration an Lithium-Ionen und das elektrische Potential zu beschreiben [72]. Ähnlich zu den meisten physikalischen Modellen ist die benötigte Rechenkapazität bei entsprechender Genauigkeit sehr hoch, was den Einsatz in der Praxis erschwert [73]. Bei den modellbasierten Verfahren werden hauptsächlich Zustandsschätzer, wie Kalman Filter (KF), Extended Kalman Filter (EKF) oder Unscented

Kalman Filter (UKF) in Kombination mit einem elektrischen Ersatzschaltbildmodell verwendet [74]. Durch den Vergleich von geschätzten und realen Daten wird das Modell iterativ angepasst. Auch bei den Modellschätzern ist der Zusammenhang zwischen Rechenkapazität und Genauigkeit problematisch. Zusätzlich ist eine Reparametrisierung der Modelle über den Lebenszyklus notwendig. Datenbasierte Algorithmen hingegen ermöglichen die Schätzung des Zustands mit vergleichsweise geringer Rechenleistung. Ziel dabei ist es, Funktionen zu ermitteln, die basierend auf den messbaren Batterieparametern, wie Strom, Spannung und Temperatur, die nicht-messbaren Zustände, wie SoC und SoH, schätzen. Grundlage für das Training der Modelle bilden dabei die verwendeten Daten. Aufgrund der vielfältigen Umgebungs- und Betriebsbedingungen existiert kein ganzheitlicher Datensatz, der alle Anwendungsfälle repräsentiert. Dadurch wird die Zustandsschätzung in der Praxis deutlich erschwert. Hinzu kommt, dass Alterungsdaten von Lithium-Ionen-Batterien meist mehrere Monate an Testreihen erfordern und anschließend oft nicht veröffentlicht werden. Folglich gibt es nur eine geringe Anzahl an Alterungsdaten, was das Training und die Vergleichbarkeit von datenbasierten Zustandsschätzern einschränkt [75].

4.2 Ladezustandsbestimmung von Lithium-Ionen Batterien

Die Algorithmen zur Bestimmung des SoC lassen sich in drei Kategorien einteilen: direkte Schätzverfahren, modell-basierte und datengetriebene Ansätze. Bei den direkten Schätzverfahren werden Batterieparameter wie Strom, Spannung oder Impedanz direkt gemessen und für die Schätzung des SoC verwendet. Dazu gehört als wichtigste Methode das Coulomb Counting, bei dem der Strom über die Zeit gemessen wird. Anschließend wird er über die Zeit integriert, um somit die geflossene Ladung zu berechnen. Bei einem gegebenen Startwert $\text{SoC}(t_0)$ für den SoC kann somit der Endwert nach Benutzung berechnet werden [76]. Die dazugehörige Formel ist in (4.1) dargestellt. C_n ist dabei die Nennkapazität der Zelle und I_{bat} der Lade- oder Entladestrom der Zelle.

$$\text{SoC}(t) = \text{SoC}(t_0) + \frac{1}{C_n} \int_{t_0}^{t_0+t} I_{\text{bat}}(\tau) d\tau \times 100\% \quad (4.1)$$

Nachteil der Methode ist einerseits der kumulierende Fehler, der aufgrund von fehlerhaften Messwerten ansteigt, und andererseits der benötigte Startpunkt für den SoC. Dies führt dazu, dass eine Anwendung in der Praxis nur schwer bis gar nicht möglich ist [76]. Als zweite bekannte Methode wird der SoC oft basierend auf der Ruhespannung der Batterie geschätzt. Dafür werden sogenannte Look-Up Tabellen genutzt, die den Zusammenhang zwischen Ruhespannung und SoC beschreiben. Dafür muss der Zusammenhang zuerst in Messreihen bestimmt werden. Zusätzlich muss in einer Anwendung die Batterie für längere Zeit von der Last getrennt werden, um die Ruhespannung zu messen. Typischerweise werden hier Ruhezeiten von einer bis drei Stunden angewendet [76].

Die modellbasierten Verfahren sind meist sehr robust und weisen eine hohe Genauigkeit auf. Nachteil dabei ist, dass für die Entwicklung ein tiefes Verständnis für Lithium-Ionen-Batterien vorhanden sein muss, um das Verhalten der Zellen nachzubilden. Hinzu kommt, dass sehr genaue Modelle eine hohe Rechenleistung benötigen. Meist werden die Modelle vereinfacht, um sie für Anwendungen nutzen zu können, wodurch die Genauigkeit redu-

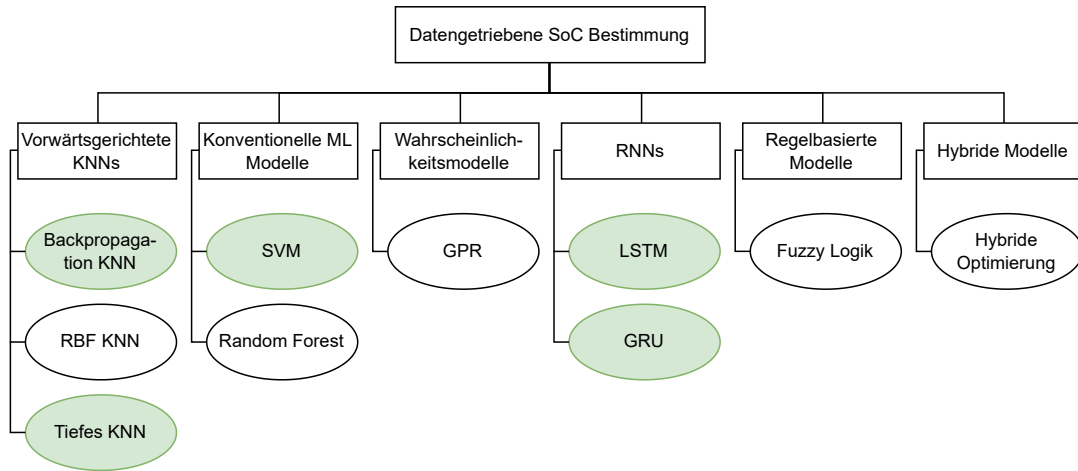


Abbildung 4.1: Datengetriebene Modelle zur Bestimmung des SoC nach [77]. Die Modelle, welche in dieser Arbeit verwendet werden, sind dabei farblich markiert.

ziert wird [77]. Ein Beispiel hierfür ist ein Ersatzschaltbildmodell, welches das dynamische Verhalten von Lithium-Ionen-Batterien mithilfe von elektrischen Bauelementen nachbilden soll. Wie bereits in Kapitel 2 in Abb. 2.4 gezeigt, besteht das Ersatzschaltbildmodell mindestens aus einer Spannungsquelle und einem Innenwiderstand. Die Anzahl an RC-Gliedern, also an einem parallel geschalteten Widerstand und einem Kondensator, wird bei verschiedenen Methoden variiert. Davon hängt die Robustheit und die Genauigkeit der Nachbildung des dynamischen Verhaltens der Batterie ab. Am häufigsten werden dabei Modelle mit zwei RC-Gliedern verwendet, da diese einen guten Kompromiss zwischen benötigter Rechenleistung, Robustheit und Genauigkeit des Modells bieten. So konnten Zheng et al. in einem Vergleich zwischen Modellen mit keinem und bis zu vier RC-Gliedern beweisen, dass die Schätzung mit dem Modell mit zwei RC-Gliedern am genauesten ist. Selbst mit nur einem RC-Glied kann die Schätzung deutlich verbessert werden, während bei drei und bei vier RC-Gliedern keine weitere Verbesserung mehr festgestellt werden konnte [78].

Die datengetriebenen Ansätze geraten immer mehr in den Fokus, da sie kürzere Entwicklungszeiten benötigen, kein Hintergrundwissen über die komplexen elektrochemischen Prozesse innerhalb der Zelle notwendig ist und ähnliche Genauigkeiten wie bei anderen Methoden erreicht werden. Die Modelle sind stark von der Qualität der Daten abhängig. Besonders bei Batterien mit schier unendlich möglichen Kombinationen an Belastungs- und Umgebungsbedingungen ist dies ein Problem. Deshalb haben viele Modelle zur SoC Bestimmung das Problem der Über- oder der Unteranpassung [76, 79]. Anwendung finden vorwärtsgerichtete KNNs, RNNs und klassische ML Modelle, wie die SVM. Eine Zusammenfassung der datengetriebenen Modelle für die SoC Schätzung ist in Abb. 4.1 dargestellt [77]. Dabei sind die Verfahren, die in dieser Arbeit zur SoC Schätzung verwendet werden und deren Aufbau und Ergebnisse in Kapitel 3 und Kapitel 6 vorgestellt werden, farblich hervorgehoben.

Chemali et al. nutzen KNNs mit mehreren Schichten, um den SoC zu bestimmen [80].

Künstliche Daten	Validierungsdaten	MAE in %
Nein	HWFET	1,35
Ja	HWFET	1,06
Nein	US06	2.67
Ja	US06	1.59

Tabelle 4.1: Ergebnisse der SoC Schätzung mit einem mehrschichtigen KNN auf Validierungsdaten mit den Fahrzyklen HWFET und US06 erzielt in [80].

Als Eingangsmerkmale werden Temperatur-, Strom- und Spannungswerte verwendet. Als erstes konnte festgestellt werden, dass ein KNN mit zwei Schichten und insgesamt 256 Neuronen bei der SoC Bestimmung um den Faktor 9,5 schneller war als ein erweitertes KF Modell. In absoluten Zahlen betragen die Werte für das KNN 0,07 Sekunden und für den KF 0,66 Sekunden. Zusätzlich werden Daten für ein robustes Modelltraining und um mehrere Anwendungsszenarien abzudecken künstlich erstellt. Dafür werden die realen Messdaten verwendet und mit einem gleichverteilten Rauschen verrechnet. Für die Erstellung der verrauschten Daten wurde ein Mittelwert von 0 und eine Standardabweichung von 2-4% gewählt. Mit einem zusätzlichen Versatz zu den gemessenen Werten werden somit künstliche Messpunkte erstellt. So werden von einem realen Datenverlauf bis zu 20 neue Versionen erstellt. Für die Modellvalidierung werden zwei verschiedene Fahrzyklen verwendet. Einerseits der HWFET Fahrzyklus mit moderater Dynamik und der US06 Zyklus für hochdynamische Fahrprofile [81]. Die Ergebnisse der SoC Schätzung mit und ohne künstliche Daten für beide Fahrzyklen ist in Tabelle 4.1 zusammengefasst [80].

Zusätzlich konnten Chemali et al. zeigen, dass eine Erhöhung der Anzahl der Schichten des KNN von 2 auf maximal 8 und eine Erhöhung der Anzahl der Neuronen einer Schicht von 1 bis maximal 32 nur zu geringen Verbesserungen der Schätzung führt. So findet ab 6 Schichten und ab 8 Neuronen pro Schicht keine Verbesserung der Vorhersagekraft statt. Insgesamt konnte ein SoC Schätzer basierend auf einem KNN mit leicht geringerem Fehler im Vergleich zu bestehenden Modellen und zusätzlich reduzierter Rechengeschwindigkeit entwickelt werden, was das große Potential von datengetriebenen Modellen beweist [80].

Jiao et al. verwenden ein GRU mit einem optimierten Gradientenverfahren zur SoC Schätzung [82]. Als Eingangsmerkmale werden dabei Spannungs- und Stromwerte verwendet. Das optimierte Gradientenverfahren berücksichtigt den aktuellen und vorherige Gradienten. Sind diese ähnlich, wird der Trend verstärkt. Unterscheiden sich die Gradienten, wird der Trend abgeschwächt. Diese Optimierung betrifft allein die Trainingsphase und nicht den Test des Modells auf unbekannte Daten. Dennoch wird dadurch das Problem der Datenqualität behandelt, da das Modell durch die Optimierung schneller konvergiert und somit der Einfluss der Daten reduziert wird. Zusätzlich wird ein Term für das Rauschen der Messdaten eingeführt, der die Generalisierungsfähigkeit des Modells erhöhen und somit die Überanpassung verhindern soll. Grundlage des Algorithmus zur SoC Schätzung ist aber ein klassisches GRU. Die Ergebnisse mit und ohne Rauschen sind in Tabelle 4.2 zusammengefasst [82].

Obwohl das GRU bei Jiao et al. gute Ergebnisse erzielt, wird hierbei keine direkte Aufteilung in Trainings- und Testdaten durchgeführt [82]. Dadurch lassen sich nur begrenzt Aus-

Rauschen	RMSE in %	MAE in %
Nein	1,84	0,79
Ja	0,92	0,41

Tabelle 4.2: Ergebnisse der SoC Schätzung mit einem GRU mit und ohne einen Rauschterm für eine bessere Generalisierbarkeit des Modells erzielt in [82].

Metrik	Konstant T (25 °C)	Variierend T (-20 bis 25 °C)
Training RMSE in %	0,57	2,27
Training MAE in %	0,45	1,98
Test RMSE in %	0,85	2,00
Test MAE in %	0,70	1,55

Tabelle 4.3: Ergebnisse der SoC Schätzung mit einem CNN mit dem Fahrzyklus US06 aufgeteilt in Ergebnisse bei konstanter Temperatur von 25 °C und bei variierender Temperatur zwischen -20 und 25 °C für Training- und Testdaten erzielt in [83].

sagen über die Anwendbarkeit des Modells treffen. Dennoch zeigen die geringen Fehlerwerte das große Potential von RNNs zur Bestimmung des SoC von Lithium-Ionen-Batterien.

Hannan et al. schätzen den SoC mithilfe eines CNN mit ausschließlich Faltungsschichten [83]. Als Eingangsmerkmale werden die Messwerte von Strom, Spannung und Temperatur genutzt. Anschließend folgen vier Faltungsoperationen entlang der zeitlichen Achse. Die Kernelbreite b beträgt in dieser Reihenfolge $b = [7, 5, 3, 1]$ und die Anzahl an Kernel n pro Faltungsschicht $n = [16, 32, 16, 1]$. Dies bedeutet für die erste Schicht, dass 16 Filter mit einer Breite von 7 entlang der Zeitachse verwendet werden, um Merkmale aus den Daten zu extrahieren. Nach jeder Schicht werden die Ergebnisse normalisiert, bevor sie in der nächsten Schicht verarbeitet werden. Dabei werden Daten von neun Lithium-Ionen-Batterien basierend auf dem Fahrzyklus US06 verwendet. Das Modell wird mit sieben Zellen trainiert und mit zwei Zellen getestet. Zusätzlich werden die Trainingsdaten im Verhältnis 70/30 in finale Trainingsdaten und Validierungsdaten für die Parameteroptimierung aufgeteilt. Die Ergebnisse der SoC Schätzung für eine konstante Temperatur von 25 °C und eine variable Temperatur zwischen -20 und 25 °C ist in Tabelle 4.3 dargestellt [83].

Zusammenfassend konnten Hannan et al. ein CNN entwickeln, das im Bezug auf benötigte Rechenzeit und Genauigkeit der Schätzung bessere Ergebnisse liefert als RNNs [83]. Allerdings wurde dabei nur ein begrenzter Datensatz verwendet und eine Anwendung auf andere Batterietypen wurde nicht untersucht.

Insgesamt zeigt die Analyse von Modellen aus der Literatur zur Bestimmung des SoC, dass datengetriebene Modelle neben der geringeren Entwicklungszeit ähnliche bis leicht bessere Ergebnisse als konventionelle SoC Schätzmethoden erzielen. Dabei sind besonders die KNNs im Fokus, da sie im Vergleich zu klassischen ML Modellen bessere Ergebnisse erzielen. Dabei kommen vorrangig RNNs und CNNs zum Einsatz. Dennoch erschwert der hohe Einfluss der Datenqualität die Anwendung der Modelle, die meist nur auf einen Zelltyp trainiert und getestet wurden. So stellt die Erweiterung des Datensatzes durch weitere Experimente oder künstlich erstellte Daten eine zentrale Herausforderung bei der SoC

Bestimmung dar.

4.3 Gesundheitszustandsbestimmung von Lithium-Ionen Batterien

Die Alterung oder Degradation einer Lithium-Ionen-Batterie ist von verschiedenen miteinander korrelierenden Faktoren abhängig. Dazu gehören die Umgebungs- sowie die Belastungsbedingungen. Die nahezu unendlichen Möglichkeiten erschweren die genaue Bestimmung des SoH. Dennoch ist es von enormer Wichtigkeit, den SoH als Maß für die Kapazitätsdegradation möglichst genau zu bestimmen. Nur wenn der Zustand genau bestimmt werden kann, kann der Betrieb angepasst und das Batteriesystem optimal gesteuert werden. Jedoch ist ohne den Kenntnis der jemals in der Zelle geflossenen Ladung eine Messung des SoH nicht möglich. Deshalb werden dafür in der Praxis Schätzverfahren angewendet.

Besonders die datengetriebenen Schätzmodelle sind hier in den Fokus der Forschung geraten, da dadurch kein Hintergrundwissen über die Vergangenheit der Zellen notwendig ist und das elektrochemische Verhalten der Batterie nicht nachgebildet werden muss [84]. So kann trotz vergleichsweise geringer benötigter Rechenleistung das dynamische Verhalten einer Lithium-Ionen-Zelle approximiert werden [73]. In der Literatur werden Wahrscheinlichkeitsmodelle wie die GPR, klassische ML Modelle wie die SVM, verschiedene Arten von KNNs und hybride Modelle verwendet. Grundlage der Modelle sind, ähnlich wie bei der SoC Bestimmung, Batteriedaten, die entweder in einer realen Anwendung oder im Forschungsumfeld aufgenommen wurden. Dabei werden meist die Rohdaten aus Spannung, Strom und Temperatur verarbeitet, um Merkmale zu erstellen, mit denen der SoH geschätzt wird. Die Bewertung der Modelle geschieht anschließend meist mit Standardmetriken, wie dem RMSE oder dem MAE [84, 85, 86]. Eine Zusammenfassung der Vorgehensweise zur datengetriebenen Zustandsbestimmung von Lithium-Ionen-Batterien ist in Abb. 4.2 dargestellt.

Anwendung zur Bestimmung des SoH finden sowohl klassische ML Modelle als auch die Wahrscheinlichkeitsmodelle. Yang et al. und Sui et al. geben eine Übersicht über die Verfahren, die zur Schätzung des SoH in der Literatur verwendet werden [85, 86]. Im Folgenden wird detailliert auf Wahrscheinlichkeitsmodelle zur Nachbildung des Batterieverhaltens aus der Literatur eingegangen. In dieser Arbeit wird, wie in Kapitel 7 ausgeführt, ein GPR Modell entwickelt, das auf Basis von Strom-, Spannungs- und Temperaturwerten den SoH schätzt.

Von der Merkmalerstellung bis zum finalen Modell unterscheiden sich die verschiedenen Verfahren zur SoH Schätzung. So berechnen Yang et al. die Änderung der Ladungskurven über den Lebenszyklus, um daraus Merkmale zu erstellen [87]. Basierend auf Daten mit einem CC-CV (Konstantstrom und Konstantspannung) Ladungsverlauf aus dem öffentlichen Datensatz der NASA aus [88] werden vier Merkmale extrahiert. Diese sind die Dauern der jeweiligen CC und CV Phasen, die Steigung der Spannungskurve am Ende der CC Phase und die Steigung einer Geraden, die rechtwinklig auf der Spannungskurve an deren Wendepunkt liegt. Die Eingangsdaten liegen in zeitlicher Abhängigkeit vor. Das bedeutet, die Merkmale sind für einzelne Zeitschritte zusammengefasst. Das Schätzmodell basiert auf einer GPR. Der Mittelwert der Prior-Verteilung wird gleich null gewählt. Als Kernel wird

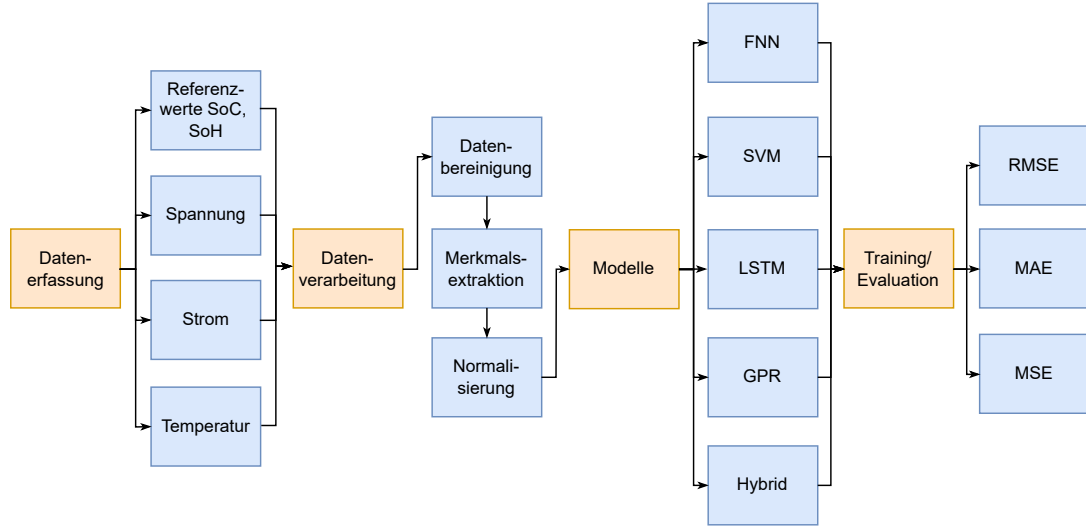


Abbildung 4.2: Vorgehensweise zur Bestimmung des SoH mit datengetriebenen Modellen von der Datenerfassung bis zur Modellevaluierung nach [84]

eine rationale quadratische Funktion verwendet, die in (4.2) dargestellt ist [87].

$$k_f(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \sigma_{f1}^2 \exp\left(\frac{-\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}{2l_1^2}\right) + \sigma_{f2}^2 \exp\left(\frac{-\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}{2l_1^2}\right) + \sigma_n^2 \delta(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \quad (4.2)$$

Dabei beschreibt der erste exponentielle Anteil die kleineren Fluktuationen, während der zweite Anteil die langfristige Degradation der Zelle beschreibt. Der letzte Teil beschreibt das Rauschen mit einer Indikatorfunktion δ , die entweder 1 bei $i = j$ oder in den restlichen Fällen 0 ergibt. Insgesamt werden mit dem Modell Fehlerwerte unter 6% erreicht [87]. Trotz der geringen Fehlerwerte bleibt weiterhin der Nachteil, dass das Modell nur mit einer Batterieart trainiert wurde und somit nur dafür anwendbar ist. Die Verwendung der Ladekurven für die SoH Schätzung für weitere Batteriearten konnte somit nicht bewiesen werden.

Ähnlich dazu verwenden auch Feng und Shi den Datensatz aus [88] und extrahieren aus den Rohdaten fünf Merkmale [89]. Diese sind:

- Zeit der Ladung mit konstantem Strom (1)
- Zeit der Ladung mit konstanter Spannung (2)
- Änderung des Stroms während der Ladung mit konstanter Spannung (3)
- Kapazität während der Ladung mit konstanter Spannung (4)
- Zeit von Beginn der Ladung bis zum Erreichen von 1,3 A (5)

Anschließend werden die Korrelationen zwischen den Merkmalen und der Kapazität berechnet. Dabei wurde, über vier Batteriezellen gemittelt, die höchste Korrelation für Merkmal 3 festgestellt. Darauf folgen Merkmal 1 und 5 in einem ähnlichen Bereich und abschließend Merkmal 2 und 4. Dennoch weisen alle Merkmale hohe Korrelationen auf und werden für die SoH Schätzung verwendet. Für die GPR wird der Mittelwert gleich 0 und als Kernelfunktion die rationale quadratische Funktion gewählt. Die Kernelfunktion mit verschiedenen Längenskalen für die Langzeit-Degradation im exponentiellen Anteil, einem zweiten Term für kleinere Fluktuationen und dem dritten Term für das Rauschen der Werte ist in (4.3) dargestellt [89].

$$k_f(x, x') = \sigma_{f1}^2 \exp\left(\frac{-\|x - x'\|^2}{2l_1^2}\right) + \sigma_{f2}^2 \left(1 + \frac{\|x - x'\|^2}{2\alpha l_2^2}\right)^{-\alpha} + \sigma_n^2 I_n \quad (4.3)$$

Die Fehlerwerte bei Feng und Shi variieren für die verschiedenen Zellen, es werden aber Fehlerwerte unter 2% erreicht. Insgesamt konnten hohe Genauigkeiten bei der SoH Schätzung mit dem kombinierten Kernel erreicht werden [89]. Dennoch muss auch hier überprüft werden, ob die extrahierten Merkmale für andere Batteriearten anwendbar sind.

Richardson et al. nutzen auch den öffentlichen Datensatz aus [88], um ihr GPR Modell zu trainieren und zu testen [90]. Für die Erstellung der Merkmale werden die Batterieparameter Strom, Spannung und Temperatur zuerst in einen ein-dimensionalen Vektor nach den Zeitpunkten der Messwerte geordnet. Daraus wird die Zeit des betrachteten Belastungsprofils extrahiert und die geflossene Ladung, also das Integral des Stroms über die Zeit, berechnet. Als zusätzliches Merkmal wird die absolute Zeit zum Start des Experiments verwendet. Während für weitere Kernel, wie die rationale quadratische Kernelfunktion, ähnliche Genauigkeiten erreicht werden, wird im finalen Modell der Matern Kernel in (4.4) verwendet, um mehrere Längenskalen zu berücksichtigen [90].

$$\kappa_{\text{Ma}}(x - x') = \sigma_f^2 \frac{2^{1-\nu}}{\Gamma(\nu)} \left(\frac{\sqrt{2\nu} \|x - x'\|}{\rho}\right)^\nu \mathcal{R}_\nu\left(\frac{\sqrt{2\nu} \|x - x'\|}{\rho}\right) \quad (4.4)$$

Dabei ist σ_f^2 ein Skalierungsparameter, ν ein Parameter für die Glattheit der Funktion mit dem Wert 2,5 und $\mathcal{R}_\nu$ eine modifizierte Bessel Funktion. Zusätzlich wird der Mittelwert, ähnlich zu den anderen Ansätzen, gleich 0 gesetzt. Mit diesem Modell und den ersten zwei Merkmalen (Zeit des Belastungsprofils und geflossene Ladung) wird ein RMSE von 0,070 Ah bei der Kapazitätsschätzung erreicht. Wird die Zeit zum Experimentstart als Merkmal hinzugefügt, erhöht sich der Fehler auf 0,116 Ah. Insgesamt schwanken die geschätzten Werte in einem Bereich von 5% um die realen Werte. Zusätzlich konnten Richardson et al. in einem Vergleich zu einer GPR mit linearem Kernel zeigen, dass die lineare Kombination zwischen Eingangs- und Zielwerten zu geringeren Genauigkeiten führt und somit nicht für die SoH Schätzung geeignet ist [90].

Wie bei den anderen Arbeiten, nutzen Tagade et al. [91] den öffentlichen Datensatz aus [88], um die Modelle zu entwickeln. Der Unterschied ist aber, dass die Merkmale nicht manuell erstellt, sondern automatisch extrahiert wurden. Grundlage dafür bilden die sequentiellen Daten von Zeit, Spannung und Temperatur. Die entstehende Matrix wird mit einem Projektionsvektor verrechnet, der während des Trainings geschätzt wird. Als Kernelfunk-

tion wird der rationale quadratische Kernel verwendet. Analog zu einem mehrschichtigen KNN besteht das Modell aus mehreren Schichten mit jeweils einer GPR. Dadurch sollen die komplexen nicht-linearen Beziehungen besser abgebildet werden können. Zusätzlich wurden die Korrelationen zwischen den Ausgangswerten der Schichten und den Batterieparametern berechnet. Dazu gehören der Ladungstransferwiderstand und der Widerstand des Elektrolyten. Mit dem Modell konnten MAE Werte von 0,1 Ah für die Schätzung der Kapazität erreicht werden. Dies ergibt einen R^2 Wert von teilweise über 0,9. Die Ausgangswerte der Schichten können basierend auf den Korrelationsergebnissen als Indikatoren für verschiedene Degradationsmechanismen verwendet werden. Deren detaillierte Analyse wird aber in der Veröffentlichung nicht weiter behandelt.

Liu et al. bestimmen den SoH für die kalendarische Alterung von Lithium-Ionen-Batterien [92]. Dabei wurden Alterungsexperimente durchgeführt, woraus Daten für neun verschiedene Testfälle mit unterschiedlichen Temperaturen und SoCs resultieren. Als Eingangsmerkmale werden die Kapazität im vorherigen Zeitschritt sowie der aktuelle SoC und die aktuelle Temperatur verwendet. Als Kernelfunktion wird ein ARD Kernel verwendet, der eine modifizierte Variante des rationalen quadratischen Kernels in (4.5) und des Matern Kernels in (4.6) ist. Dabei wird die Funktion r in (4.7) verwendet, welche die Hyperparameter l für die verschiedenen Längenskalen und die unterschiedliche Relevanz der einzelnen Merkmale beinhaltet [92].

$$\kappa_{\text{SE-ARD}}(i, i') = \sigma_{\text{SE}}^2 \exp\left(-\frac{1}{2}r\right) \quad (4.5)$$

$$\kappa_{\text{M32-ARD}}(i, i') = \sigma_{\text{M32}}^2 \left(1 + \sqrt{3}r\right) \exp\left(-\sqrt{3}r\right) \quad (4.6)$$

$$r = \frac{\|i_T - i'_T\|^2}{l_T^2} + \frac{\|i_{\text{SoC}} - i'_{\text{SoC}}\|^2}{l_{\text{SoC}}^2} + \sum_{C=0}^k \frac{\|i_C - i'_C\|^2}{l_C^2} \quad (4.7)$$

Das Modell mit dem modifizierten rationalen quadratischen Kernel erreicht einen RMSE von 0,0082 Ah für die Schätzung der Kapazität. Der ARD Matern Kernel ist mit einem RMSE von 0,0054 Ah leicht besser [92]. Obwohl die Modelle nur für die kalendarische Alterung trainiert und getestet wurden, zeigt das Modell eine hohe Genauigkeit und ein hohes Anwendungspotential für eine große Anzahl an Merkmalen mit verschiedenen Längenskalen.

Auffällig ist, dass viele Modelle in der Literatur auf Basis eines einzelnen öffentlichen Datensatzes aus [88] entwickelt wurden. Dies zeigt einerseits, dass es einen großen Mangel an verlässlichen Batteriedaten über deren Lebenszyklus gibt, andererseits fördert dies aber die Vergleichbarkeit der Modelle. Besonders im Hinblick auf den Einfluss der Datenqualität auf die Genauigkeit der datengetriebenen Modelle schafft die Verwendung des gleichen Datensatzes die Möglichkeit eines direkten Vergleichs. Weiterhin ist die Verarbeitungsmethode der Rohdaten zur Erstellung der Merkmale von hoher Relevanz. Dies reicht von der manuellen Extraktion aus vollständigen Ladekurven bis zur automatischen Extraktion mit verschiedenen Algorithmen aus reduzierten Messsequenzen. Nächster entscheidender Punkt ist die Auswahl der Kernelfunktion für die GPR. Dabei werden verschiedene Kernel gewählt, die bis auf den linearen Kernel zu ähnlichen Genauigkeiten führen. Auffallend dabei

ist, dass Kernelfunktionen kombiniert werden, um die Kurzzeit- und Langzeitbeziehungen während der Degradation zu approximieren. Insgesamt zeigt die GPR als Wahrscheinlichkeitsmodell mit weniger Hyperparametern als andere ML Verfahren großes Potential für die Schätzung des SoH von Lithium-Ionen-Batterien. Deshalb wurde in dieser Arbeit eine GPR mit ARD Kernel entwickelt, um den SoH von Lithium-Ionen-Batterien vorherzusagen. Die Ergebnisse des Schätzmodells werden in Kapitel 7 vorgestellt.

4.4 Impedanzbestimmung von Lithium-Ionen Batterien

Die Impedanzbestimmung ist eng mit der Bestimmung des SoH verbunden. In der Literatur werden oftmals Impedanzdaten genutzt, um die verbleibende Kapazität zu schätzen. Dabei werden vollständige oder vorverarbeitete EIS Spektren verwendet, um den SoH zu schätzen. Während die Kapazität über die Lebensdauer abnimmt, steigt die Impedanz. Der Zusammenhang zwischen beiden Parametern kann genutzt werden, um von einem auf den anderen Parameter zu schließen. Dabei existiert aber so gut wie keine Forschung dazu, an welchem Punkt oder Zustand einer Lithium-Ionen-Batterie dieser Zusammenhang am größten ist. Es wird lediglich derselbe Zellzustand für eine EIS Messung verwendet, um die Vergleichbarkeit der Daten über den Lebenszyklus zu gewährleisten [93, 94].

Es gibt nur wenige Veröffentlichungen, die EIS Messungen unter verschiedenen Bedingungen verwenden, um die Degradation von Lithium-Ionen-Batterien zu bestimmen. Zhang et al. testen zwölf 45 mAh Eunicell LR2032 Lithium-Ionen-Zellen und führen EIS Messungen an neun verschiedenen Zeitpunkten während der Experimente durch [95]. Ziel dabei ist es, die Degradationsmechanismen der Zelle zu bestimmen. Die Zellen werden in einer CC-CV Phase zwischen den Spannungsgrenzen 3,0 und 4,2 V mit einer C-Rate von 1 C beim Laden und einer CC Belastung mit einer C-Rate von 2 C beim Entladen zyklisiert. Dabei werden acht Zellen bei 25 °C und jeweils zwei Zellen bei 35 °C und bei 45 °C getestet. Die EIS Messungen werden mit einer Amplitude von 5 mA für Frequenzen zwischen 0,02 und 20000 Hz durchgeführt. Die neun verschiedenen Zustände, an denen die EIS Messungen durchgeführt werden, sind in Abb. 4.3 visualisiert [95].

Insgesamt entstehen durch die Messreihen über 20000 EIS Spektren, die zur datengetriebenen SoH Schätzung verwendet werden. Dabei wird eine GPR genutzt, die anhand eines vollständigen EIS Spektrums die verbleibende Kapazität bestimmt. Die Messpunkte der EIS Spektren können nicht direkt einem Zustand zugeordnet werden, da sie an definierten Zeitpunkten und nicht an definierten Zuständen liegen. Das heißt, der SoC einer Messung während Ladung und Entladung variiert abhängig vom Punkt im Lebenszyklus. Die Daten werden genutzt, um den Messpunkt mit der höchsten Korrelation zwischen Impedanz und Kapazität zu berechnen. Die Ergebnisse sind in Abb. 4.4 dargestellt. Da in dieser Arbeit nur die EIS während der Entladung analysiert werden, sind auch nur die Korrelationen der Messpunkte während der Entladung dargestellt.

Dabei zeigen vor allem die EIS Spektren bei Messpunkt 6 die höchsten Korrelationen. Dies gilt für die Pearson und für die Distanz Korrelation. Während bei Messpunkt 5 die Korrelationen am konstantesten sind, gibt es bei den restlichen Messpunkten höhere Schwankungen. So sind beispielsweise im mittelfrequenten Bereich die höchsten Korrelationen erkennbar, während die niedrigsten Korrelationen tendenziell bei den niedrigsten

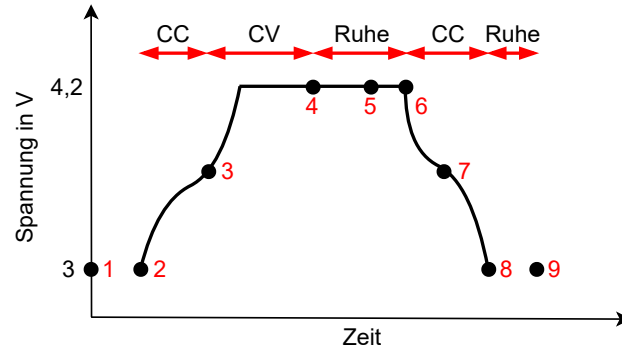


Abbildung 4.3: Batteriezustände, an denen die EIS Messungen in [95] durchgeführt werden. Zeitpunkt 1: Vor dem Laden, Zeitpunkt 2: Start Laden, Zeitpunkt 3: Nach 20 min Laden, Zeitpunkt 4: Nach Laden/vor Ruhephase, Zeitpunkt 5: Nach 15 min Ruhephase, Zeitpunkt 6: Start Entladen, Zeitpunkt 7: Nach 10 min Entladen, Zeitpunkt 8: Nach Entladen/vor Ruhephase, Zeitpunkt 9: Nach 15 min Ruhephase.

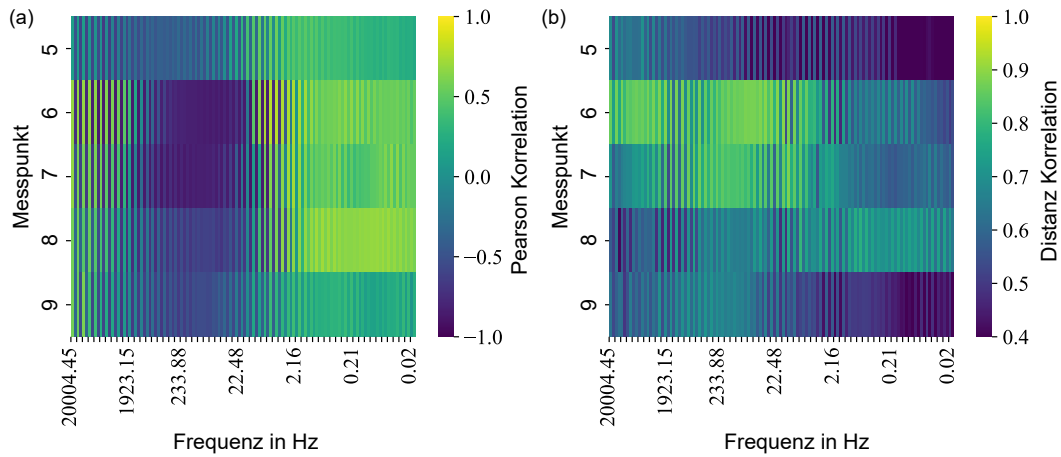


Abbildung 4.4: Pearson und Distanz Korrelation zwischen Kapazität und Impedanz bei den Messreihen aus [95]. Dargestellt sind Messpunkte der EIS Messungen während der Entladung und die einzelnen Frequenzen der Messung. Die Korrelation zwischen den Real- und Imaginärteilen der Impedanz und der Kapazität ist farblich markiert.

Frequenzen liegen. Diese Korrelationsanalyse wurde bei Zhang et al. nicht durchgeführt, sondern es wurden direkt die Ergebnisse der Kapazitätsschätzung mit den Daten an den verschiedenen Messpunkten verglichen. Dabei nutzen sie eine GPR mit einem ARD Kernel, um den Einfluss von nicht-relevanten Merkmalen zu reduzieren. Die verwendete Kernel-Funktion ist in (4.8) dargestellt. Dabei sind x_i und x_j die Eingabevektoren, d die Dimension des Eingaberaums, σ_f^2 ein Varianzparameter und σ_m^2 die verschiedenen Längenskalen für die einzelnen Dimensionen [95].

$$k_{\text{ARD-SE}}(x_i, x_j) = \sigma_f^2 \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{m=1}^d \frac{(x_{im} - x_{jm})^2}{\sigma_m^2} \right) \quad (4.8)$$

Über die Längenskalen wird zusätzlich auch die Relevanz der einzelnen Merkmale bestimmt. Entgegen der Ergebnisse der Korrelationsanalyse führen die Messpunkte 5 und 9 zu den besten Schätzergebnissen. Diese sind die elektrochemisch stabilen Zustände mit einer Ruhephase nach dem vollständigen Laden oder Entladen. Dennoch zeigen sich für alle Messpunkte ähnliche Ergebnisse. Als entscheidendes Merkmal konnte die Impedanz bei einer Frequenz von 17,8 Hz identifiziert werden. Diese liegt im Übergangsbereich zwischen mittleren und niedrigen Frequenzen. Bei der SoH Schätzung schwankt der R^2 Wert zwischen den einzelnen Zellen. Für die Testzelle bei 35 °C konnte ein Wert von 0,81 und für die Testzelle bei 45 °C ein Wert von 0,72 erzielt werden [95]. Insgesamt zeigt sich, dass der Zeitpunkt der EIS Messung Einfluss auf die Schätzergebnisse des SoH hat. Eine GPR mit ARD Kernel zeigt gute Ergebnisse und selbst die Daten einer einzelnen Frequenz reichen aus, um den SoH zu schätzen. Dies ist ein Indikator dafür, dass es nicht notwendig ist, ein vollständiges EIS Spektrum für die Schätzung des SoH zu verwenden, sondern dass einzelne Frequenzen ausreichen können. Der Datensatz wurde auch in anderen Veröffentlichungen genutzt, um den SoH mit datengetriebenen Modellen vorherzusagen. Während in [96] und [97] der Einfluss des Messpunktes nicht weiter analysiert wurde und die Daten von Messpunkt 5 in den Schätzmodellen verwendet werden, werden in [98] die Ergebnisse mit den Daten aus Messpunkt 3 bis 7 verglichen. Dabei wird ein informations-maximierendes Generative Adversarial Network (GAN) verwendet, um automatisch Merkmale aus einem EIS Spektrum zu extrahieren. Zur Vorhersage des SoH wird anschließend eine GPR verwendet. Abweichend zu [95] werden in [98] die besten Ergebnisse mit den Daten von Messpunkt 6 erreicht. Insgesamt wird der Fokus der Arbeiten aber nicht auf die geeignete Auswahl eines Messpunktes gelegt, sondern auf die Optimierung des finalen Schätzmodells. Die Auswahl des Messpunktes wird jedoch als entscheidendes Thema genannt, das in zukünftigen Arbeiten analysiert werden soll.

4.5 Zusammenfassung und Forschungslücken

In dieser Arbeit wird der Zustand von Lithium-Ionen-Batterien auf Basis von ML Algorithmen geschätzt. Bei der Analyse bestehender Modelle aus der Literatur zur SoC Bestimmung zeigt sich, dass besonders die RNNs und CNNs im Fokus der Forschung liegen. Die zentrale Herausforderung dabei ist aber die Übertragbarkeit der Modelle auf weitere Batterietypen.

pen. Gründe dafür sind die limitierten Belastungsbedingungen in der Forschungsumgebung und den Modellevaluationen mit nur einer Batterieart. Da Batterieexperimente sehr zeit- und kostenintensiv sind, könnte die Erstellung von künstlichen Daten zu weitreichenden Kosteneinsparungen führen und den Wechsel auf weitere Batterietypen erleichtern. Diese Themen und die weitere Optimierung von SoC Schätzmodellen werden in Kapitel 6 behandelt. Weiterhin zeigt sich bei der Analyse bestehender Modelle zur Zustandsschätzung von Lithium-Ionen-Batterien, dass jeweils nur eine geringe Anzahl an Zellen verwendet wird, wodurch das Modelltraining behindert wird. Dies zeigt auch die größte Herausforderung, die über alle Zustandsbestimmungen vorhanden ist: eine unzureichende Datenbasis. Bei der Analyse der SoH Schätzmodelle zeigt sich, dass hauptsächlich ein einziger öffentlicher Datensatz zur Entwicklung der Algorithmen verwendet wird. Dies fördert zwar die Vergleichbarkeit der Modelle, erschwert aber gleichzeitig auch die Weiterentwicklung und die Anwendungsmöglichkeiten für Zellen in der Praxis. Hinzu kommt, dass alle Ansätze fast ausschließlich das finale Modell optimieren. Eine ganzheitliche Optimierung von Datenauswahl bis Evaluierung fehlt. Bei dem ML Modell selbst, in diesem Fall einer GPR, herrscht keine Klarheit über die Wahl der Kernelfunktion. Fest steht, dass die unterschiedlichen Alterungsmechanismen durch verschiedene Zeitskalen abgebildet werden können, aber nicht, in wie weit diese durch Funktionen angenähert werden können. Um diese Fragestellungen von Datenauswahl über Vorverarbeitung bis zum Schätzmodell selbst geht es in Kapitel 7. Ziel dabei ist es, bei möglichst geringer Komplexität die höchstmögliche Genauigkeit der Schätzmodelle zu erreichen. Um ein verlässliches Grundkonstrukt zu bilden, werden in dieser Arbeit aufwändige Alterungsexperimente von Lithium-Ionen-Batterien durchgeführt. Diese werden in Kapitel 5 vorgestellt, um die Datenbasis und die getesteten Szenarien der Modelle verstehen zu können. Als letztes wird aufbauend darauf der Zusammenhang zwischen Kapazität und Impedanz analysiert. Dazu gibt es nur eine sehr geringe Anzahl an Veröffentlichungen. Dabei besteht keine Kenntnis über einen Batteriezustand, bei dem eine EIS Messung mit maximalem Informationsgewinn durchgeführt werden sollte. Die in dieser Arbeit durchgeführten Experimente bieten die Möglichkeit dazu. So kann der optimale Zeitpunkt für eine EIS Messung bestimmt und basierend auf den Impedanzdaten der Alterungszustand der Lithium-Ionen-Zellen geschätzt werden. Während in Kapitel 6 und Kapitel 7 der Batteriezustand mit den Parametern Strom, Spannung und Temperatur bestimmt wird, wird in Kapitel 8 besonders auf den Einfluss der Impedanzdaten auf die Schätzergebnisse des SoH eingegangen. Die höchsten Korrelationen zwischen Impedanz und Kapazität gelten dabei als Indikator für die Erstellung von Merkmalen zur datengetriebenen Bestimmung des SoH mit Impedanzdaten.

Im Folgenden sind die zentralen Forschungslücken, die nach der Literaturanalyse identifiziert wurden, nochmals zusammengefasst:

- Künstliche Datenerstellung zur Reduzierung von Experimenten
- Schätzmodelle für mehrere Zelltypen
- Merkmalsextraktion mit reduzierter Komplexität und Rechenaufwand
- Ganzheitliche Optimierung der Modelle

- Auswahl Schätzmodelle zur SoH Bestimmung und Anpassung der Algorithmen an den Alterungsverlauf
- Bestimmung des Zusammenhangs zwischen Impedanz und Kapazität
- Bestimmung eines geeigneten Batteriezustandes für eine EIS Messung mit maximalem Informationsgewinn

5 Datenquellen und Batterietests

In diesem Kapitel werden die durchgeführten Batterietests und die weiteren Datenquellen vorgestellt. In Kapitel 2 wurden die Grundlagen und die Struktur der Lithium-Ionen-Batterien erklärt. Diese sind die Basis, um die Batteriedaten und deren Zusammenhänge zu verstehen. Zuerst werden die Datensätze erläutert, die aus öffentlichen Datenquellen bezogen werden. Dadurch wird zusätzlich eine Vergleichbarkeit geschaffen, da derselbe Datensatz in mehreren Modellen in der Literatur verwendet wird. Dies wurde genauer in Kapitel 4 betrachtet. Abschließend werden in diesem Kapitel die durchgeführten Degradationsexperimente der Lithium-Ionen-Batterien vorgestellt, die Belastungsbedingungen beschrieben und der entstandene Datensatz erklärt.

5.1 Datenquellen

In dieser Arbeit wurden drei verschiedenen Datenquellen genutzt, um die ML Modelle zu trainieren. Erste Datenquelle ist ein öffentlicher Datensatz von vier kommerziellen 18650 Lithium-Ionen-Batterien [88]. Diese wurden abwechselnd von einer Spannungsgrenze von 4,2 V bei einem SoC von 100% bis zu einer unteren Spannungsgrenze von 3,2 V geladen und entladen. Dabei wurden zufällige Strombelastungen zwischen 0,5 und 4 A verwendet. Nach jedem 50. Zyklus dieser zufälligen Belastung wurden die Zellen charakterisiert [99]. Die Belastungsbedingungen sind in Algorithmus 5.1 zusammengefasst.

Algorithmus 5.1: Belastungsprotokoll bei den Alterungstests der Lithium-Ionen-Batterien (vier 18650 Zellen) in [99]

Data: Vier 18650 Lithium-Ionen-Zellen

Result: Belastungs Protokoll Alterungstests

1 Charakterisierung:

2 Lade bis Zellspannung = 4,2 V

3 while *Zellspannung* > 3,2 V **do**

4 Ruhephase für 20 min

5 Lade mit konstantem Strom von 1 A für 10 min

6 Alterungszyklen: for $i \rightarrow 1$ to 50 **do**

7 Lade bis Zellspannung = 4,2 V

8 **while** *Zellspannung* > 3,2 V **do**

9 Wähle zufällig $I \in \{0,5; 1; 1,5; \dots; 4\}$ A

10 Lade mit I für 5 min;

11 Neustart;

Die zweite Datenquelle sind Alterungstests von fünf Batteriezellen des Typs Sony US18650 VTC5 und fünf Zellen des Typs Samsung INR18650 25R. Beides sind 18650 Zellen mit einer $LiNiMnCoO_2$ Zellchemie. Leichte Unterschiede weisen die Zelltypen in ihrer Kapazität und dem maximalen Entladestrom auf. Alle zehn Zellen wurden im sogenannten CC-CV Modus erst mit konstantem Strom von 4 A bis zur Ladeschlussspannung und anschließend in der CV Phase bei konstanter Spannung mit 0,1 A geladen. Die Entladespannung betrug 10 A in einem Spannungsbereich zwischen 2,5 V und 4,2 V. Die Temperatur wurde während der Alterungstests mithilfe einer Temperatorkammer konstant bei 25 °C gehalten. Da die Temperatur entscheidenden Einfluss auf die Alterung von Batteriezellen hat, wurde sie während der Tests konstant gehalten. Somit wird verhindert, dass die Zellen unterschiedlichen Belastungen ausgesetzt werden. Neben Strom und Spannung wurde zusätzlich die Temperatur der einzelnen Zellen gemessen. Die Messfrequenz betrug 0,1 Hz [100]. Die Belastungsbedingungen sind in Algorithmus 5.2 dargestellt.

Algorithmus 5.2: Belastungsprotokoll bei den Alterungstests der Lithium-Ionen-Batterien (fünf Batteriezellen des Typs Sony US18650 VTC5 und fünf Zellen des Typs Samsung INR18650 25R) in [100]

Data: Zehn Lithium-Ionen-Zellen (fünf Sony US18650 VTC5, fünf Samsung INR18650 25R)

Result: Belastungs Protokoll Alterungstests

```

1 while SoH > 0,7 oder Zyklusanzahl < 600 do
2   | Laden CC-CV:
3   |   CC: 4 A
4   |   CV: bis Strom < 0,1 A
5   | Entladen CC:
6   |   CC: 10 A
7   | Ruhephase für 20 min

```

Ein beispielhafter Verlauf der Temperatur während der Entladung über den Lebenszyklus ist in Abb. 5.1 gezeigt.

Somit werden in dieser Arbeit zwei externe Datenquellen für die Entwicklung der Modelle verwendet. Dadurch wird die Vergleichbarkeit mit Schätzmodellen aus der Literatur verbessert. Dennoch ergeben sich auch Nachteile, da bestimmte Lastszenarien und Messdaten in den öffentlichen Datensätzen nicht vorhanden sind. Um den Zusammenhang zwischen Batterieparametern und Zuständen genauer bestimmen zu können, wurden deshalb eigene Batterietests durchgeführt.

5.2 Batterietests

Zusätzlich zu den externen Datenquellen wurden Alterungstests mit Lithium-Ionen-Batterien durchgeführt. Dafür wurde die Batteriezelle Molicel INR21700-P42A mit einer Kapazität von 4,2 Ah verwendet. Neben den umfangreichen Lebensdauertests wurden einzelne Lade- und Entladezyklen mit den Batteriezellen Samsung INR18650-30Q und LG INR18650 HG2

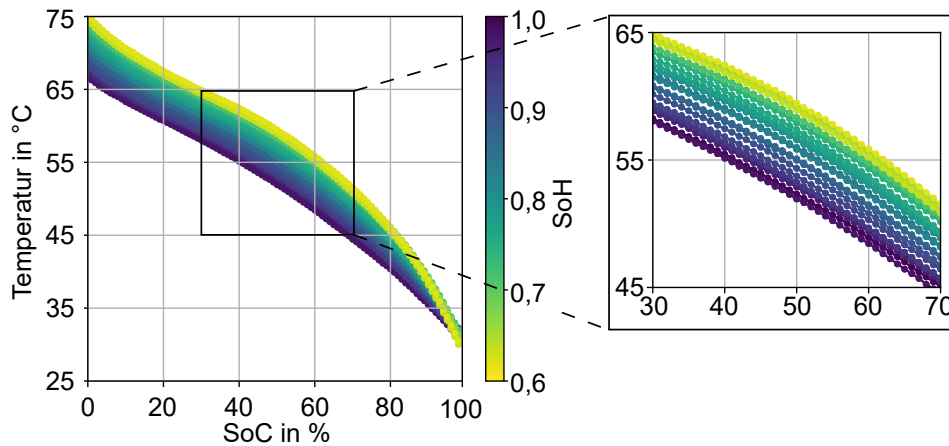


Abbildung 5.1: Temperaturverlauf einer Lithium-Ionen-Zelle Sony US18650 VTC5 während der Entladung mit einem CC-CV Profil über die Degradation. Aus Gründen der Visualisierung ist nur jeder 30. Zyklus gezeigt. Der SoH ist durch die Farbe gekennzeichnet.

durchgeführt. Die Tests wurden mit dem Batterietestsystem OctoStat5000 von Ivium Technologies durchgeführt. Insgesamt wurden bei den Lebensdauertests 48 Molicel INR21700-P42A Lithium-Ionen-Zellen getestet. Mithilfe von zwei Binder Temperaturkammern wurden die Tests bei konstanter Temperatur von 23 °C und 50 °C durchgeführt. Die Entladetiefen betrugen 20-50% und 50-90%. Um eine Pulsbelastung der Zellen zu simulieren, wurde ein DC Strom mit einer Amplitude von 2 A mit einem Sinusstrom mit Amplitude von 2 A überlagert. Die sinusförmige Belastung der Zellen ist in Abb. 5.2 visualisiert.

Während die Stromamplitude gleich bleibt, wird die Frequenz zwischen 10 Hz, 100 Hz, 1 kHz und 10 kHz variiert. Die Messfrequenz lag bei 0,2 Hz. Zusammen mit den zwei unterschiedlichen Temperaturen und Entladetiefen ergeben sich daraus insgesamt 15 Testbedingungen, die in Abb. 5.3 zusammengefasst sind.

Bei jeder Testbedingung wurden drei Zellen getestet, was insgesamt zu 45 Alterungsreihen führt. Hinzu kommen drei weitere Zellen mit einer Entladetiefe von 20-70% bei konstanter Temperatur von 50 °C und den Frequenzen DC, 1 kHz und 10 kHz. Diese Alterungstests wurden für je 50 Zyklen durchgeführt und die Zellen anschließend in einem Prüfzyklus analysiert. Insgesamt wurden die Zellen für 750 Zyklen gealtert und haben dabei 16 Prüfzyklen durchlaufen. Während eines Prüfzyklus wurden Kapazitätstest sowie EIS Messungen durchgeführt. Dabei wurden die Zellen in 10% Intervallen von einem SoC von 100% bis 0% entladen. Zwischen diesen Intervallen wurde die Ruhespannung gemessen und eine EIS Messung durchgeführt. Um fehlerhafte Messungen zu identifizieren, wurden die EIS Messungen drei mal wiederholt, was insgesamt zu einem Datensatz von 25.344 Impedanzspektren führt. Die Impedanz wurde bei insgesamt 48 Frequenzen zwischen 5 kHz und 0,1 Hz gemessen. Die Stromamplitude lag bei 200 mA. Das Belastungsprotokoll ist in

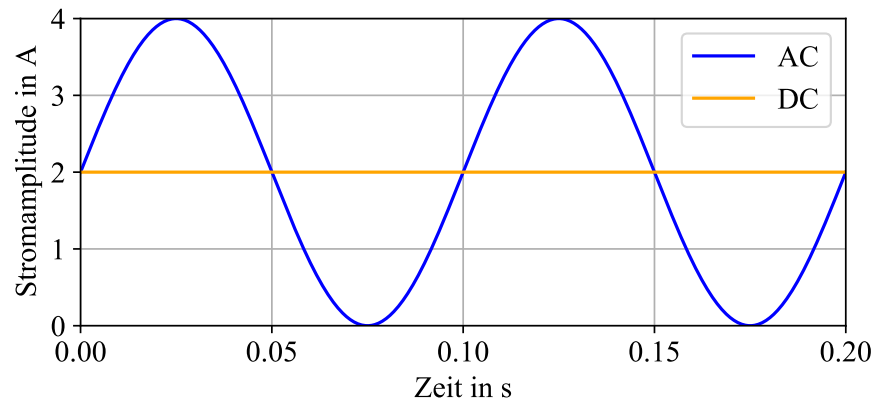


Abbildung 5.2: Belastung der Batteriezellen während den Lebensdauertests. Um eine puls-förmige Belastung zu simulieren, wurde ein sinusförmiger Strom mit Amplitude 2 A mit einem Gleichstrom von 2 A überlagert.

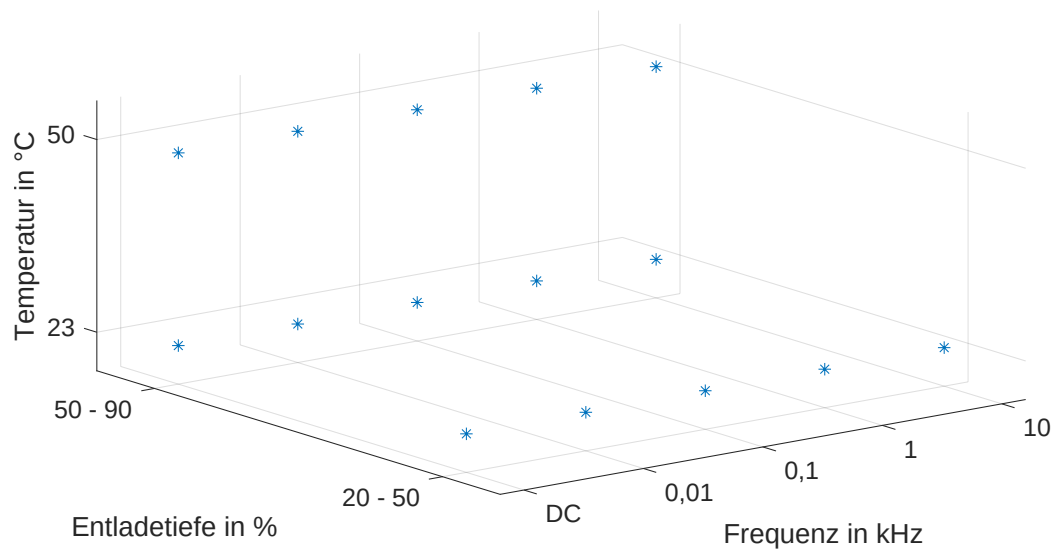


Abbildung 5.3: Testbedingungen der durchgeführten Alterungstests von 45 Lithium-Ionen-Batterien. Jeweils drei Lithium-Ionen-Zellen wurden bei einer Testbedingung getestet.

Algorithmus 5.3 zusammengefasst.

Algorithmus 5.3: Belastungsprotokoll bei den Alterungstests der Molicel-Zellen INR21700-P42A.

Data: 48 Lithium-Ionen-Zellen vom Typ Molicel INR21700-P42A

Result: Belastungs Protokoll Alterungstests

```
1 for  $i \rightarrow 1$  to 16 do
2   Charakterisierung:
3   Laden bis SoC 100 %
4   Entladen mit 3 A
5   Laden CC-CV mit 3 A
6   Entladen mit 2 A
7   Laden CC-CV mit 2 A
8   Entladen mit 0,5 A
9   Laden CC-CV mit 0,5 A
10  while  $SoC \geq 0$  do
11    Ruhephase 3 h
12    EIS-Messung (dreimal)
13    Entladen 10 % SoC mit 3 A
14  Alterungszyklen:
15  for  $j \rightarrow 1$  to 50 do
16    Alterungszyklen
```

Der Verlauf eines Kapazitätstests ist für eine beispielhafte Messung in Abb. 5.4 visualisiert. Dabei wurde die Kapazität während eines vollständigen Lade- und Entladezyklus bei Stromstärken von 3 A, 2 A und 0,5 A gemessen. Durch die Kapazitätsmessungen können die EIS Verläufe einem bestimmten SoH zugeordnet werden.

Insgesamt ergeben sich durch die Charakterisierungszyklen verschiedene EIS Verläufe über den SoC und den SoH. Beispielhafte EIS Verläufe über die Alterung einer Lithium-Ionen-Batterie sind in Abb. 5.5 zu sehen. In Abb. 5.5(a) sind die EIS Spektren über den Lebenszyklus bei einem SoC von 100% gemessen worden und in Abb. 5.5(b) bei einem SoC von 10%. Die Ergebnisse sind im Nyquist Plot dargestellt und der SoH der Zelle ist farblich markiert.

Zusammenfassend wurden in diesem Kapitel die Datenquellen sowie die durchgeführten Batterietests erläutert. Nach den Grundlagen zum Aufbau und den Parametern einer Lithium-Ionen-Zelle in Kapitel 2 wurden in diesem Kapitel die Belastungsbedingungen bei den Lebensdauertests sowie die öffentlichen Datensätze vorgestellt. Anhand von Beispielen wie Temperatur und Impedanz wurde die Änderung der Batterieparameter über die Degradation visualisiert. Die Datenquellen bilden die Grundlage für die Schätzung des SoC und des SoH mithilfe der in Kapitel 3 vorgestellten ML Modelle. Die Ergebnisse der Schätzalgorithmen folgen in Kapitel 6, Kapitel 7 und Kapitel 8.

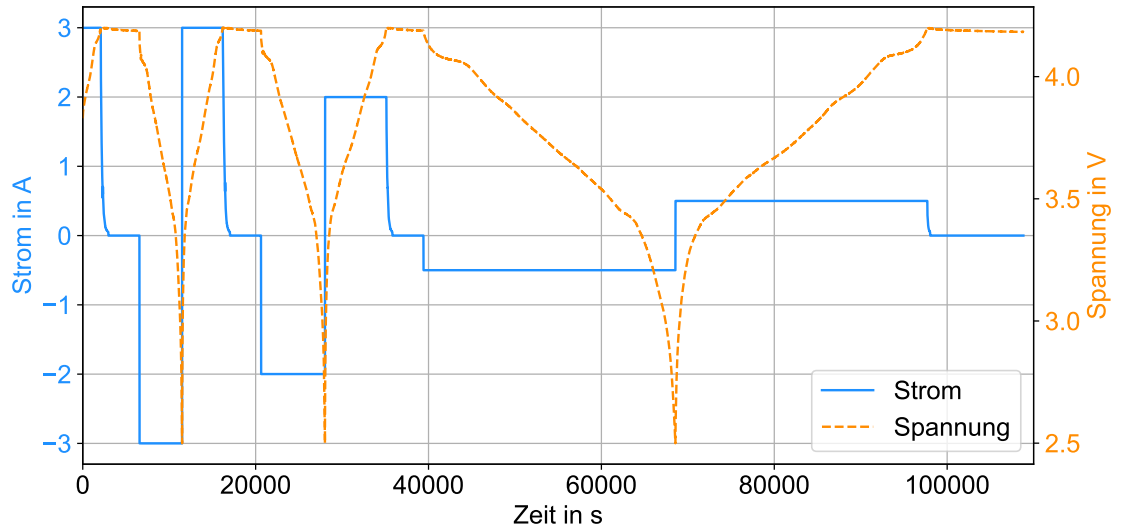


Abbildung 5.4: Strom und Spannungsverlauf einer beispielhaften Zelle während der Kapazitätstests. Dabei wurden die Zellen mit drei Lade- und Entladezyklen mit jeweils 3 A, 2 A und 0,5 A belastet.

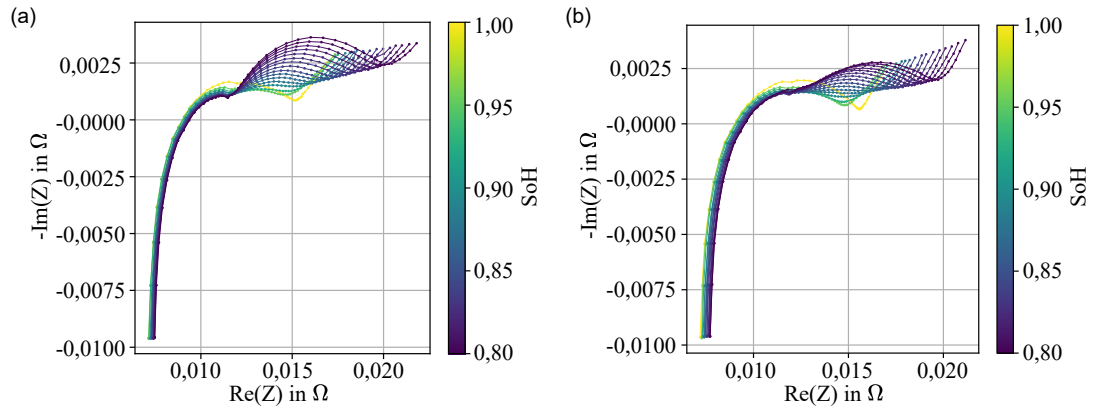


Abbildung 5.5: Entwicklung der Impedanzspektren über die Degradation einer Lithium-Ionen-Zelle Molicel INR21700-P42A gemessen bei einem SoC von 100% (a) und bei einem SoC von 10% (b).

6 Ladezustandsbestimmung durch Maschinelles Lernen

Der Ladezustand SoC einer Batterie ist definiert als das Verhältnis zwischen verbleibender Kapazität zur vollen Kapazität. Eine direkte Messung des SoC ist nicht möglich. Zur Schätzung werden in dieser Arbeit datengetriebene Modelle eingesetzt und zusätzlich die Auswirkungen von Data Augmentation Methoden auf die Schätzergebnisse analysiert. Die Schätzung des SoC ist von hoher Relevanz, da nur dadurch gleichmäßige und effiziente Lade- und Entladezyklen von Batteriesystemen möglich werden. Diese sind wiederum wichtig, um die einzelnen Zellen gleich zu belasten und so die Gesamtlebensdauer des Batteriepacks zu erhöhen. Außerdem kann durch eine genaue Schätzung des SoC der Betrieb des Batteriesystems auf eine möglichst lange Lebensdauer eingestellt werden. Die Schätzmodelle für den SoC werden für drei verschiedene Batteriezellen trainiert und getestet. Die Datensätze für die jeweiligen Zellen werden getrennt und kein gemeinsames Modell entwickelt. Die verwendeten Lithium-Ionen-Zellen waren:

- Samsung INR18650-30Q
- LG INR18650 HG2
- Molicell INR21700-P42A

In diesem Kapitel werden zuerst die entwickelten Data Augmentation Methoden vorgestellt, die für die Erstellung von künstlichen Daten verwendet wurden. Diese werden angewendet, um die Abhängigkeit von Batterietests zu reduzieren und somit Zeit und Kosten für die Experimente zu sparen. Anschließend werden die Ergebnisse der SoC Schätzung vorgestellt. Dabei werden die Modelle mit realen Daten und mit künstlichen Daten trainiert und getestet. Die Ergebnisse werden mit Kombinationen der Datensätze generiert und zeigen somit den Einfluss der Data Augmentation Methoden. Zusätzlich werden verschiedene ML Algorithmen genutzt, um ein optimales Modell mit höchstmöglicher Genauigkeit bei gleichzeitig moderater Komplexität zu entwickeln.

6.1 Data Augmentation Methoden

Da Batterietests teure Hardware benötigen und sehr zeitintensiv sind, wurden künstliche Daten erzeugt, um das Training von ML Modellen zu optimieren. Dabei werden einerseits Batteriesimulationen genutzt und andererseits Batteriedaten künstlich basierend auf realen Batteriedaten erzeugt.

Zuerst wurde ein Ersatzschaltbild einer Batterie mit zwei RC -Gliedern genutzt, um eine Zelle zu simulieren (siehe Abb. 6.1).

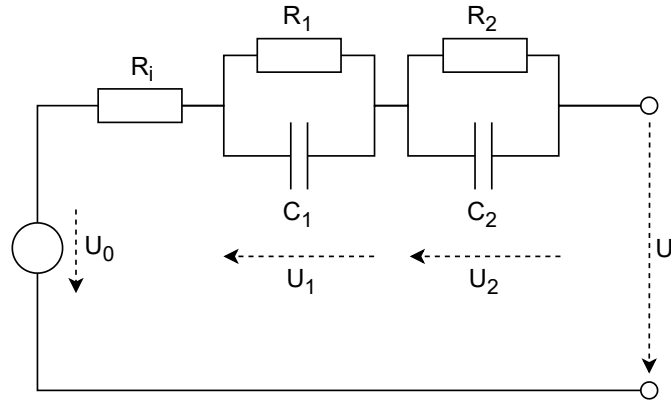


Abbildung 6.1: Ersatzschaltbildmodell einer Batterie mit der Ruhespannung U_0 , dem Innenwiderstand R_i und zwei RC-Gliedern zur Simulation und Erstellung von künstlich generierten Daten zum Training für ML Modelle.

Das Ersatzschaltbildmodell wurde aufgrund der vergleichsweise hohen Genauigkeit bei moderater Komplexität ausgewählt. Die C-Rate wurde bei den simulierten Batterieentladungen und -ladungen in einem Intervall zwischen 0,1 C und 2 C variiert. Insgesamt ist der Verlauf der simulierten Ergebnisse ähnlich zu den realen Daten. Dennoch fällt auf, dass sich der Fehler über eine vollständige Entladung kumuliert und so stetig ansteigt. Um dem entgegen zu wirken und, um eine weitere Annäherung an die realen Daten zu erreichen, wurden die simulierten Spannungswerte in das Intervall zwischen Lade- und Entladeschlussspannung transformiert. Die Transformation der simulierten Spannungswerte über eine Entladung ist in Abb. 6.2 dargestellt. Mit der Ladeschlussspannung V_l und der Entladeschlussspannung V_e wird die Transformation für die simulierten Spannungswerte in Vektor X mit (6.1) berechnet.

$$X_{transform} = \frac{X - X_{min}}{X_{max} - X_{min}}(V_l - V_e) + V_e \quad (6.1)$$

Neben der Verwendung von simulierten Daten wurden zusätzlich künstliche Daten auf Basis von realen Daten erstellt. Dabei wurden Regressionsverfahren verwendet, um die Spannung und die Temperatur aufgrund von Vergangenheitswerten vorherzusagen. Der Strom und der SoC werden im Vergleich zu den realen Daten nicht verändert. Bei der künstlichen Datenerstellung werden die Spannung und die Temperatur variiert, um die leichten Unterschiede des Innenwiderstandes zwischen den einzelnen Lithium-Ionen-Zellen nachzubilden. Um die Überanpassung zu verhindern, wurde bei beiden Regressionsmodellen eine L2-Regularisierung angewendet. Die dazugehörige Verlustfunktion ist in (6.2) dargestellt. Dabei wird der quadratische Fehler zwischen den Schätzwerten $y^*(x_{ij})$ des Modells und den realen Zielwerten y_i minimiert. Für höhere Gewichtungswerte w_j wurde ein Strafterm eingeführt, dessen Einfluss durch den Hyperparameter λ geregelt wird.

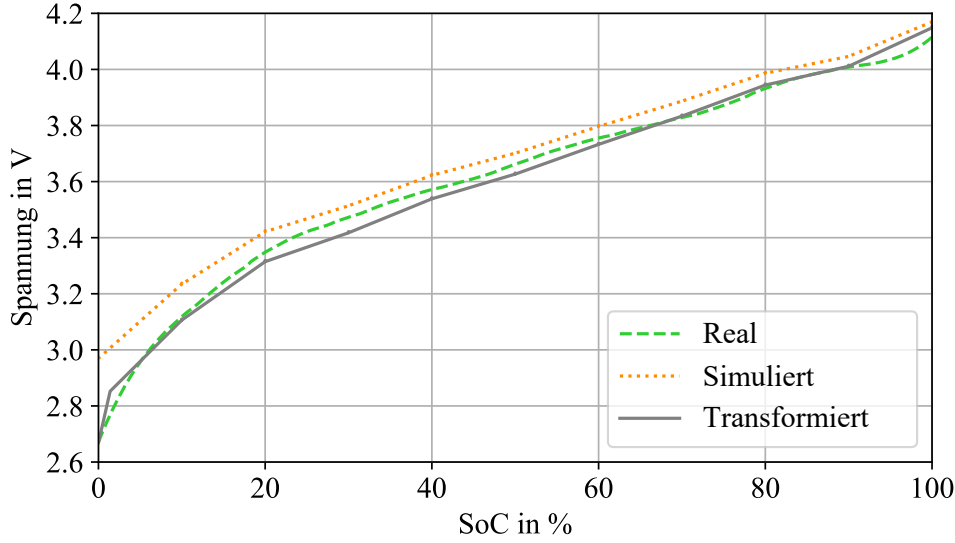


Abbildung 6.2: Transformation der simulierten Spannungswerte in das Intervall zwischen Lade- und Entladeschlussspannung der realen Zellen. Der Verlauf bleibt somit ähnlich zu den simulierten Werten, während der Maximal- und Minimalwert den angegebenen Spannungen aus den Herstellerangaben entspricht.

$$L(w) = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n (y^*(x_{ij}) - y_i)^2 + \lambda \sum_{j=1}^p w_j^2 \quad (6.2)$$

Der jeweilige Wert für Spannung und Temperatur wird mithilfe der letzten zehn Datenpunkte vorhergesagt. Mit einer Messrate von 0,5 s ergibt das eine Gesamtzeit von 10 s, die für die Vorhersage verwendet wird. Die Regressionsformeln für die Zeitreihenvorhersage von Spannung und Temperatur mit angepassten Gewichtungswerten sind in (6.3) und (6.4) dargestellt [101].

$$V_t = 0.003 + 0.078V_{t-10} + 0.079V_{t-9} + 0.080V_{t-8} + 0.085V_{t-7} + 0.090V_{t-6} + 0.094V_{t-5} + 0.103V_{t-4} + 0.117V_{t-3} + 0.122V_{t-2} + 0.154V_{t-1} \quad (6.3)$$

$$T_t = 0.080 - 0.008T_{t-10} + 0.006T_{t-9} - 0.002T_{t-8} - 0.029T_{t-7} + 0.059T_{t-6} - 0.022T_{t-5} - 0.023T_{t-4} + 0.040T_{t-3} + 0.055T_{t-2} + 0.924T_{t-1} \quad (6.4)$$

Nach dem Test der Modelle mit realen Daten auf ihre Genauigkeit werden anschließend die Eingangswerte in einem Intervall variiert und dadurch neue Werte vorhergesagt. Die Varianz, eingeführt durch kleine Fehler der Vorhersage, begünstigt zusätzlich die künstliche Erstellung und die Unterschiede zu den realen Daten. Weiterhin wird die Rechenleistung

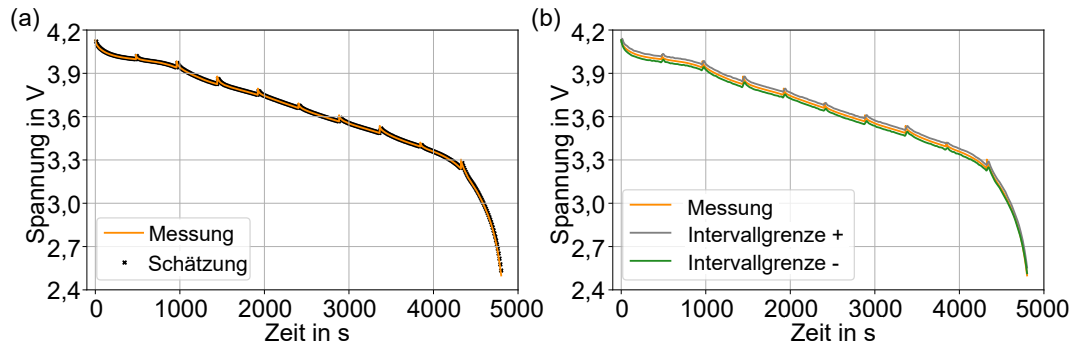


Abbildung 6.3: Ergebnis des Regressionsmodell zur Vorhersage der Spannung für eine vollständige Entladung mit Vergleich zwischen realen Messdaten und Schätzung (a). Darstellung der realen Daten mit positiver und negativer Intervallgrenze für die Erstellung neuer künstlicher Daten (b).

reduziert, indem nur jeder zwanzigste Wert während der Entladung vorhergesagt wird. Die Datenpunkte dazwischen werden interpoliert. Die Auswahl des Intervalls zur Interpolation ist stark von den genutzten Daten abhängig und kann bei gleichmäßiger Entladung höher gewählt werden. Die Genauigkeit des Regressionsmodells für die Spannung ist für eine vollständige Entladung in Abb. 6.3(a) dargestellt. In Abb. 6.3(b) sind reale Daten einer Entladung und die künstlichen Daten mit maximaler positiver und negativer Abweichung dargestellt.

Beide Verfahren zur Erstellung künstlicher Daten werden separat analysiert und der Einfluss auf die Schätzung des Ladezustandes mit ML quantifiziert. Die Data Augmentation Methoden werden ausschließlich auf die Trainingsdaten angewendet, um das Training der Modelle zu optimieren. Obwohl die Komplexität der ML Modelle für die Zustandsschätzung moderat gehalten wird und die KNNs eine geringe Anzahl an Zwischenschichten und Neuronen haben, gibt es dennoch einige Parameter, die trainiert werden müssen. Aufgrund der schlechten Datenlage und der schier unendlichen Möglichkeiten für Umgebungs- und Betriebsbedingungen von Lithium-Ionen-Batterien, tendieren Modelle bei kleineren Datensätzen zur Überanpassung. Die Data Augmentation Methoden sollen dem entgegen wirken. Dennoch muss ein Kompromiss gefunden werden, denn die künstlichen Daten sollen reale Ladungen und Entladungen abbilden. Nach dem Training der Modelle werden für den Test nur reale Daten verwendet. Der Einfluss der künstlichen Daten wird in Hinsicht auf Trainingszeit, Konvergenz und Genauigkeit der Modelle analysiert.

6.2 Ergebnisse

Neben der Analyse des Einflusses von Data Augmentation Methoden werden die Schätzmodelle optimiert, um den SoC möglichst genau vorherzusagen. Dabei werden verschiedene ML Algorithmen analysiert und auf die Eignung für die SoC Bestimmung von Lithium-Ionen-Batterien getestet. Überprüft werden dabei die lineare Regression, die SVM, das

MLP, das CNN und das GRU. Während, wie im vorherigen Abschnitt beschrieben, beim Training der Modelle zusätzlich Simulationsdaten und künstliche Daten verwendet werden, werden beim Test der Modelle nur reale Daten aus Batterieexperimenten genutzt.

Zuerst wurde ein Lineares Regressionsmodell entwickelt, um einen Referenzwert für die komplexeren, nicht-linearen Modelle festzulegen. Um die Überanpassung zu verhindern, wird eine lineare Regression mit L_2 -Regularisierung angewendet. Bei der Analyse der Entladekurve einer Lithium-Ionen-Zelle fällt auf, dass einige Abschnitte linear angenähert werden können. Deshalb wurde neben der Implementierung eines Modells untersucht, ob die vorherige Aufteilung in Spannungsintervalle mit jeweils eigenen linearen Modellen zu einer Verbesserung der Schätzergebnisse führt. Die Spannungsintervalle werden gleichmäßig über den zulässigen Spannungsbereich gewählt. Die Ergebnisse der linearen Regression mit einem und mit bis zu fünf Spannungsintervallen sind in Tabelle 6.1 dargestellt. Neben den Fehlermetriken MAE und RMSE werden die Standardabweichungen der Modellergebnisse gezeigt. Diese resultieren aus fünf Testphasen. Die Ergebniswerte werden über die fünf Testphasen gemittelt.

Tabelle 6.1: Gemittelte Ergebnisse über fünf Testphasen mit Standardabweichung für die Schätzung des SoC mit einem linearen Regressionsmodell mit L_2 -Regularisierung. Das Modell mit dem niedrigsten Test RMSE ist in grau hervorgehoben.

Intervalle	RMSE Training	RMSE Test	MAE Training	MAE Test
eins	4,62 ($\pm 0,008$)%	5,78 ($\pm 0,005$)%	3,61 ($\pm 0,013$)%	4,89 ($\pm 0,005$)%
zwei	1,09 ($\pm 0,013$)%	2,91 ($\pm 0,009$)%	0,88 ($\pm 0,011$)%	2,44 ($\pm 0,004$)%
drei	1,28 ($\pm 0,013$)%	3,13 ($\pm 0,011$)%	0,96 ($\pm 0,013$)%	2,45 ($\pm 0,009$)%
vier	0,97 ($\pm 0,018$)%	2,90 ($\pm 0,012$)%	0,75 ($\pm 0,005$)%	2,40 ($\pm 0,013$)%
fünf	0,99 ($\pm 0,005$)%	2,91 ($\pm 0,013$)%	0,66 ($\pm 0,011$)%	2,34 ($\pm 0,023$)%

Das Modell mit vier Spannungsintervallen weist den niedrigsten Test RMSE mit 2,90% auf. Insgesamt zeigt sich der Trend, dass der Fehler mit mehreren Spannungsintervallen reduziert werden kann. Dennoch ist eine reine Erhöhung der Intervalle nicht sinnvoll, da mehr Intervalle auch eine höhere Rechenleistung erfordern und die Randbereiche zu einem höheren Fehler beitragen. Bei einer höheren Anzahl an Intervallen gibt es folglich auch mehr Randbereiche, was den Fehler wieder ansteigen lässt. Zur Visualisierung des Fehlers sind die Ergebnisse des Modells mit zwei Spannungsintervallen für eine Entladung der Batteriezelle Samsung INR18650-30Q in Abb. 6.4 dargestellt. Dabei ist der reale und der geschätzte SoC mit der realen Spannung geplottet. Zusätzlich werden alle Schätzergebnisse über einem SoC von 100% und unter 0 auf den jeweiligen Randwert gesetzt.

Besonders in der Abbildung wird deutlich, dass die Randbereiche zwischen den Span-

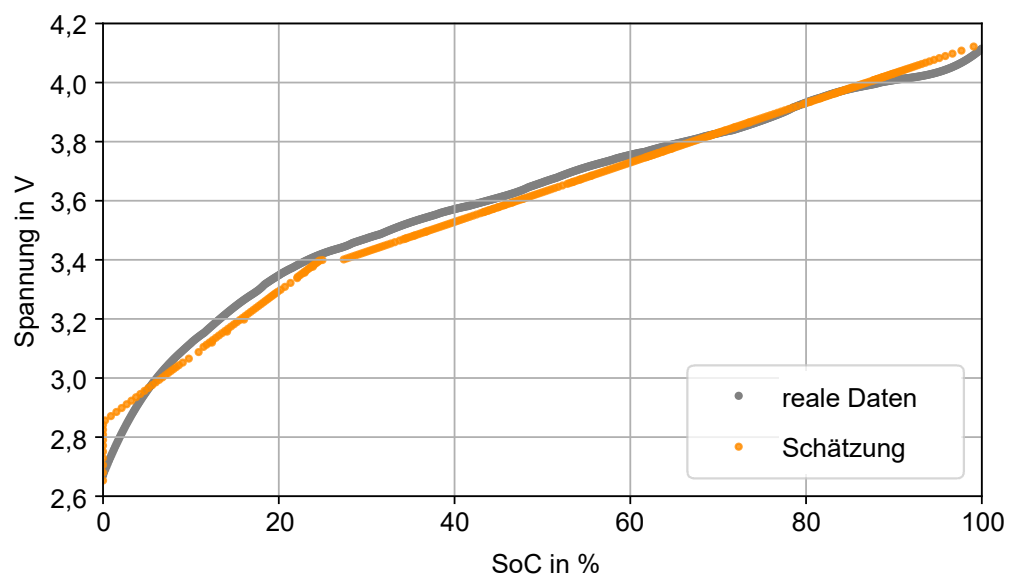


Abbildung 6.4: Ergebnisse des linearen Regressionsmodells mit zwei Spannungsintervallen für eine Lithium-Ionen-Zelle Samsung INR18650-30Q. Alle SoC Werte unter 0 werden auf 0 null gesetzt und alle Werte über 100% auf 100%. Die realen Daten sind grau und die Schätzungen orange markiert.

nungsintervallen zu höheren Fehlern führen. Während in einzelnen Bereichen das lineare Modell ausreichend ist, zeigt sich besonders in den nicht-linearen Bereichen das Potential zur Optimierung. Die Ergebnisse für die restlichen Modelle mit SVM, MLP, CNN und GRU sind in Tabelle 6.2 zusammengefasst. Der Aufbau der Modelle wurde in Kapitel 3 erklärt. Dabei werden die Data Augmentation Methoden für das Modelltraining angewendet. Die Ergebnisse sind ähnlich wie bei dem linearen Modell die gemittelten Werte zwischen fünf Testphasen mit der jeweiligen Standardabweichung.

Tabelle 6.2: Ergebnisse der SoC Schätzung mit den nicht-linearen Modellen SVM, MLP, CNN und GRU. Es werden die gemittelten Werte aus fünf Testphasen mit der jeweiligen Standardabweichung angezeigt. Beim Training der Modelle werden die vorgestellten Data Augmentation Methoden angewendet. Das CNN mit dem niedrigsten Fehler im Vergleich der Modelle ist in grau markiert.

Modell	RMSE Training	RMSE Test	MAE Training	MAE Test
SVM	1,12 ($\pm 0,008$)%	2,87 ($\pm 0,011$)%	0,58 ($\pm 0,004$)%	2,34 ($\pm 0,019$)%
MLP	0,98 ($\pm 0,242$)%	0,98 ($\pm 0,246$)%	0,72 ($\pm 0,222$)%	0,73 ($\pm 0,217$)%
GRU	0,91 ($\pm 0,081$)%	2,53 ($\pm 0,015$)%	0,72 ($\pm 0,064$)%	2,13 ($\pm 0,042$) %
CNN	0,39 ($\pm 0,102$)%	0,44 ($\pm 0,101$)%	0,26 ($\pm 0,071$)%	0,27 ($\pm 0,068$)%

Zuerst fällt auf, dass die nicht-linearen Modelle deutlich höhere Genauigkeiten erreichen. Wird der Testfehler mit dem linearen Modell mit einem Spannungsintervall verglichen, zeigt sich mehr als eine Halbierung des Fehlers. Die SVM als klassisches ML Modell weist einen Test RMSE von 2,87% auf. Besonders mit der vergleichsweise geringeren Komplexität zu den KNNs lassen sich hiermit gute Ergebnisse erzielen. Die geringen Standardabweichungen zeugen zusätzlich von hoher Robustheit. Die Ergebnisse des Modells variieren nicht so stark, was für eine gute Generalisierung des Modells spricht. Zusätzlich kann mit den KNNs eine weitere Reduktion des Fehlers erreicht werden. Das GRU, entwickelt, um die Abhängigkeiten in Sequenzen zu modellieren, zeigt hierbei höhere Fehlerwerte als die anderen beiden Arten. Grund dafür ist vermutlich, dass die Zeitreihen für einzelne Entladungen zu gering sind, um Langzeitbeziehungen aus den Daten zu extrahieren. Sie sind somit nur teilweise für die Bestimmung des Ladezustandes geeignet, da eine signifikante Erhöhung der Komplexität nur in einer geringfügigen Reduktion des Modellfehlers resultiert. Deshalb werden das MLP und das CNN ausgewählt und weiter optimiert. Im Vergleich zu den anderen Modellen wurde eine HKA angewendet, um die Merkmale zu verarbeiten. Ein zusätzlicher Grund für die Vorverarbeitung war die Verhinderung der Überanpassung, da die Fehler zwischen Training und Test bei den übrigen Modellen stärker variierten. Die Auswirkungen der Data Augmentation Methoden für beide Modelle sind in Abb. 6.5 gezeigt. Unterschieden wird dabei in die Verwendung nur realer Daten, die Vergrößerung des Datensatzes um den Faktor 10 mit künstlichen Daten und die Vergrößerung um den Faktor

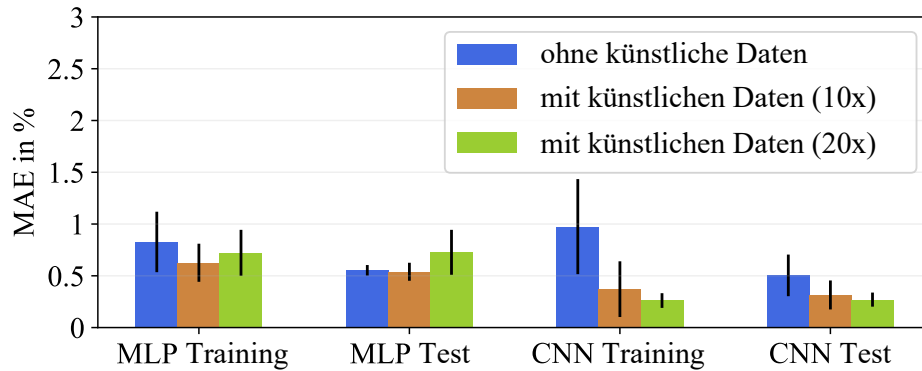


Abbildung 6.5: Einfluss der Data Augmentation Methoden auf die SoC Schätzung von MLP und CNN. Dargestellt sind Fehlerbalken und Standardabweichung für fünf Trainingsdurchläufe für das MLP und das CNN zur SoC Schätzung mit und ohne künstlich erstellte Daten. Eine Aufteilung erfolgt in die Verwendung nur realer Daten, Vergrößerung des Datensatzes durch künstliche Daten um den Faktor 10 und den Faktor 20.

20. Die Fehlerwerte für das CNN sind in Tabelle 6.3 zusammengefasst. Die Auswirkungen auf das MLP sind dabei gering. Beim CNN dagegen zeigt sich eine klare Verbesserung bei der Verwendung von künstlich erstellten Daten zum Training des Modells.

Tabelle 6.3: Ergebnisse der SoC Schätzung mit dem CNN basierend auf künstlich erstellten Daten. Eine Aufteilung erfolgt in die Verwendung nur realer Daten, Vergrößerung des Datensatzes durch künstliche Daten um den Faktor 10 und den Faktor 20.

CNN	RMSE Training	RMSE Test	MAE Training	MAE Test
ohne künstliche Daten	1,17 ($\pm 0,531$)%	0,72 ($\pm 0,249$)%	0,98 ($\pm 0,459$)%	0,51 ($\pm 0,201$)%
mit künstlichen Daten (10x)	0,49 ($\pm 0,315$)%	0,48 ($\pm 0,124$)%	0,37 ($\pm 0,269$)%	0,32 ($\pm 0,140$)%
mit künstlichen Daten (20x)	0,39 ($\pm 0,102$)%	0,44 ($\pm 0,101$)%	0,26 ($\pm 0,071$)%	0,27 ($\pm 0,068$)%

Während das optimierte MLP einen Test RMSE von 0,98% aufweist, kann der Fehler mit dem CNN weiter auf einen RMSE von 0,44% gesenkt werden. Trotz kurzer Sequenzen kann das CNN Muster in den Daten erkennen, um den SoC zu bestimmen. Es weist jedoch höhere Standardabweichungen, induziert durch die zufällig initialisierten Filter, auf. Durch die höhere Anzahl an Parametern und dadurch höhere Zufälligkeit im System zeigt sich eine geringere Robustheit. Dennoch sind die Fehlerwerte deutlich geringer, was die Eignung des Modells zur SoC Schätzung bestätigt. Obwohl alle datengetriebenen Modelle gute

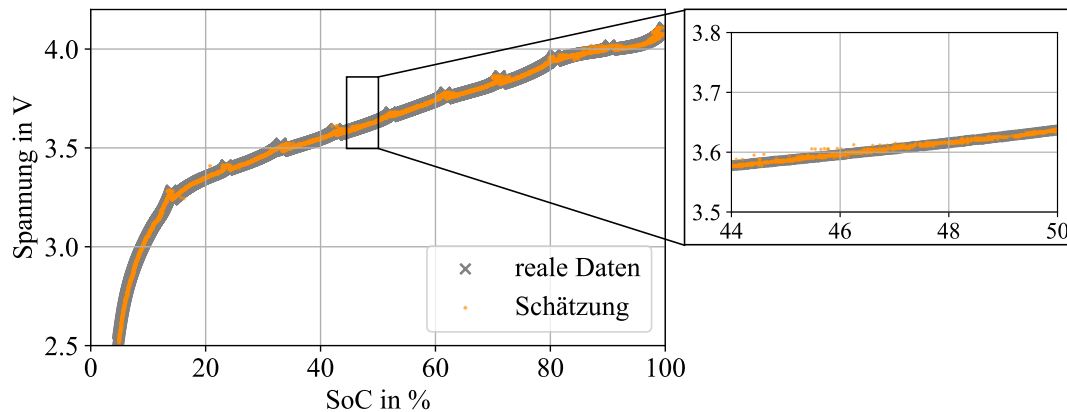


Abbildung 6.6: Ergebnisse der SoC Schätzung mit dem CNN für die Batteriezelle Molicel INR21700-P42A. Die realen Daten sind in grau und mit dem Symbol Kreuz und die Schätzungen in orange mit dem Symbol Punkt markiert. Um die Unterschiede zwischen realen Daten und Vorhersage genauer zu erkennen, ist zusätzlich ein detaillierter Ausschnitt im SoC Bereich zwischen 44 und 50% gezeigt.

Ergebnisse aufweisen und den SoC mit einem Fehler von unter 3% für eine vollständige Entladung schätzen können, zeigt das CNN die besten Ergebnisse. Mit einem finalen RMSE von 0,44% zeigt sich hier das große Potential von datengetriebenen Modellen bei der SoC Schätzung von Lithium-Ionen-Batterien. Die Ergebnisse des CNN Modells anhand einer realen Entladung für die Molicell INR21700-P42A Batteriezelle ist in Abb. 6.6 visualisiert. Da reale Werte und Schätzung sehr nahe beieinander liegen, werden die reale Daten als Kreuze und die Schätzungen als Punkte dargestellt.

Auch die visuellen Ergebnisse zeigen die hohe Vorhersagekraft des Modells. Der reale SoC und die Schätzungen des Modells liegen sehr nahe beieinander. Mit den Filtern entlang der Zeitachse ist es möglich, Muster in den Daten zu erkennen, um den SoC zu bestimmen. Im Vergleich zu den anderen Modellen zeigt sich besonders in den Randbereichen die bessere Vorhersage. Dies ist trotz der geringen Datenlage mit dem CNN möglich.

Datengetriebene Modelle haben enormes Potential, den SoC genau vorherzusagen. Dabei muss kein Hintergrundwissen über die Zelle vorhanden sein und die Modelle müssen nicht über Messverfahren reparametrisiert werden. Während lineare Modelle und klassische ML Modelle wie die SVM moderate Fehler zwischen 2% und 3% aufweisen, ist es mit optimierten KNNs möglich, Fehlerwerte unter 0,5% zu erreichen. Auch die Data Augmentation Methoden führen zu einer Verbesserung der Ergebnisse. So ist es möglich, aufwendige Testreihen für Batteriezellen zu reduzieren und das Training der datengetriebenen Modelle zu optimieren. Durch die Kombination von Optimierungsverfahren in jedem Bereich der Modellentwicklung konnte mit einem CNN ein geringster RMSE für eine vollständige Entladung von 0,44% erreicht werden. Dies beinhaltet die Erstellung von künstlichen Daten, die Datenvorverarbeitung und die Optimierung des finalen Modells. Dadurch konnte ein konkurrenzfähiges Schätzmodell im Vergleich zu konventionellen Schätzverfahren für den

SoC entwickelt werden. Die Verwendung von simulierten und künstlichen Daten bietet neue Möglichkeiten, um Entwicklungszeiten der Modelle zu verkürzen. Dadurch können aufwendige Batterietests reduziert werden. Die Ergebnisse zeigen das große Potential der datengetriebenen Verfahren zur Bestimmung des SoC. Dennoch werden in diesem Fall nur einzelne Entladungen betrachtet, was den zeitlichen Rahmen und die Änderung im Batterieverhalten limitiert. Die Änderung der Batterieparameter und die fortschreitende Alterung der Batteriezellen erschwert die Zustandsbestimmung von Lithium-Ionen-Batterien. Deshalb wird im Folgenden in Kapitel 7 die Degradation der einzelnen Zellen über den gesamten Lebenszyklus betrachtet. Der zeitliche Rahmen der Zustandsbestimmung von wenigen Zyklen in diesem Kapitel wird somit im folgenden Kapitel auf mehrere hundert Zyklen im folgenden Kapitel ausgeweitet, was die Komplexität weiter erhöht. Von einer hochgenauen Bestimmung des aktuellen Punktes im Lebenszyklus einer Lithium-Ionen-Zelle profitiert aber nicht nur die SoC Bestimmung, sondern auch der Betrieb der einzelnen Zelle, der daraufhin dynamisch angepasst werden kann. So bildet die Bestimmung des SoC die Grundlage für die weiteren Modelle und Ergebnisse, die in Kapitel 7 und Kapitel 8 vorgestellt werden.

7 Gesundheitszustandsbestimmung durch Maschinelles Lernen

In diesem Kapitel wird der SoH von Lithium-Ionen-Batterien mithilfe einer GPR bestimmt. Während bei der SoC Bestimmung mehrere Modelle entwickelt und verglichen wurden, wird bei der SoH Bestimmung ein Modell entwickelt und dieses über den ganzen Entwicklungszyklus optimiert. Zuerst werden dabei die Datenvektoren und -matrizen für die Eingangsdaten und die Zielwerte des Modells vorgestellt. Anschließend werden die Ergebnisse der verschiedenen Verfahren zur Datenvorverarbeitung verglichen. Dabei wird unter anderem eine HKA verwendet, wie sie in Abschnitt 3.1.1 gezeigt ist. Danach folgen die Ergebnisse der GPR mit der Posterior Verteilung, wie in Abschnitt 3.1.4 erläutert ist. Abschließend werden die Ergebnisse der Punktschätzung, also der eigentlichen SoH Schätzung, gezeigt und anhand einer beispielhaften Zelle über deren Lebenszyklus visualisiert.

7.1 Datensatz

Es wird ein SoH Schätzmodell entwickelt, das für drei verschiedene Arten von Lithium-Ionen-Zellen verwendet werden kann. Folglich repräsentieren auch die Datensätze jeweils eine Batterieart. Als erstes werden die Daten von vier Batteriezellen aus dem öffentlichen Datensatz der NASA [88] verwendet. Hinzu kommen jeweils fünf Zellen der Art Samsung INR18650 25R sowie Sony US18650VTC5. Alle Zellen haben das 18650 Format. Obwohl es sich bei allen Zellen um NMC Lithium-Ionen-Batterien handelt, bestehen Unterschiede in der Kapazität und im maximalem Entladestrom. Die Zellen aus dem öffentlichen Datensatz wurden zufällig in einem Intervall zwischen $-4,5$ und $+4,5$ A belastet. Nach jedem 1500. Zyklus wurde in einem Referenzzyklus der SoH bestimmt. Da dementsprechend nur für den Referenzzyklus ein Messwert für den SoH vorliegt, wird auch nur dieser Zyklus für die Schätzung verwendet. Die restlichen zehn Zellen werden vollständig in der CC-CV Phase ge- und entladen. Beide Zellarten werden zwischen den Spannungsgrenzen 2,5 und 4,2 V belastet. Geladen wird dabei mit einem Strom von 4 A in der CC Phase und bis zu einer Stromgrenze von 0,1 A in der CV Phase. Entladen wird mit einem Strom von 10 A, um hohe Belastungen zu simulieren. Alle Zellen werden in einer Temperaturkammer mit einer konstanten Temperatur von 25 °C zyklisiert.

Basierend auf den drei initialen Datensätzen werden diese anschließend jeweils erst in einen Trainings- und einen Testdatensatz in einem Verhältnis 80:20 aufgeteilt. Danach wird der Trainingssatz nochmals in den finalen Trainingssatz und einen Validierungssatz im Verhältnis 90:10 aufgeteilt. Aus allen Datensätzen werden die Merkmalsmatrizen erstellt. Die Merkmale zur Schätzung des Zielwerts SoH sind dabei Strom, Spannung und Temperatur von verschiedenen Zeitpunkten. Die Gesamtzahl an Zeitpunkten für einen Zielwert ergeben eine vollständige Entladung. Die initiale Merkmalsmatrix ist in Abb. 7.1 visualisiert.

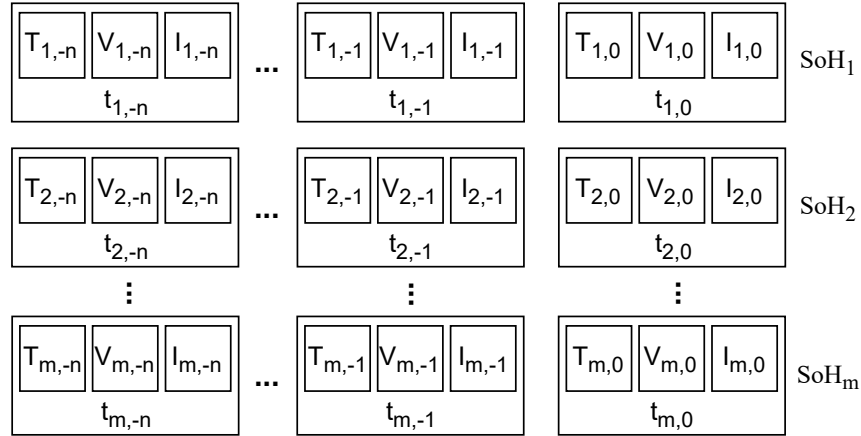


Abbildung 7.1: Initiale Merkmalsmatrix für die SoH Schätzung mit einer GPR. Die Merkmalsmatrix ist m Zeilen und 3 mal n Spalten groß und besteht aus jeweils Strom-, Spannungs- und Temperaturwerten für n Zeitschritte. Zeitpunkt 0 ist jeweils der letzte Punkt der Entladung. Mit steigendem n steigt somit auch der SoC.

Zeitpunkt 0 ist dabei das Ende der Entladung. Jeder Zeitschritt davor geht in die Vergangenheit bis zum Beginn der Entladung. Die Messrate liegt bei 10 s. Insgesamt hat der Zielvektor eine Länge von 7581. Das bedeutet, es gibt 7581 Referenzwerte für den SoH. Abhängig von den gewählten Zeitschritten liegt die Spaltenanzahl der Merkmalsmatrix bei 300. Dadurch ist die Anzahl an Spalten, also die Anzahl an Merkmalen für einen Zielwert, kleiner als die Zeilenanzahl, also die Anzahl an Zielwerten. Dennoch sind sie in einem ähnlichen Bereich, was die Überanpassung von Modellen verstärken kann. Die Gründe dafür wurden im Zusammenhang mit dem Fluch der Dimensionalität bereits in Abschnitt 3.1.1 erläutert. Obwohl GPRs im Vergleich zu anderen ML Modellen nicht so anfällig für eine Überanpassung sind, werden dennoch Verfahren zur Dimensionsreduktion angewendet und der Einfluss auf die Modellergebnisse analysiert. Als Kernel für die GPR wird eine Kombination aus dem RBF und dem Rational Quadratic Kernel verwendet. Damit wird ein ARD Kernel mit verschiedenen Längenskalen verwendet, um den Einfluss von nicht-relevanten Merkmalen automatisch zu reduzieren. Der Rational Quadratic Kernel trägt zusätzlich dazu bei, die Robustheit gegen Ausreißer zu erhöhen.

7.2 Datenvorverarbeitung

Bevor die Daten im Schätzmodell verwendet werden, werden sie vorverarbeitet. Um die Dimension zu reduzieren, werden zwei Methoden verglichen: die HKA und eine manuelle Reduktion der Merkmale. Dabei werden die Zeitschritte in die Vergangenheit schrittweise verringert und die Modelle ausgewertet. Ziel ist es, die Anzahl an Zeitschritten zu finden, bei der die Schätzungen ihr Optimum erreichen. Zusätzlich zu diesen beiden Verfahren wird

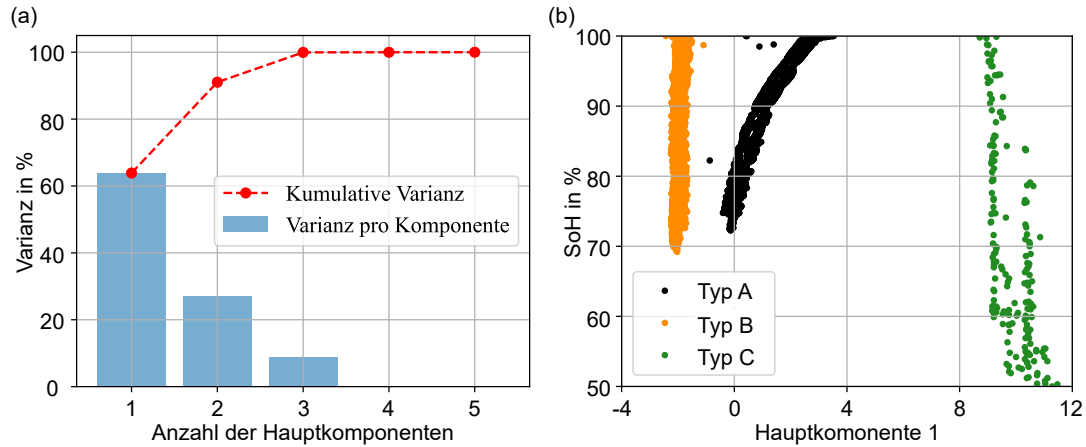


Abbildung 7.2: Varianz der einzelnen Hauptkomponenten und kumulative Varianz bei der HKA (a) und Darstellung des Zielwerts SoH über die erste Hauptkomponente (b). Hauptkomponente 1 beinhaltet knapp über 60% der initialen Varianz. Der SoH über Hauptkomponente 1 zeigt die Varianz der Daten und die Unterschiede der drei verwendeten Lithium-Ionen-Batterien.

eine sogenannte Oversampling Strategie verwendet, um künstlich neue Daten zu erstellen. Der Algorithmus dazu wird Synthetic Minority Over-Sampling Technique for Regression with Gaussian Noise (SMOGN) genannt [102]. Dabei werden zuerst die Zielwerte mit einer Relevanzfunktion verarbeitet und in das Intervall zwischen 0 und 1 skaliert. Dabei wird berechnet, welche Bereiche in den Daten gut und schlecht repräsentiert sind [103]. Abhängig davon werden neue Datenpunkte basierend auf den k nächstgelegenen Datenpunkten künstlich erstellt und in die Merkmalsmatrix integriert. Die Methode zur Erstellung wird Synthetic Minority Over-Sampling for Regression (SMOTER) genannt [104]. Anschließend wird der Einfluss der Methode auf die Schätzergebnisse analysiert.

Zuerst zu den Ergebnissen der Dimensionsreduktion mit der HKA. Ziel dabei ist es, die Varianz in den Ursprungsdaten auch möglichst im neuen Koordinatenraum zu erhalten. Bereits mit fünf Hauptkomponenten werden 99,99% der initialen Varianz abgedeckt. Der Verlauf der Varianz über eine steigende Anzahl an Hauptkomponenten ist in Abb. 7.2(a) visualisiert. Dementsprechend werden fünf Hauptkomponenten gewählt und für die Eingangsdaten in das Schätzmodell vorbereitet. Es ist auch erkennbar, dass der Hauptanteil der Varianz mit den ersten drei Hauptkomponenten abgedeckt wird. In der Folge wird die kumulative Varianz nur noch leicht erhöht. In Abb. 7.2(a) ist der Zielwert SoH über der ersten Hauptkomponente dargestellt. Während die Darstellung eines Merkmals aus Strom, Spannung oder Temperatur noch keinen Aufschluss auf den Batterietyp gibt, kann anhand der ersten Hauptkomponente der Batterietyp erkannt werden. Es sind drei verschiedene Datenfelder für die drei verwendeten Batterietypen erkennbar. Dies zeugt zusätzlich vom Erhalt der wichtigen Informationen trotz der Transformation in einen niedrig dimensionalen Raum.

Zusätzlich können die Unterschiede der Alterung durch die verschiedenen Punktwolken

erkannt werden. Bei Typ A und Typ B wurden die Batteriezellen mit demselben Belastungsprotokoll ge- und entladen. Dadurch liegen die verschiedenen Punkte dicht beieinander. Bei Typ C, mit den Ladezyklen mit zufällig gewählter C-Rate, liegen die Punkte weiter auseinander. Zuletzt sind noch die Gesamtmengen an Datenpunkten im Vergleich erkennbar. Da der öffentliche Datensatz nur vier Batteriezellen enthält, sind dementsprechend auch weniger Datenpunkte für diesen Typ vorhanden. Im Folgenden wird der Einfluss der Datenvorverarbeitung auf die Schätzergebnisse analysiert und es werden die Ergebnisse der SoH Schätzung vorgestellt.

7.3 Ergebnisse und Diskussion

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse für die verschiedenen Vorverarbeitungsmethoden verglichen und der Einfluss auf die Genauigkeit bestimmt. Die Ergebnisse werden anschließend im Bezug auf Modellparameter und Anwendbarkeit in der Praxis diskutiert.

7.3.1 Einfluss der Hauptkomponentenanalyse

Zuerst werden die Ergebnisse des Modells mit der HKA analysiert. Die Ergebnisse sind für den Trainings-, Validierungs- und Testdatensatz in Tabelle 7.1 zusammengefasst. Dabei ist der Mittelwert und die Standardabweichung von zehn Trainingsphasen des Modells dargestellt.

Tabelle 7.1: Ergebnisse der SoH Schätzung mit der HKA. Es werden die gemittelten Werte aus zehn Trainingsphasen mit der jeweiligen Standardabweichung angezeigt.

Metrik	Mittlerer Fehler	Standardabweichung
RMSE Training	2,793	0,645
RMSE Validierung	3,005	0,146
RMSE Test	3,039	0,301
MAE Training	1,398	0,327
MAE Validierung	1,405	0,083
MAE Test	1,431	0,152

Trainings-, Test- und Validierungsfehler liegen nahe beieinander, was ein Indikator ist, dass keine Überanpassung stattfindet. Zusätzlich liegt der absolute Fehler unter 1,5%, was die hohe Genauigkeit der Schätzung beweist. Das Modell hat eine hohe Robustheit, was besonders durch die geringen Standardabweichungen bei dem Validierungs- und dem Testdatensatz bewiesen wird.

7.3.2 Manuelle Merkmalsextraktion

Neben der HKA wird analysiert, wie sich eine Reduktion der verwendeten Zeitschritte auswirkt. Somit wird die Dimension der Eingangsdaten manuell reduziert. Dabei werden die Zeitschritte in die Vergangenheit bei einem Startpunkt von einem SoC von 0% verringert. Das bedeutet, dass hauptsächlich die Daten in einem niedrigen SoC Bereich für die SoH

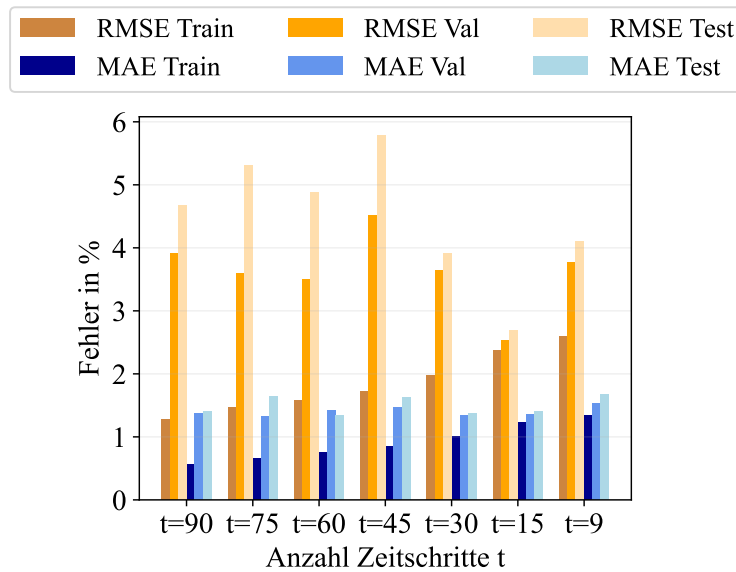


Abbildung 7.3: Vergleich der Schätzergebnisse für den SoH für die Dimensionsreduktion durch die Verringerung der Zeitschritte. Dargestellt sind der RMSE und der MAE für den Trainingsdatensatz, den Validierungsdatensatz und den Testdatensatz. Bei beispielsweise 30 Zeitschritten werden die ersten 30 Messwerte in die Vergangenheit ab Ende einer Entladung betrachtet.

Vorhersage verwendet werden. Abhängig von der Anzahl der verwendeten Zeitschritte wird die Dimension des Problems geändert und somit auch die Anfälligkeit des Modells für eine Überanpassung verringert. Es wird analysiert, wie viele Zeitschritte zu dem niedrigsten Fehler bei der SoH Schätzung führen. Die Ergebnisse sind in Abb. 7.3 dargestellt.

Es fällt auf, dass bei mehreren Zeitschritten beim Schätzmodell eine Überanpassung an die Trainingsdaten auftritt. Dabei sind die Trainingsfehler am niedrigsten und die Testfehler am höchsten. Die Differenz zwischen Training-, Validierungs- und Testfehler ist dabei am höchsten. Diese Fehler bleiben bei fortschreitender Reduktion der Zeitschritte erst konstant. Ab circa 45 Zeitschritten nähern sich die Fehlerwerte an. Obwohl die Trainingsfehler steigen, zeigt das Modell nun eine bessere Generalisierbarkeit und die Genauigkeit bei unbekannten Daten steigt. Das Optimum liegt bei 15 Zeitschritten. Dieses Modell wird auch im Folgenden weiter betrachtet. Auffällig ist zusätzlich, dass eine weitere Reduktion wieder zu steigenden Fehlern führt. Dabei kommt es zur Unteranpassung. Das bedeutet, dass zu wenig Daten vorhanden sind, um den Zusammenhang zwischen Eingabe- und Zielwert zu beschreiben.

7.3.3 Einfluss der Oversampling Strategie

Zusätzlich zu den beiden Verfahren zur Dimensionsreduktion wird die Oversampling Strategie angewendet. Dadurch werden Datenpunkte in Bereichen, die in den initialen Daten schlecht abgedeckt sind, künstlich erzeugt und dem Trainingsdatensatz hinzugefügt. Die Ergebnisse mit der Oversampling Strategie sind in Tabelle 7.2 gezeigt.

Tabelle 7.2: Ergebnisse der SoH Schätzung mit der Oversampling Strategie. Es werden die gemittelten Werte aus zehn Trainingsphasen mit der jeweiligen Standardabweichung angezeigt.

Metrik	Mittlerer Fehler	Standardabweichung
RMSE Training	7,492	0,196
RMSE Validierung	11,171	1,834
RMSE Test	8,993	3,147
MAE Training	1,369	0,065
MAE Validierung	6,857	2,305
MAE Test	6,862	2,837

Im Vergleich zu den Ergebnissen der zwei Dimensionsreduktionsverfahren sind die Fehlerwerte höher. Während der Trainingsfehler in einem ähnlichen Bereich ist, sind die Validierungs- und Testfehler deutlich erhöht. Die künstlich erstellten Daten führen folglich zu einer Verschlechterung und können die realen Daten, besonders in den Randbereichen, nicht abbilden.

7.3.4 Modellvergleich und finales Schätzmodell

Besonders bei der Datenvorverarbeitung werden verschiedene Verfahren implementiert und der Einfluss auf die Schätzergebnisse analysiert. Der Vergleich der Ergebnisse mit den drei verschiedenen Methoden ist in Abb. 7.4 dargestellt.

Auffallend dabei ist, dass die Oversampling Methode zu einer schlechten Generalisierbarkeit des Modells führt und die Testfehler somit höher sind. Deshalb wird die Oversampling Strategie für die weitere Optimierung nicht mehr verwendet. Die HKA und die Reduktion der Zeitschritte führen zu ähnlichen Fehlerwerten. Da die Standardabweichung für mehrere Trainingsphasen des Modells mit der HKA höher ist, wird die Reduktion der Zeitschritte als Verfahren zur Vorverarbeitung der Daten gewählt. Die Fehler des finalen Modells sind in Tabelle 7.3 zusammengefasst.

Die Fehlerwerte zeigen, dass die Reduktion der Zeitschritte zu einer Verbesserung der Ergebnisse führt. Somit werden hauptsächlich Daten bei der Schätzung verwendet, die im niedrigen SoC Bereich liegen. Insgesamt kann damit die Notwendigkeit einer geeigneten Datenvorbereitung bewiesen werden. Allein die Extraktion von Merkmalen aus den initialen Daten bewirkt eine signifikante Änderung der Genauigkeit. Obwohl eine GPR im Vergleich zu anderen datengetriebenen Modellen nicht so anfällig für die Überanpassung ist, konnten diese Phänomene mit den initialen Daten festgestellt werden. Die Reduktion der Dimension der Eingangsdaten ist somit entscheidend für die Optimierung der Schätzmodelle. Die HKA führt zu geringen Fehlern, dennoch müssen bei der Durchführung die

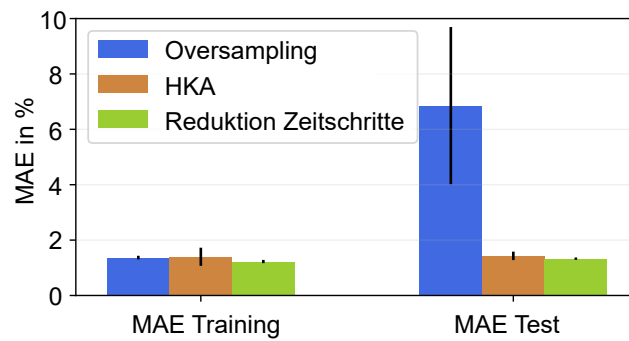


Abbildung 7.4: Vergleich der SoH Schätzergebnisse für die zwei verschiedenen Verfahren zur Dimensionsreduktion sowie für die Oversampling Strategie. Dargestellt ist der MAE für den Trainings- und den Testdatensatz mit der dazugehörigen Standardabweichung für zehn individuelle Trainingsphasen der GPR.

Tabelle 7.3: Ergebnisse der SoH Schätzung mit der reduzierten Anzahl an Zeitschritten. Es werden die gemittelten Werte aus zehn Trainingsphasen mit der jeweiligen Standardabweichung angezeigt.

Metrik	Mittlerer Fehler	Standardabweichung
RMSE Training	2,376	0,130
RMSE Validierung	2,478	0,196
RMSE Test	2,777	0,361
MAE Training	1,226	0,058
MAE Validierung	1,305	0,114
MAE Test	1,330	0,042

vollständigen Daten einer Entladung gespeichert werden, bevor daraus die Hauptkomponenten berechnet werden. Durch die Reduktion der Zeitschritte kann im Vergleich zur HKA die Genauigkeit nochmals erhöht werden. Zusätzlich ist dabei weniger Rechenaufwand und Speicher nötig. Neben den Verfahren zur Dimensionsreduktion wurde ein Verfahren zur Erstellung von künstlichen Datenpunkten untersucht, in diesem Fall der SMOGN Algorithmus. Da Batterietests sehr zeit- und kostenaufwendig sind und es schier unendliche Möglichkeiten an Umgebungs- und Belastungsbedingungen gibt, können geeignete Data Augmentation Verfahren die Zustandsbestimmung von Lithium-Ionen-Batterien weitreichend optimieren. Da die einzelnen Batterieparameter aber stark miteinander korrelieren, ist die Erstellung von künstlichen Batteriedaten komplex. Während bei der Ladezustandsbestimmung die untersuchten Data Augmentation Methoden zu einer Verbesserung führen, zeigt sich bei der SoH Bestimmung eine Verschlechterung. Die Zusammenhänge zwischen den Parametern können mit der Data Augmentation Methode über die Batteriealterung nicht abgebildet werden. Das Verfahren basiert auf dem k-Nearest-Neighbor Algorithmus und erstellt neue Datenpunkte basierend auf k bereits existierenden Punkten. Da aber verschiedene Parameterkombinationen denselben Zustand beschreiben können, führt das Data Augmentation Verfahren zu einer Verschlechterung. Dabei ist aber auch nicht auszuschließen, dass Data Augmentation Methoden zu einer Verbesserung eines Schätzmodells führen können. Aufgrund der Zusammenhänge zwischen den Batterieparametern, die von der jeweiligen Zellchemie abhängig sind, ist zu bezweifeln, dass es eine universelle Lösung für dieses Problem gibt. Eine Alternative könnte die Batteriesimulation sein, die aber auch zellabhängig ist und einen höheren Entwicklungs- und Rechenaufwand benötigt.

Mit dem finalen Modell mit der Reduktion der Zeitschritte kann ein geringster Test MAE bei der SoH Schätzung von 1,33% erreicht werden. Bei einer GPR wird zuerst eine Prior Verteilung, unabhängig von den einzelnen Datenpunkten, und anschließend eine Posterior Verteilung, angepasst an die Daten, bestimmt. Aus der Posterior Verteilung sind beispielhaft vier Funktionen in Abb. 7.5 gezeigt. Dabei wird der Mittelwert der Verteilung als Funktion für die Schätzung verwendet.

Die Beispielfunktionen der Posterior Verteilung weisen Schwankungen um die Mittelwertsfunktion auf. Der Mittelwert zeigt dagegen einen glatten Verlauf mit einzelnen Fluktuationen. Besonders im hohen und im niedrigen SoH Bereich sind geringe Schwankungen erkennbar. Da besonders die Randbereiche in den verwendeten Daten unterrepräsentiert sind, können damit die Ausreißer erklärt werden. Auch fällt auf, dass die Ausreißer im hohen SoH Bereich meist unter dem Mittelwert und im niedrigen SoH Bereich meist über dem Mittelwert liegen. Dadurch werden die Werte potentiell zuerst unter- und bei höherer Zyklenanzahl überschätzt. Dies ist mit der Prior-Verteilung zu erklären, bei der die Mittelwertsfunktion zur Beschreibung der Daten gewählt wurde. Im mittleren SoH Bereich sind Schwankungen in beide Richtungen zu erkennen. Der Mittelwert der Posterior Verteilung dient anschließend als Schätzfunktion des Modells. Für eine beispielhafte Testzelle sind die realen Daten, die Schätzwerte und ein 95% Konfidenzintervall in Abb. 7.6 abgebildet. Die Grenzen des Konfidenzintervalls wurden mit der Standardabweichung und dem Faktor $|1,96|$ berechnet. Folglich liegen die Schätzungen mit einer Wahrscheinlichkeit von 5% außerhalb des Intervalls. Da die realen Werte und die Schätzungen nahe beieinander liegen, ist eine detaillierte Ansicht für eine Zyklenanzahl zwischen 300 und 400 Zyklen dargestellt.

Innerhalb des Konfidenzintervalls beträgt die Abweichung vom Mittelwert unter $|2|\%$.

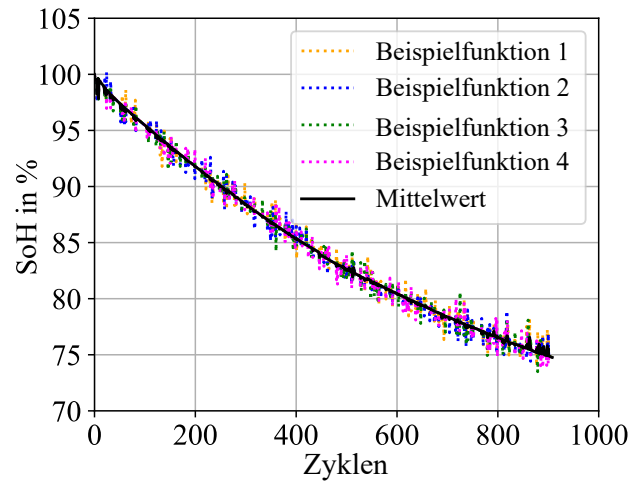


Abbildung 7.5: Posterior Verteilung der GPR mit vier Beispielfunktionen für eine Batterie-zelle. Die Beispielfunktionen und der Mittelwert der Verteilung sind für den SoH Verlauf einer Zelle dargestellt. Die Mittelwertsfunktion der Posterior Verteilung wird für die Punktschätzung, also die eigentliche Schätzung des SoH, verwendet.

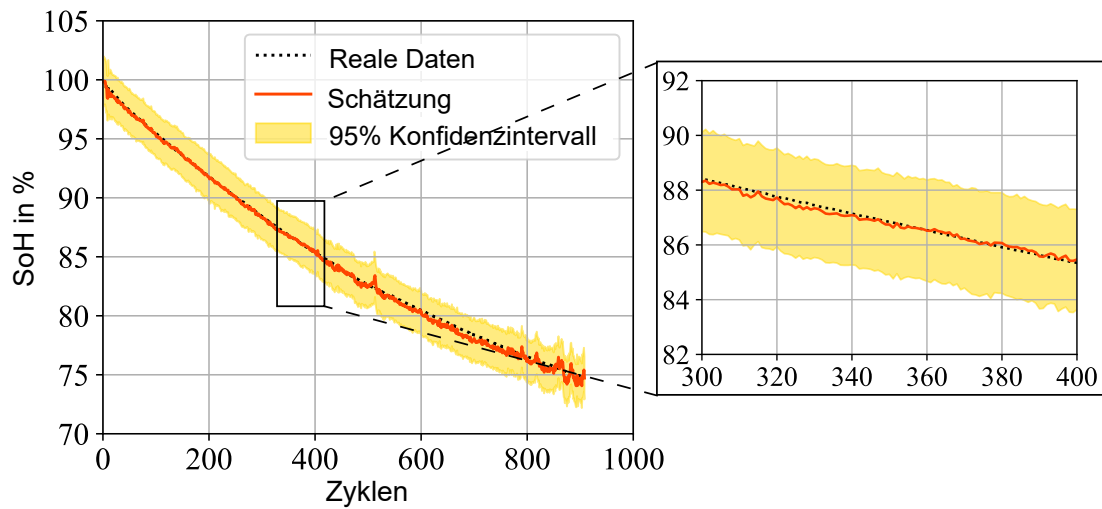


Abbildung 7.6: Ergebnisse der finalen GPR für eine beispielhafte Testzelle mit den realen SoH Werten, der Schätzung und dem 95% Konfidenzintervall. Zusätzlich genauere Darstellung im Bereich 300 bis 400 Zyklen für einen detaillierten Vergleich zwischen realen Werten und der Schätzung.

Das heißt, dass der Fehler bei der Schätzung mit hoher Wahrscheinlichkeit unter 2% liegt. Zusätzlich bleibt das Intervall über den Lebenszyklus konstant. Dennoch zeigt sich auch hier in den Randbereichen ein erhöhtes Intervall. Während im hohen SoH Bereich das Intervall nach wenigen Zyklen kleiner wird, können im niedrigen SoH Bereich höhere Schwankungen festgestellt werden. Die Unsicherheit bei der Schätzung steigt leicht an. Dies ist ab circa 800 Zyklen erkennbar. Insgesamt ist die Schwankung bei der SoH Schätzung gering. Dies wird durch den gewählten Kernel erreicht, durch den das Modell Kurzzeit- und Langzeitbeziehungen abbilden kann. Die verschiedenen Lade- und Entladebedingungen sowie die Abdeckung der Randbereiche durch den Datensatz erschweren die Schätzung. Im kleineren Ausschnitt zwischen 300 und 400 Zyklen zeigt sich, dass, obwohl die realen Werte und die Schätzungen nahe beieinander liegen, die Abweichung sowohl positiv als auch negativ ist. Dies deutet daraufhin, dass die Wahl der Priorverteilung mit Mittelwert gleich null geeignet ist. Anderenfalls würden die Schätzungen meist nur negative Abweichungen von den realen Werten haben.

Die Batterien wurden im Forschungsumfeld getestet und die Varianz an Lade- und Umgebungsbedingungen ist nicht mit der Realität vergleichbar. Dennoch zeigen die Ergebnisse die Vorhersagekraft von datengetriebenen Modellen und das Potential zur Zustandsbestimmung von Lithium-Ionen-Batterien. Für das finale Modell werden die letzten 15 Zeitschritte einer Entladung verwendet. Dadurch muss nicht ein vollständiger Entladezyklus gespeichert und verarbeitet, sondern nur eine begrenzte Anzahl an Zeitschritten gespeichert werden. Besonders im Vergleich zu Modellen aus der Literatur, bei denen aufwendige Algorithmen zur Merkmalsextraktion angewendet werden, ergibt sich hierbei ein Vorteil im Hinblick auf die Rechenleistung. Wie in Abschnitt 4.3 beschrieben, werden dabei Fehlerwerte zwischen 1 und 3% erreicht, was leicht geringere Genauigkeiten wie in dem vorgestellten Modell liefert. Dabei zeigt sich die hohe Abhängigkeit der Modelle von der gewählten Kernel-Funktion. Insgesamt geht der Trend zur Verwendung von einem ARD Kernel, wobei die genaue Zusammensetzung des Kernels von Ansatz zu Ansatz variiert. Die Kombination von einem RBF und einem Rational Quadratic Kernel hilft dabei, die langfristige Degradation mit kurzzeitigen Schwankungen durch Belastungs- und Umgebungsbedingungen abzubilden. Zusätzlich lässt der verwendete Bereich der Daten auf höhere Korrelationen zwischen Batterieparametern und dem SoH in einem niedrigen SoC Bereich schließen. Diese Phänomene werden im Zusammenhang mit der Impedanzbestimmung in Kapitel 8 weiter analysiert.

Insgesamt zeigt das Modell eine hohe Vorhersagekraft, was besonders im Hinblick auf die Nutzung von drei verschiedenen Batterietypen entscheidend ist. Dabei muss das Modell nicht für jeden Batterietyp oder über den Lebenszyklus parametrisiert werden. Es ist möglich, den SoH ohne Hintergrundwissen über die Vergangenheit der einzelnen Zellen zu schätzen. Die Lithium-Ionen-Zellen werden bis zu einem SoH zwischen 50 und 70% zyklisiert. In einer automobilen Anwendung werden die Lithium-Ionen-Batterien meist nur bis zu einem SoH von 80% verwendet. Da die größten Fehler bei der Schätzung erst nach diesem Punkt auftreten, würde das den Einsatz des Modells weiter begünstigen. Darüber hinaus muss keine feste Alterungsgrenze für den Austausch der Zellen gewählt werden, sondern es kann, durch die genaue Schätzung, abgewartet werden, bis es zu einem starken Abfall der Kapazität kommt. Besonders für neue Batteriechemien ist dies von Vorteil, da Alterungsstudien sehr zeitintensiv sind. Abgesehen von Schwankungen bei einem sehr hohen SoH ist die Unsicherheit bei der Schätzung bis zu einem Wert von 0,8 konstant.

Das finale Modell weist einen MAE von 1,33% auf vorher unbekannte Testdaten auf. Dies zeigt die hohen Genauigkeiten, welche mit dem datengetriebenen Modell erreicht werden können. Die entscheidenden Vorteile gegenüber konventionellen Schätzmethoden sind die Anwendbarkeit auf mehrere Zelltypen unter verschiedenen Belastungsbedingungen und die einmalige Parametrisierung des Modells. Dadurch müssen die Modellparameter nicht über den Lebenszyklus angepasst werden. Obwohl das Modell im Forschungsfeld gute Ergebnisse liefert, muss es für eine reale Anwendung weiter optimiert werden. Die verwendeten Belastungsszenarien decken nur einen geringen Anteil der möglichen Bedingungen ab und somit ist die Übertragbarkeit auf die Realität nur begrenzt möglich. Dennoch ist besonders die Datenvorverarbeitung mit der Extraktion von einer geringen Anzahl an Zeitschritten eine effektive Methode, um den Fehler bei der SoH Schätzung zu reduzieren. Die Ergebnisse des Modells zeigen das große Potential von datengetriebenen Modellen zur Schätzung des SoH ohne die Approximation der einzelnen elektrochemischen Prozesse und die hohen Genauigkeiten über den gesamten Lebenszyklus einer Lithium-Ionen-Batterie.

Die SoH Schätzung ist entscheidend für den optimalen Betrieb von Batterien. Nur bei einer genauen Schätzung können die Belastungsbedingungen auf einzelne Zellen angepasst werden. Zusätzlich können die Batterien länger genutzt werden, bis es zu einem stärkeren Abfall der Kapazität kommt, anstatt die Batterien nur bis zu einem vorher definierten SoH zu verwenden. Der Fokus der Modelle in Kapitel 6 und in diesem Kapitel ist, die gemessenen Parameter, wie Strom, Spannung und Temperatur, zu nutzen, um den SoH zu schätzen. Dadurch ist keine aufwendige Verarbeitung der Daten nötig und die Algorithmen sind auch in der Praxis anwendbar. Neben der Reduktion der Kapazität kommt es bei Lithium-Ionen-Batterien auch zur Erhöhung der Impedanz über die Alterung. Diese ist vom Batteriezustand, wie dem SoC oder dem SoH, aber auch von den Umgebungsbedingungen, wie der Temperatur, abhängig. Durch eine EIS Messung können nicht nur einzelne elektrochemische Prozesse innerhalb der Zelle analysiert, sondern es kann auch die fortschreitende Alterung einer Lithium-Ionen-Zelle bestimmt werden. Aufgrund der Abhängigkeit von den Zuständen ist es von großer Bedeutung, den genauen Zustand während der Messung zu kennen. Aufbauend auf der SoC Schätzung in Kapitel 6 und der SoH Schätzung in Kapitel 7, wird in Kapitel 8 der optimale Zeitpunkt für eine EIS Messung bestimmt. Darüber hinaus ist es möglich, die verbleibende Kapazität über die Impedanz zu schätzen. Die Ergebnisse der SoH Schätzungen basierend auf Impedanzdaten folgen in Kapitel 8 und schließen somit die ganzheitliche Analyse von Lithium-Ionen-Batterien mit datengetriebenen Modellen ab.

8 Datengetriebene Optimierung der Impedanzbestimmung

Die EIS ist eine zerstörungsfreie Prüfmethode, um die elektrochemischen Prozesse innerhalb einer Batteriezelle zu analysieren. Dabei wird die Impedanz bestimmt, die in Abschnitt 2.2 vorgestellt wurde. Neben der Bestimmung des SoH und des SoC kann der Zustand des Lithium-Platings bestimmt werden, welches der wichtigste Alterungsmechanismus bei Lithium-Ionen-Batterien ist. Da eine EIS Messung zeit- und kostenaufwendig ist, werden die EIS Spektren oftmals mithilfe von Ersatzschaltbildmodellen geschätzt. In diesem Kapitel wird erst die Parametrisierung von Ersatzschaltbildern mit ML Modellen vorgestellt und anschließend die Korrelation zwischen Impedanz und Kapazität berechnet. Bei einer Messung oder einer genauen Schätzung der Impedanz wäre es damit möglich, die verbleibende Kapazität und somit den SoH zu bestimmen. Zusätzlich werden die Frequenzen der EIS Messung mit der höchsten Korrelation bestimmt, um diese in Schätzmodellen für den SoH zu verwenden.

8.1 Impedanzbestimmung mithilfe Ersatzschaltbildmodellen

Ersatzschaltbildmodelle werden oftmals zur Annäherung an Batterieverhalten verwendet. Diese bestehen aus mehreren elektrischen Elementen. Durch komplexere Modelle kann das Verhalten von Batterien gut approximiert werden. Dabei wird aber auch der Rechenaufwand erhöht. Simpler Modelle haben bei geringerem Rechenaufwand eine niedrigere Genauigkeit. Zusätzliches Problem bei den Ersatzschaltbildmodellen ist die Parametrisierung, die selbst bei der Erstparametrisierung einen hohen Messaufwand erfordert und über den Lebenszyklus einer Lithium-Ionen-Batterie angepasst werden muss.

8.1.1 Ersatzschaltbildmodell

In diesem Fall wird ein Ersatzschaltbildmodell mit einer Spannungsquelle U_{OCV} , einer Induktivität L , zwei RC -Gliedern und einem Warburg Element W benutzt. Dieses ist in Abschnitt 2.2 in Abb. 2.4 dargestellt. Ziel ist es, zuerst das Ersatzschaltbildmodell mit einem ML Verfahren zu parametrisieren und anschließend den Impedanzverlauf mit dem parametrisierten Modell zu schätzen. Anhand des verwendeten Ersatzschaltbildmodells ergibt sich die Formel für die Berechnung der Impedanz in (8.1).

$$Z = i2\pi fL + \frac{R_1}{1 + i2\pi fR_1C_1} + \frac{1}{i2\pi fC_2 + \frac{1}{R_2 + (1-i)*\frac{W}{\sqrt{2\pi f}}}} \quad (8.1)$$

Mit dem Ersatzschaltbildmodell und der dazugehörigen Formel wurden EIS-Spektren durch Simulationen erstellt. Dabei werden die Parameter des Ersatzschaltbildmodells in

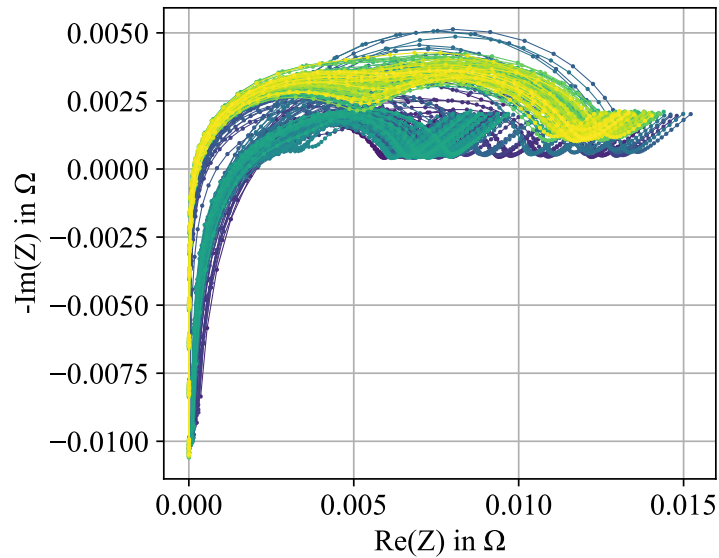


Abbildung 8.1: Nyquist Plot der simulierten EIS Verläufe, die als Trainingsdaten für ein MLP zur Parametrisierung von Ersatzschaltbildmodellen verwendet werden. Die Verläufe werden durch die Variation der Parameter des Ersatzschaltbildmodells bestimmt.

Intervallen variiert, um einen breiten Bereich an möglichen EIS Verläufen abzudecken. Diese Daten werden für das Training eines MLP verwendet, das für die Parametrisierung von Ersatzschaltbildmodellen genutzt werden soll. Die Trainingsdaten sind in Abb. 8.1 visualisiert.

8.1.2 Testdaten und Schätzmodell

Als Testdaten werden EIS Messungen der in Kapitel 5 vorgestellten Molicel Zelle 21700 P42a verwendet. Die Messungen wurden bei konstanter Temperatur von 23 °C für 48 Frequenzen zwischen 0,1 und 5000 Hz bei einer Stromamplitude von 200 mA durchgeführt.

Zur Bestimmung der Hyperparameter des MLP für die Schätzung der Parameter des Ersatzschaltbildmodells wurde eine Rastersuche verwendet. Durch das Training des MLP mit verschiedenen Kombinationen an Werten wurden die optimalen Hyperparameter bestimmt. Diese sind in Tabelle 8.1 zusammengefasst.

Aus den initialen Daten, den Real- und Imaginärteilen der Impedanz für 48 Frequenzen, werden Merkmale extrahiert. Dabei wird die Varianz der verschiedenen Werte über den SoC analysiert. Die vier Frequenzen mit der höchsten Varianz werden im MLP verwendet, da durch diese Frequenzen der höchste Einfluss auf die Ergebnisse erwartet wird. Es handelt sich dabei um 0,1 Hz, 0,25 Hz, 0,79 Hz und 2,51 Hz. Somit liegen alle im Niederfrequenzbereich. Zusätzlich findet eine Skalierung der Werte in das Intervall zwischen 0 und 1 statt. Diese Merkmale werden als Eingangsdaten in das MLP genutzt und bis zur Ausgangsschicht mit sechs Elementen verarbeitet. Die sechs Elemente bilden die Werte für

Hyperparameter	Wert
Anzahl Zwischenschichten	3
Anzahl Neuronen Zwischenschicht 1	30
Anzahl Neuronen Zwischenschicht 2	40
Anzahl Neuronen Zwischenschicht 3	20
Aktivierungsfunktion	ReLU
Lernrate	0,1
Optimierverfahren	Adam
Metrik	R^2 -Wert

Tabelle 8.1: Hyperparameter des MLP zur Schätzung der Parameter eines Ersatzschaltbildmodells. Die Werte werden über eine Rastersuche bestimmt.

die sechs Parameter des Ersatzschaltbildmodells. Anschließend wird das parametrisierte Ersatzschaltbildmodell genutzt und mit (8.1) der Impedanzverlauf berechnet. Es handelt sich somit um ein Kombinationsmodell aus MLP und Ersatzschaltbildmodell, das in zwei Stufen den vollständigen Impedanzverlauf basierend auf vier Frequenzen schätzt.

8.1.3 Ergebnisse und Diskussion

Im vorgestellten Modell werden erst die Parameter eines Ersatzschaltbildmodells geschätzt und darauf aufbauend die Impedanzverläufe einer Lithium-Ionen-Batterie. Der Vergleich zwischen den realen Messungen und den Schätzungen des Kombinationsmodells ist in Abb. 8.2 für verschiedene SoCs gezeigt. Dabei zeigt Abb. 8.2(a) die realen Messungen und Abb. 8.2(b) die Schätzungen des Modells.

Zuerst ist auffällig, dass der Impedanzverlauf über den SoC geschätzt werden kann. Die Bereiche der Messungen und Schätzungen liegen in einem ähnlichen Bereich. Dennoch zeigt sich, dass der Einfluss der Eingangsmerkmale gering ist und somit die Schätzungen näher beieinander liegen. Der Einfluss eines sich ändernden SoCs wird damit leicht unterschätzt. Werden die absoluten Werte verglichen, sind besonders in den Randbereichen größere Abweichungen zu erkennen. Während bei einem mittleren SoC die höchsten Genauigkeiten bestimmt wurden, sind bei einem hohen und einem niedrigen SoC höhere Fehler messbar. Dies liegt vermutlich an den Trainingsdaten, die durch Simulationen erstellt werden. In diesen Daten ist das Verhalten bei einem mittleren SoC stärker abgebildet, was auch zu höheren Genauigkeiten führt. Die Impedanzspektren variieren in den Randbereichen höher, was damit auch die Schätzung erschwert. Trotzdem sind die Unterschiede bei einem variierenden SoC erkennbar. Bei hohen Frequenzen ist der Verlauf sehr ähnlich. Somit kann das induktive Verhalten sehr gut approximiert werden. Bei mittleren und hohen Frequenzen werden die Unterschiede größer, was auf die schlechtere Nachbildung des kapazitiven Verhaltens zurück zu führen ist. Dennoch ist das Modell mit geringerer Sensitivität der Eingangsmerkmale robuster gegen Ausreißer, was ein Vorteil bei dem Wertebereich der Impedanzspektren von Lithium-Ionen-Batterien ist. So führt eine geringfügige Änderung eines Parameters des Ersatzschaltbildmodells zu einer größeren Änderung im Impedanzverlauf. Zusätzlich zeigt sich im Vergleich zu den Messungen ein nahezu linearer Verlauf

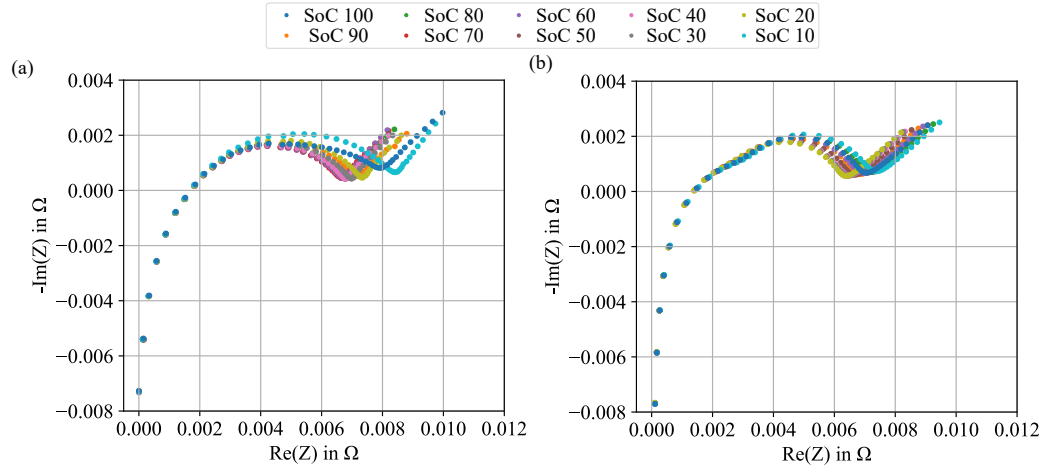


Abbildung 8.2: Nyquist Plot der realen Messungen (a) und der Schätzungen durch das MLP und dem Ersatzschaltbildmodell (b). Die EIS Verläufe sind für verschiedene SoCs in einem Bereich zwischen 10 und 100% in 10% Intervallen dargestellt.

nach dem Durchtritt der Realachse. Grund dafür ist der überlappende Bereich zwischen der Induktivität und dem ersten RC Glied, was die Approximation des Halbkreises mit dem Ersatzschaltbildmodell erschwert. Da dies aber nur den Bereich bis zum Scheitelpunkt des Halbkreises betrifft, wird die Genauigkeit der Schätzung nur leicht beeinflusst. Um den Unterschied zwischen Messungen und Schätzungen genauer zu analysieren, wurden der SoC von 30% in Abb. 8.3(a) und der SoC von 70% in Abb. 8.3(b) ausgewählt, um die Werte für einzelne Frequenzen zu vergleichen.

Bei hohen Frequenzen zeigt sich eine gute Approximation des Impedanzverlaufs, obwohl die Punkte höhere Abweichungen aufweisen. Die hohen Genauigkeiten im hochfrequenten Bereich werden trotz der Eingangsmerkmale im niedrigfrequenten Bereich erzielt. Nach dem Durchtritt der Realachse liegen die Datenpunkte der Messungen und der Schätzungen nahezu aufeinander. Dies liegt aber auch an der Datenverteilung, die in diesem Abschnitt dichter wird. Nach dem Scheitelpunkt kommt es zu einer kurzzeitigen Erhöhung des Fehlers, was an den Folgen des linearen Bereichs vor dem Scheitelpunkt liegt. Somit wird die Form des Halbkreises nicht optimal angenähert. Dennoch zeigen sich besonders im Bereich des Halbkreises sehr niedrige Fehler zwischen den Mess- und den Schätzwerten. Besonders zeigt sich eine hohe Genauigkeit bei der Schätzung des Innenwiderstands, also dem Schnittpunkt des Impedanzspektrums mit der Realachse. Die Schätzung ist für einen SoC von 70% leicht besser. Dies ist nicht nur für den Innenwiderstand, sondern für das vollständige Spektrum der Fall. Dennoch werden auch bei einem SoC von 30% hohe Genauigkeiten erreicht. Der Ladungstransferwiderstand, der Endpunkt des Halbkreises, wird für beide SoCs genau bestimmt. Besonders die hochgenaue Schätzung der charakteristischen Punkte der Impedanz, wie Innen- und Ladungstransferwiderstand, ist von hoher Relevanz und zeigt die Vorteile des Modells. Der letzte Anstieg im niedrigfrequenten Bereich wird durch das

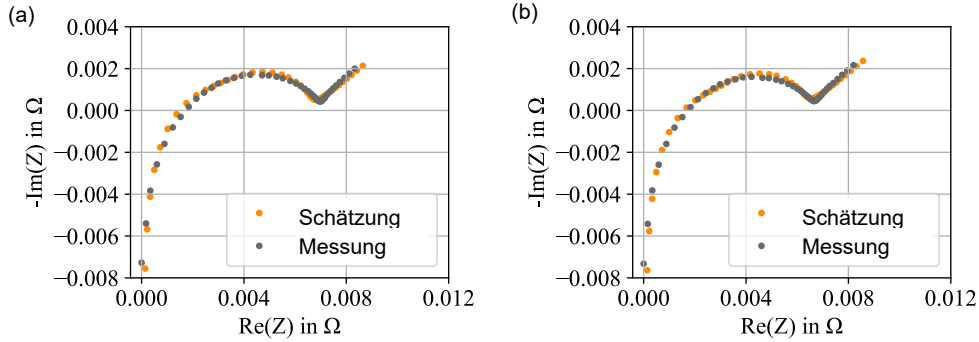


Abbildung 8.3: Vergleich der realen EIS Messungen und der Schätzung durch das Kombinationsmodell im Nyquist Plot bei einem SoC von 30% (a) und einem SoC von 70% (b).

Warburg Element angenähert. Beim Beginn sind hohe Genauigkeiten erkennbar, aber in der Folge bis zur niedrigsten Frequenz zeigen sich leicht erhöhte Fehlerwerte. Dies ist nicht intuitiv, da vier Frequenzen genau in diesem Bereich für die Schätzung der Parameter des Ersatzschaltbildmodells verwendet werden. Vermutlich resultiert der Fehler aber nicht aus der Parameterschätzung, sondern aus der EIS Schätzung des Ersatzschaltbildmodells und in diesem Fall dem Warburg Element. Dies betrifft das ganze Spektrum. So gibt es einen Fehler, der durch die Parameterschätzung entsteht und einen zweiten Fehler, der durch die Annäherung durch das Ersatzschaltbildmodell entsteht. Der zweite Fehler ist in diesem Fall aber konstant. Es ist erkennbar, dass trotz der moderaten Komplexität des Ersatzschaltbildmodells hohe Genauigkeiten bei der Schätzung der EIS Spektren erreicht werden. Besonders bei einem längeren Zeithorizont mit einer notwendigen Reparametrisierung des Ersatzschaltbildmodells ergeben sich neue Möglichkeiten durch das Kombinationsmodell. So kann die Parametrisierung mit einzelnen Frequenzen durchgeführt und somit Kosten und Zeitaufwand für Messungen reduziert werden.

Insgesamt zeigt sich, dass ein Impedanzspektrum mit einem Kombinationsmodell aus KNN und Ersatzschaltbildmodell mit hoher Genauigkeit geschätzt werden kann. Die Abhängigkeit der Impedanz von den Umgebungsbedingungen und den Zuständen erschwert die Schätzung aber deutlich. Dies ist bereits über einen variierenden SoC erkennbar, bei dem die Randbereiche höhere Fehler aufweisen. Der Einfluss des SoH, also die Änderung der Impedanz über mehrere hundert Zyklen, ist stärker als der der Temperatur oder des SoC. Dennoch ist es von hoher Relevanz, das EIS Spektrum einer Lithium-Ionen-Batterie über den gesamten Lebenszyklus zu messen oder zu schätzen, da dadurch die elektrochemischen Prozesse innerhalb der Zelle analysiert werden können und der Zustand der Zelle hochgenau und zerstörungsfrei bestimmt werden kann. Damit, also um den Zusammenhang zwischen Impedanz und Kapazität über den Lebenszyklus von Batterien, beschäftigt sich das folgende Kapitel.

8.2 Zusammenhang zwischen Impedanz und Kapazität

Besonders der Zusammenhang zwischen Impedanz und Kapazität ist entscheidend, um die Bestimmung des SoH über eine EIS-Messung zu optimieren. Dies wird erschwert, da der Batteriezustand und die Umgebungsbedingungen erheblichen Einfluss auf die Messung haben. So ergeben sich beispielsweise unterschiedliche Impedanzverläufe bei demselben SoH für unterschiedliche Temperaturen oder Ladezustände. Ziel der Forschung ist es, unabhängig von der Temperatur, den SoC zu bestimmen, bei dem die höchste Korrelation zwischen der Impedanz und der Kapazität besteht. Die Korrelation wird gemittelt über den Lebenszyklus der Batteriezellen berechnet. Dafür werden 48 Zellen vom Typ Molicell INR21700-P42A in Alterungsreihen getestet, wie in Kapitel 5 beschrieben wird. Durch die verschiedenen Testbedingungen ergeben sich daraus 25344 EIS-Messungen. Dabei wird einzeln für jeweils die Real- und Imaginärteile der Impedanz für 48 verschiedene Frequenzen die Korrelation zum SoH berechnet. Die Frequenzen befinden sich in einem Intervall zwischen 0,1 Hz und 5 kHz. Insgesamt gibt es damit 96 Werte, bestehend aus dem Real- und Imaginärteil der Impedanz, für jeden Ladezustand von 100% bis 0% in 10% Intervallen. Dadurch soll der SoC identifiziert werden, bei dem die Korrelation zwischen Impedanz und SoH am größten ist. Dafür werden die in Abschnitt 3.1.1 vorgestellten Korrelationswerte verwendet, um den Zusammenhang zwischen Impedanz und Kapazität zu quantifizieren. In diesem Kapitel werden als erstes die Ergebnisse der Korrelationsanalyse detailliert betrachtet. Dabei wird ein geeigneter SoC für die Durchführung einer EIS-Messung bestimmt und anschließend werden die Frequenzen nach ihrer Korrelation sortiert. Das Ergebnis wird mit zwei ML Modellen validiert, indem die Korrelationen zur Merkmalsextrahierung für die SoH Schätzung basierend auf EIS Daten verwendet werden. Dabei wird eine SVR, wie in Abschnitt 3.1.3 beschrieben, und ein MLP, wie in Abschnitt 3.2.1 vorgestellt, entwickelt, um die Korrelationsergebnisse zu validieren und den SoH von Lithium-Ionen-Batterien zu schätzen.

8.2.1 Korrelationsergebnisse

Als Korrelationskoeffizienten werden die Pearson Korrelation für lineare Zusammenhänge und die Distanz Korrelation für nicht-lineare Zusammenhänge verwendet. Zuerst wird die lineare Korrelation zwischen Impedanz und Kapazität berechnet. In Abb. 8.4 ist das Histogramm mit allen Pearson Korrelationen über einem Wert von $|0,7|$ dargestellt. Dabei sind auf der x-Achse die verschiedenen Ladezustände und auf der y-Achse die Anzahl an Korrelationswerten über $|0,7|$ dargestellt.

Insgesamt zeigen sich hohe Korrelationen zwischen der Impedanz und dem SoH. Die größte Anzahl an Werten über $|0,7|$ ist bei einem SoC von 100% und 10% erkennbar. Dazwischen fallen die Werte erst ab, bis ein Minimum bei einem SoC von 50% erreicht ist, und steigen dann wieder. Bei einem SoC von 0% zeigen sich dagegen die geringsten Werte der Korrelation. Dies deutet darauf hin, dass die Ladezustände 10% und 100% am geeignetsten sind, um den SoH mithilfe der Impedanz zu bestimmen. Neben der Pearson Korrelation wird auch die Distanz Korrelation ausgewertet, um nicht-lineare Zusammenhänge zu berücksichtigen. Eine detaillierte Darstellung der Korrelation für die Pearson und die Distanz Korrelation über die verschiedenen Ladezustände ist in Abb. 8.5 dargestellt. Dabei zeigt

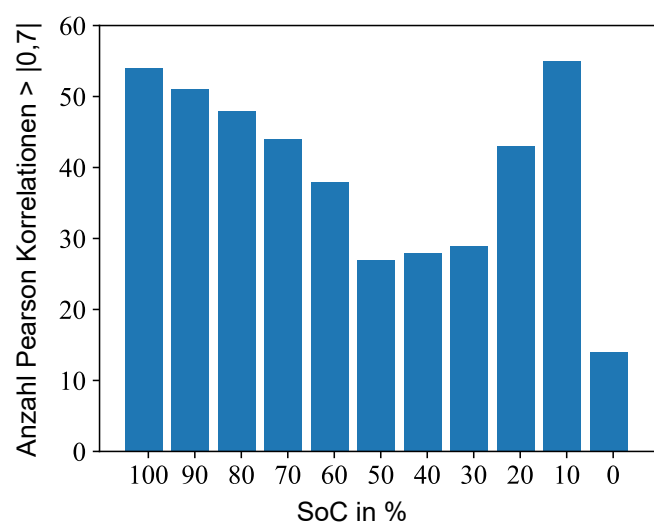


Abbildung 8.4: Histogramm der Pearson Korrelation mit Werten über $|0,7|$ zwischen den Real- und Imaginärteilen der Impedanz und dem SoH, dargestellt für einen abnehmenden SoC. Insgesamt werden 96 Korrelationswerte für einen SoC analysiert. Die dargestellten Werte sind gemittelt über die verschiedenen Belastungsbedingungen.

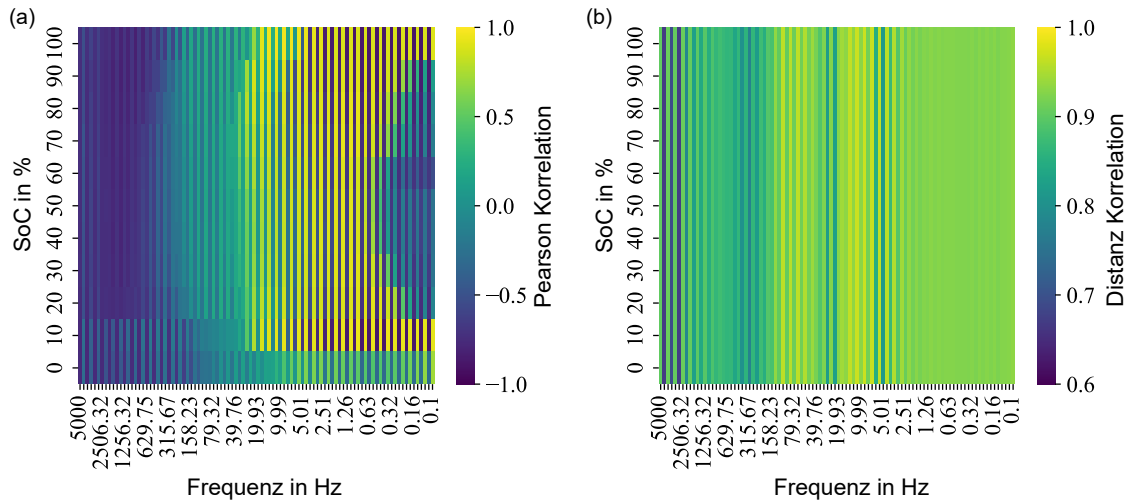


Abbildung 8.5: Heatmap der Korrelation zwischen den Real- und Imaginärteilen der Impedanz und dem SoH für die Pearson Korrelation in (a) und die Distanz Korrelation in (b).

die x-Achse die Real- und Imaginärteile der Impedanz für die getesteten Frequenzen und die y-Achse die verschiedenen Ladezustände. Die Korrelation ist farblich markiert.

Zuerst fällt bei der Pearson Korrelation auf, dass die Real- und Imaginärteile der Impedanz bei hohen Frequenzen stark negativ mit dem SoH korrelieren. Die höchsten Werte in diesem Bereich sind bei einem SoC von 100% erkennbar. Anschließend folgt ein Bereich mit mittelmäßiger Korrelation, während im niederfrequenten Bereich ein alternierendes Muster mit hohen negativen und positiven Korrelationen erkennbar ist. Die höchsten Korrelationen bestehen dabei bei einem SoC von 10%. Dagegen gibt es bei den Ladezuständen zwischen 20% und 90% einen starken Abfall der Korrelation bei Frequenzen unter 1 Hz. Der SoC von 0% zeigt sich als Sonderfall mit einer im Vergleich zu den anderen Ladezuständen erhöhten Anzahl an geringen und mittelmäßigen Korrelationswerten. Der SoC von 10% zeigt die höchsten Korrelationen und wird somit als Zielzustand definiert, um den SoH mit Impedanzdaten zu bestimmen. Ähnlich wie bei der SoH Bestimmung in Kapitel 7 zeigt sich auch bei der Impedanz ein niedriger SoC Bereich als entscheidend. Während bei der GPR Strom, Spannung und Temperatur als Eingangsmerkmale verwendet werden, ist in diesem Fall auch die Korrelation der Impedanz zum SoH bei niedrigen Ladezuständen erhöht. Wird eine Spannungskurve während der Entladung analysiert, fällt die Spannung im mittleren Bereich circa linear ab. Die nicht-linearen Bereiche sind bei einem hohen und bei einem niedrigen SoC vorhanden. Es ist anzunehmen, dass besonders die nicht-linearen Bereiche von der Alterung beeinflusst werden und diese dadurch bessere Schätzergebnisse liefern. Typischerweise werden die EIS-Messungen bei Batteriezellen im vollständig geladenen Zustand durchgeführt. Wichtig dabei ist aber nicht der SoC an sich, sondern, dass die Messung immer beim selben Zustand durchgeführt wird, um den Verlauf der Impedanz über die Zeit zu analysieren. Der optimale Zeitpunkt und Zustand der Zelle für eine

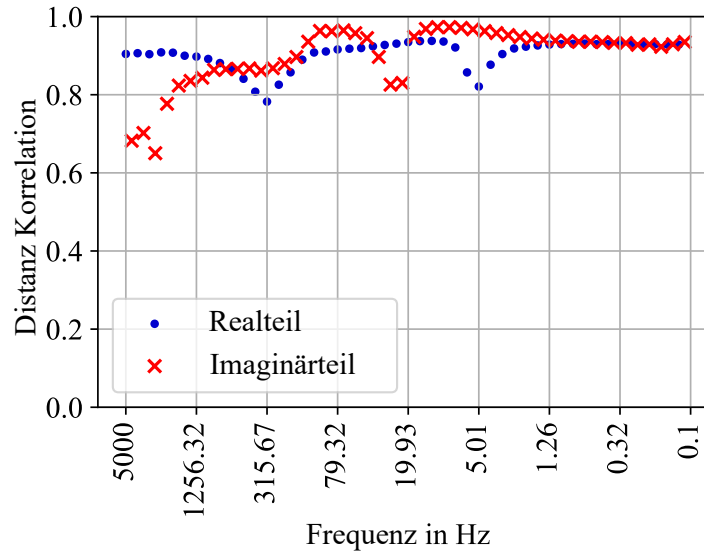


Abbildung 8.6: Distanz Korrelation zwischen den Real- und Imaginärteilen der Impedanz und dem SoH bei einem SoC von 10% für 48 Frequenzen.

Messung wird aber vernachlässigt. In einer Anwendung kann es sinnvoll sein, die Messungen bei einem SoC von 100% durchzuführen, weil dabei am wenigstens Anforderungen an die Vorbereitung gestellt werden und es zusätzlich zu keinen Abweichungen durch eine fehlerhafte SoC Schätzung kommen kann. Da bei einem SoC von 100% ähnlich hohe Korrelationen auftreten, wie bei einem SoC von 10%, ist dies gerechtfertigt. Für die höchsten Korrelationen sollte aber der SoC von 10% verwendet werden.

Bei der Distanz Korrelation bleiben die Werte mit variierendem SoC weitestgehend konstant. Diese wird dafür verwendet, einzelne Frequenzen zu bestimmen, die in einem Schätzmodell verwendet werden. Sie wird also für die Merkmalsextrahierung aus den initialen Daten genutzt. Der Wertebereich geht von 0 bis 1, wobei 1 eine starke Korrelation und 0 eine schwache Korrelation indiziert. Im hochfrequenten Bereich sind dabei die niedrigsten Korrelationen erkennbar. Im mittleren Bereich schwanken die Werte, aber dabei werden auch die höchsten Korrelationen erzielt. Im niederfrequenten Bereich bleiben die Werte konstant hoch, was für die hohe Eignung der Impedanzdaten bei niedrigen Frequenzen spricht. Über die Pearson Korrelation wurde der SoC als geeigneter Zustand identifiziert. Für die Extrahierung einzelner Werte wird deshalb die Distanz Korrelation nochmals detailliert bei diesem SoC analysiert. Die Ergebnisse sind in Abb. 8.6 dargestellt.

Im hochfrequenten Bereich weist zuerst der Realteil eine höhere Korrelation auf. Im mittleren Bereich sind drei Minima erkennbar, eines davon für den Imaginärteil der Impedanz und zwei für den Realteil. Wird der Verlauf von EIS Messungen über den SoH, wie in Kapitel 5 gezeigt, analysiert, zeigt sich eine klare Tendenz des Realteils der Impedanz bei hohen Frequenzen. Mit sinkendem SoH steigt der Realteil der Impedanz. Nach dem Schnittpunkt mit der x-Achse und Beginn des ersten Halbkreises sinkt die Aussagekraft

Hyperparameter	Wert
Kernel	RBF
Grad Kernel Funktion	5
ϵ -Fehlertoleranz	0.01
Strafparameter	2.0

Tabelle 8.2: Hyperparameter der SVR zur Schätzung des SoH mit Impedanzdaten.

des Realteils und die unterschiedliche Alterung wird durch den Imaginärteil deutlicher. In diesem Punkt zeigt sich in der Distanz Korrelation das erste Minimum des Realteils. Gleichzeitig steigt die Korrelation des Imaginärteils. Beim Wendepunkt bis zum Ende des ersten Halbkreises überlagern sich die Impedanzspektren über die Alterung. In diesem Bereich wird das Minimum des Imaginärteils erreicht. Vor dem Minimum haben Zellen mit einem höheren SoH auch einen höheren Imaginärteil, während danach weiter gealterte Zellen einen höheren Imaginärteil aufweisen. Das zweite Minimum des Realteils befindet sich im mittleren Frequenzbereich beim Anfang des zweiten Halbkreises. Insgesamt sind die Werte der Distanz Korrelation über 0,6, was für eine mittlere bis hohe Korrelation spricht. Die höchsten Werte befinden sich im mittleren Frequenz Bereich, jedoch sind dort auch höhere Schwankungen erkennbar. Eine Abweichung könnte hier zu einer Auswahl von Real- oder Imaginärteilen mit geringerer Korrelation führen. Im niederfrequenten Bereich sind die Werte der Distanz Korrelation konstant hoch und bieten somit eine robuste Möglichkeit für die Extrahierung von Merkmalen. Da die Messungen bei niedrigen Frequenzen mehr Zeit benötigen, kann es je nach Anwendungsfall sinnvoll sein, hauptsächlich hohe und mittlere Frequenzen zu verwenden. Somit ist bei der Auswahl nicht allein der Wert der Korrelation entscheidend, sondern zusätzlich der Aufwand, um den Messpunkt aufzuzeichnen. Da in diesem Fall die Anwendung nicht zeitkritisch ist, werden im folgenden die Werte der Korrelation als entscheidendes Kriterium angenommen.

8.2.2 Ergebnisse der Schätzmodelle und Diskussion

In diesem Abschnitt werden die Korrelationsergebnisse mithilfe von SoH Schätzmodellen validiert. Es soll überprüft werden, ob die Daten mit der höchsten Korrelation auch zu den besten Ergebnissen bei der SoH Schätzung führen. Zuerst werden die Merkmale, bestehend aus Real- und Imaginärteilen der Impedanz, nach ihren Korrelationswerten geordnet. Die verschiedenen Schätzmodelle werden danach mit dem Merkmal mit der höchsten Korrelation trainiert und getestet. Anschließend wird das Merkmal mit der zweithöchsten Korrelation hinzugefügt und die Modelle werden neu trainiert und getestet. Dies wird bis zu einer Maximalanzahl von 50 Merkmalen wiederholt. Das Vorgehen von der Analyse der EIS Daten bis zur Modellevaluation der SoH Schätzmodelle ist in Abb. 8.7 visualisiert.

Als erstes Schätzmodell wird eine SVR verwendet. Die Hyperparameter des Modells sind in Tabelle 8.2 zusammengefasst.

In diesem Fall ist das Ziel nicht, das Schätzmodell selbst zu optimieren, sondern es sollen die Korrelationsergebnisse validiert und der Einfluss der Merkmalsextrahierung analysiert werden. Die Ergebnisse der SVR mit einem und bis zu 50 Merkmalen ist in Abb. 8.8

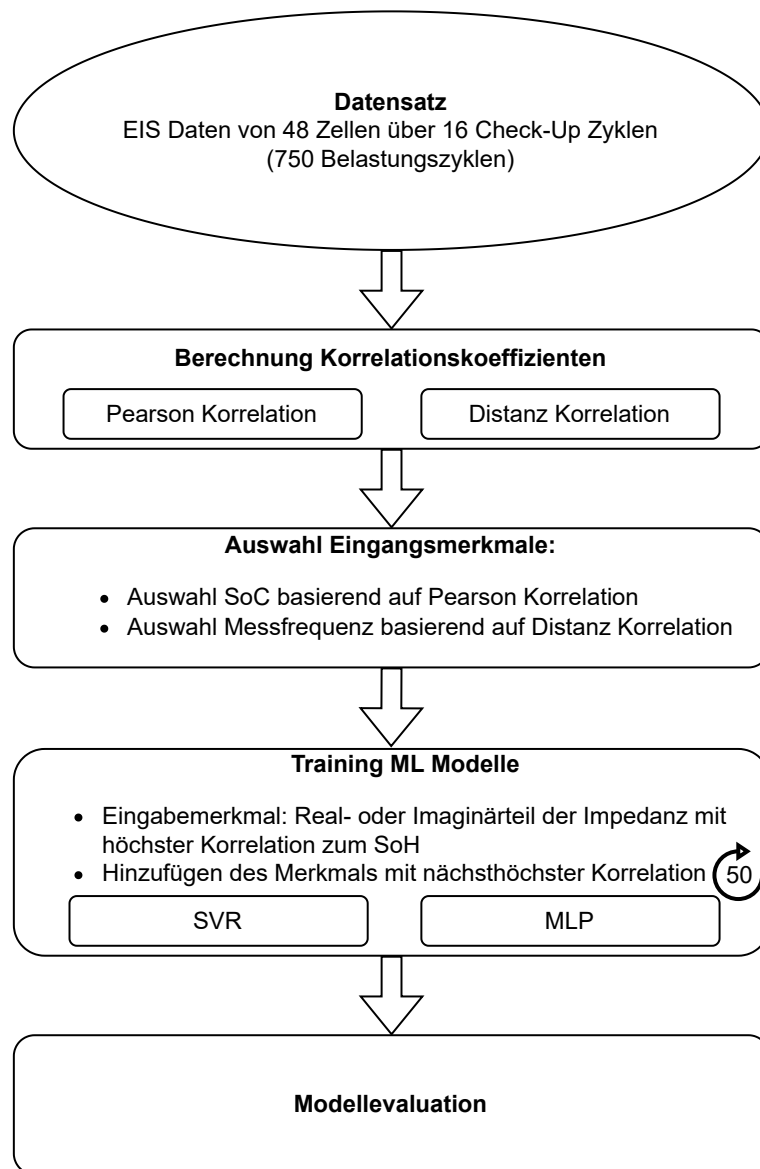


Abbildung 8.7: Vorgehen zur Analyse der Korrelation zwischen Impedanz und SoH sowie Evaluation der Ergebnisse mithilfe von SoH Schätzmodellen.

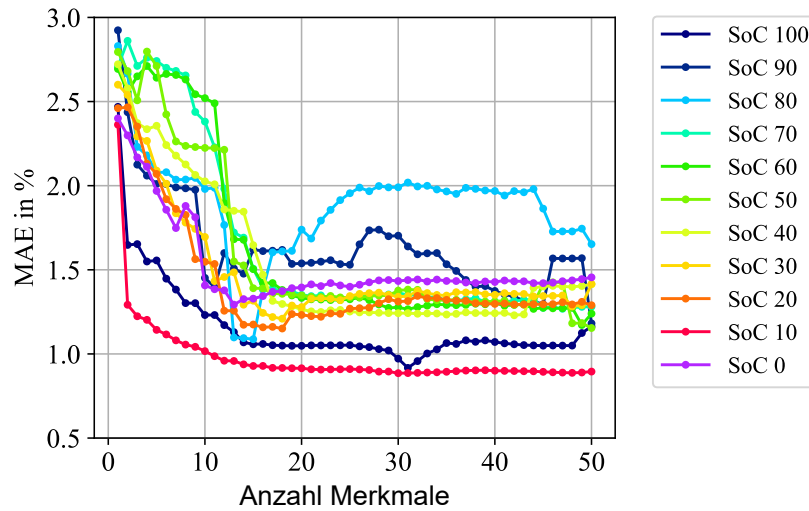


Abbildung 8.8: Testergebnisse der SVR trainiert und getestet mit den Real- und Imaginärteilen der Impedanz mit den höchsten Korrelationswerten zum SoH.

dargestellt. Die gezeigten Werte entsprechen dem Test des Modells und nicht den Trainingsergebnissen.

Ähnlich zu den Ergebnissen der Korrelationsanalyse zeigen sich auch bei der SVR die Ladezustände 10% und 100% am geeignetsten, um den SoH basierend auf der Impedanz zu schätzen. Bereits nach elf Merkmalen erreicht das Modell mit den Impedanzdaten bei einem SoC von 10% einen Fehlerwert unter 1%. Bei einem SoC von 100% wird dies erst bei 30 Merkmalen erreicht. Dennoch zeigen beide Modelle die besten Ergebnisse und weisen zusätzlich geringere Schwankungen auf. Zunächst haben alle Modelle mit einem Merkmal einen MAE zwischen 2,5% und 3%. Anschließend sinken die Fehler bei Erhöhung der Merkmalszahl, bis ein Minimum erreicht wird. Der geringste MAE bei einem SoC von 10% liegt bei einem Wert von 0,86%. Insgesamt sind die Ergebnisse des Modells mit Daten bei einem SoC von 10% für jede Anzahl an Merkmalen am besten. Auch sind im Verlauf keine Schwankungen wie bei den anderen Ladezuständen erkennbar. Dies spricht für eine erhöhte Robustheit des Modells. Zusätzlich fällt auf, dass für alle Ladezustände ein Minimum erreicht wird und die Fehler danach bei höherer Merkmalsanzahl wieder steigen. Dies bestätigt erneut, dass eine geeignete Methode zur Datenvorverarbeitung und zur Merkmalsextrahierung angewendet werden muss.

Neben der SVR wird auch ein MLP zur SoH Schätzung verwendet. Auch hier liegt der Hauptfokus nicht auf der Optimierung des finalen Modells, sondern auf der Analyse des Einflusses der Merkmalsextrahierung. Die Struktur und die Hyperparameter sind in Tabelle 8.3 zusammengefasst. Zusätzlich ist der Aufbau des MLP in Abb. 8.9 visualisiert.

Analog zu der Vorgehensweise bei der SVR wird das MLP mit einer variierenden Anzahl an Merkmalen trainiert und getestet. Die Ergebnisse der SoH Schätzung sind in Abb. 8.10 gezeigt.

Hyperparameter	Wert
Anzahl Zwischenschichten	2
Anzahl Neuronen Zwischenschicht 1	20
Anzahl Neuronen Zwischenschicht 2	20
Aktivierungsfunktion	ReLU
Optimierungsverfahren	Adam
Epochen	100

Tabelle 8.3: Hyperparameter des MLP zur Schätzung des SoH mit Impedanzdaten.

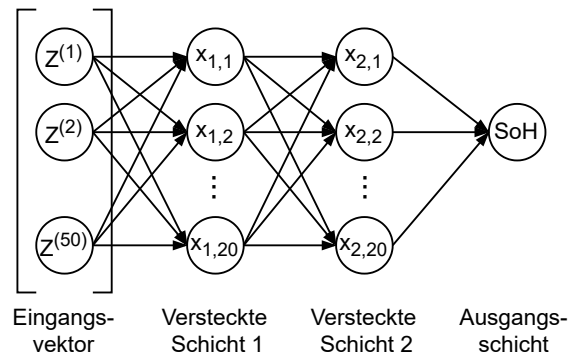


Abbildung 8.9: Struktur des MLP zur Schätzung des SoH basierend auf Impedanzdaten Z . Das Netz besteht aus zwei Zwischenschichten mit jeweils 20 Neuronen. Als Eingangsmerkmale werden variierend 1 bis 50 Merkmale mit der höchsten Korrelation zwischen Impedanz und SoH verwendet. In der Ausgangsschicht wird der SoH geschätzt.

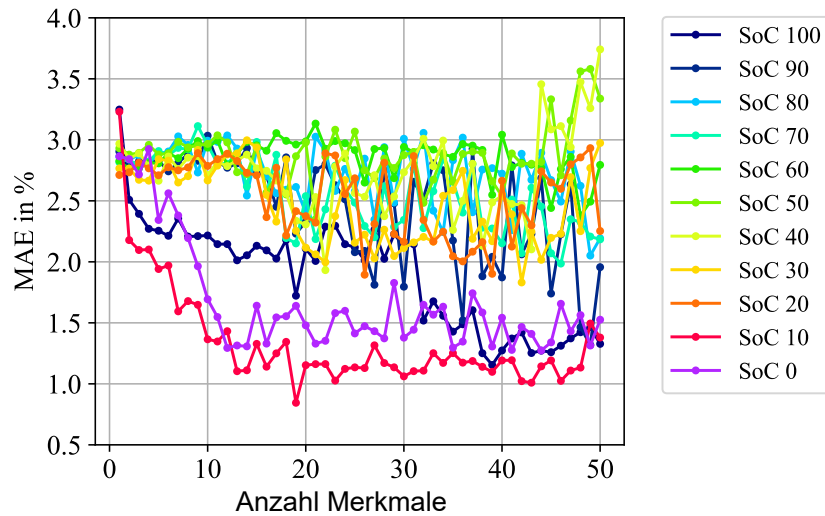


Abbildung 8.10: Testergebnisse des MLP trainiert und getestet mit den Real- und Imaginärteilen der Impedanz mit den höchsten Korrelationswerten zum SoH.

Im Vergleich zur SVR zeigen sich höhere Schwankungen. Die SVR ist somit robuster gegenüber der Änderung der Eingangsdaten als das MLP. Die Schwankungen nehmen bei höherer Merkmalsanzahl weiter zu. Während bei der SVR für alle SoCs der Fehler bei steigender Merkmalsanzahl erst fällt, ist dies beim MLP nicht der Fall. Bei mittleren Ladezuständen nehmen die Schwankungen zu, eine dauerhafte Reduktion des Fehlers ist aber nicht erkennbar. Dies geschieht nur bei drei Ladezuständen, einem SoC von 100%, 10% und 0%. Wie bei der SVR sind die Ergebnisse mit den Impedanzwerten bei einem SoC von 10% am besten. Der MAE ist mit einem Wert von 0,84% bei 19 Merkmalen sogar leicht niedriger als bei der SVR. Das ist jedoch das einzige Modell, dass einen MAE unter 1% aufweist. Dagegen fällt die SVR nach bereits elf Merkmalen unter einen MAE von 1%. Werden die Merkmale mit der höchsten Korrelation analysiert, zeigt sich, dass diese hauptsächlich in einem Bereich bei mittleren Frequenzen liegen. Die Messung dieser Frequenzen ist ausreichend, um ein Schätzmodell zu trainieren. Ein Grund für die höheren Korrelationen könnten die elektrochemischen Prozesse innerhalb der Zelle sein. Dies betrifft bei mittleren Frequenzen den Aufbau der SEI-Schicht und den Ladungstransfer in der Zelle. Da die Bildung der SEI-Schicht entscheidend zur Alterung einer Lithium-Ionen-Zelle beiträgt, ist dies vermutlich einer der Hauptgründe für die hohen Korrelationen.

Insgesamt ergeben sich ähnliche Ergebnisse zwischen dem MLP und der SVR. Obwohl der niedrigste Fehler beim MLP sogar leicht niedriger als bei der SVR ist, ist besonders die geringe Robustheit ein Problem. Aufgrund der vergleichsweise geringen Datenmenge ist in diesem Fall die SVR besser zur SoH Schätzung geeignet als das MLP. Hinzu kommt, dass das MLP mehr Hyperparameter besitzt, die optimiert werden müssen. Die SVR wird deshalb als Schätzmodell gewählt und weiter analysiert. Zuerst werden dafür die Zellen nach ihren Betriebs- und Umgebungsbedingungen aufgeteilt. Anschließend wird das Modell

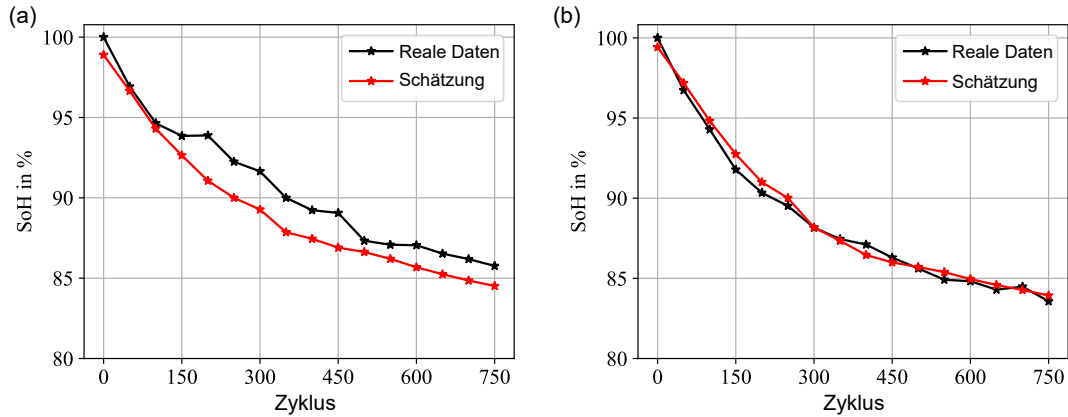


Abbildung 8.11: Testergebnisse der SoH Schätzung für zwei beispielhafte Zellen mit der SVR und 30 Merkmalen basierend auf den höchsten Korrelationen zwischen Impedanz und SoH. Die realen Werte sind in schwarz und die Schätzungen in rot gekennzeichnet. Zusätzlich ist der MAE und der R^2 -Score angegeben.

mit allen Bedingungen bis auf eine trainiert und die Übrige für den Test verwendet. Dies wird für alle Zellen wiederholt und jeweils der MAE und der R^2 -Score ausgewertet. Das Vorgehen ähnelt einer Kreuzvalidierung. Die Testergebnisse für zwei beispielhafte Zellen sind in Abb. 8.11 dargestellt. Für Abb. 8.11(a) beträgt der R^2 -Score 0,84 und der MAE 1,45%. Für Abb. 8.11(b) liegt der R^2 -Score bei 0,99 und der MAE bei 0,39%.

Die Genauigkeit zwischen den Zellen variiert um den Mittelwert des MAE von 0,86% und den R^2 -Score von 0,88. Anhand der Beispiele wird deutlich, dass die Schätzungen bei einzelnen Zellen besser sind als bei anderen. Dies liegt hauptsächlich an der Datenverteilung, bei der einzelne Betriebsbedingungen besser abgebildet sind als andere. Der Bereich des R^2 -Scores liegt hauptsächlich zwischen 0,82 und 0,94, wobei einzelne Zellen auch Werte von 0,99 erreichen. Zusätzlich muss berücksichtigt werden, dass die Werte ohne die detaillierte Optimierung des finalen Modells erzielt werden. Allein die geeignete Auswahl an Methoden der Datenvorverarbeitung und der Merkmalsextrahierung zeigt eine deutliche Verbesserung und geringe Fehler. Werden die Ergebnisse mit Modellen aus der Literatur, wie in Abschnitt 4.4 beschrieben, verglichen, zeigt sich, dass ähnliche und sogar höhere Genauigkeiten erreicht werden. Der Einfluss der Datenvorverarbeitung ist von entscheidender Bedeutung, um die Zustandsbestimmung von Lithium-Ionen-Batterien zu optimieren und die Auswahl der Merkmale ist ein wichtiges Werkzeug, um die Komplexität der Modelle zu reduzieren und gleichzeitig die Genauigkeit zu erhöhen.

Insgesamt zeigt sich, dass beide Modelle, SVR und MLP, für die SoH Schätzung von Lithium-Ionen-Batterien geeignet sind. Besonders die EIS Daten bieten eine gute Grundlage, um die restliche Kapazität der Zellen zu bestimmen. Alle Modelle weisen Fehlerwerte von unter 3,5% auf. Ohne eine Optimierung des finalen Modells und nur mit der vorgestellten Methode zur Extraktion von Merkmalen aus den Rohdaten lassen sich die Fehler

auf Werte unter 1% reduzieren. Die besten Ergebnisse erzielen die Modelle mit den EIS Daten bei einem SoC von 10%. Die zweitbesten werden bei einem SoC von 100% erreicht. In einer realen Anwendung kann es von Vorteil sein, die Daten bei einem SoC von 100% zu verwenden, da vorher nicht extra auf einen anderen SoC ge- oder entladen werden muss und zusätzlich Fehler bei der SoC Schätzung vermieden werden. Dadurch werden nicht mehr die höchsten Genauigkeiten wie bei einem SoC von 10% erreicht. Die Reduktion der Genauigkeit ist aber nur minimal, sodass weiterhin gute Schätzergebnisse erreicht werden. So ergibt sich ein Kompromiss zwischen Aufwand der Messung und der Genauigkeit, der je nach Anwendungsfall abgeschätzt werden muss.

Bei der Auswahl einzelner Frequenzen zur SoH Schätzung fällt auf, dass der Bereich bei mittleren Frequenzen die höchsten Korrelationen aufweist, obwohl dabei auch die lokalen Minima zu finden sind. Diese Frequenzen können genutzt werden, um die Messzeit zu reduzieren. Besonders die niedrigen Frequenzen erfordern einen höheren Zeitaufwand und sind bei der SoH Schätzung nicht notwendig. Dennoch kann es in verschiedenen Anwendungsfällen auch sinnvoll sein, niedrige Frequenzen zu messen. Diese weisen eine konstant hohe Korrelation auf, was die Abhängigkeit von der genauen Auswahl der Frequenzen reduziert. Die Auswahl an Merkmalen hat einen hohen Einfluss auf die Schätzergebnisse. Bei weiterer Optimierung der finalen Modelle wird erwartet, dass der Fehler nochmal deutlich reduziert werden kann. Ziel dieser Arbeit ist es, einen geeigneten Zustand für die EIS Messung zu identifizieren und eine Methode zur Extrahierung von Merkmalen zu entwickeln. Die Fehlerwerte von 0,86% für die SVR und 0,84% für das MLP unterstreichen den hohen Einfluss der Datenvorverarbeitung und das Potential den SoH einer Lithium-Ionen-Batterie über deren Impedanz zu bestimmen. Folglich bleibt festzuhalten, dass die Optimierung von datengetriebenen Schätzverfahren nicht nur das finale Modell selbst betrifft, sondern es muss der ganze Entwicklungszyklus des Verfahrens betrachtet werden, da die Auswahl der Daten einen entscheidenden Einfluss auf die Ergebnisse der Modelle hat.

Zusammenfassend konnten folgende Punkte bei der datengetriebenen Optimierung der Impedanzbestimmung gezeigt werden:

- Die Parametrisierung von elektrischen Ersatzschaltbildmodellen ist basierend auf wenigen Messfrequenzen bei der EIS möglich.
- Die höchste Korrelation zwischen der Impedanz und dem SoH wurde bei einem SoC von 10% identifiziert. Die zweithöchste Korrelation wird bei einem SoC von 100% erreicht. Im mittleren SoC Bereich sind die geringsten Korrelationen.
- Bei geeigneter Datenauswahl kann der Fehler bei der SoH Schätzung mehr als halbiert werden.
- Die datengetriebene SoH Schätzung basierend auf EIS Daten ist hochgenau und erreicht Fehlerwerte von unter 1%.

9 Zusammenfassung und Ausblick

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Arbeit zusammengefasst. Nach der Betrachtung der Bestimmung des SoC, des SoH und der Impedanz, wird anschließend das Potential der entwickelten Modelle dargestellt und die gestellten Forschungsfragen beantwortet. Abschließend wird ein Ausblick in Bezug auf die Fortschritte im Bereich ML gegeben, welche die Entwicklungszeiten reduzieren und die Genauigkeiten weiter erhöhen können.

9.1 Zusammenfassung

Lithium-Ionen-Batterien sind aufgrund ihrer hohen Energie- und Leistungsdichten die Schlüsseltechnologie bei den elektrochemischen Energiespeichern für stationäre und mobile Anwendungen. Ähnlich zu anderen Energiespeichersystemen unterliegen sie Degradationsmechanismen, wodurch die verfügbare Kapazität über den Lebenszyklus sinkt und der Widerstand steigt. Um einen effizienten und sicheren Betrieb des Batteriesystems zu gewährleisten, muss der Zustand der einzelnen Zellen hochgenau bestimmt werden. Während Batterieparameter wie Strom, Spannung oder Temperatur messbar sind, können die Zustände wie SoC oder SoH nicht direkt gemessen werden. Stattdessen werden verschiedene Schätzverfahren angewendet. In dieser Arbeit werden dafür ML Algorithmen verwendet, welche die elektrochemischen Prozesse innerhalb der Zelle nicht direkt nachbilden, sondern formelmäßig einen Zusammenhang zwischen den Batterieparametern und den Zuständen annähern. Die Leistungsfähigkeit dieser Verfahren ist nicht nur von dem finalen Modell abhängig, sondern auch von der Datenauswahl und der Datenvorverarbeitung. Um ein robustes Training der Modelle zu gewährleisten und die Generalisierungsfähigkeit auf unbekannte Daten zu erhöhen, wird der Einfluss von künstlich erstellten Daten analysiert. Dadurch können die zeit- und kostenintensiven Batterietests reduziert werden.

Insgesamt kann die Arbeit in drei Punkte gegliedert werden: in die SoC Schätzung, die SoH Schätzung und die datengetriebene Optimierung der Impedanzbestimmung. Bei der SoC Schätzung liegt der Fokus auf KNNs, welche basierend auf Zeitreihen der Messwerte der Batterieparameter und Referenz SoC Werte trainiert werden. Der niedrigste Fehler konnte dabei mit einem CNN mit einem MAE für die Trainingsdaten von 0,26% und für unbekannte Testdaten von 0,27% erreicht werden. Zusätzlich konnte dabei festgestellt werden, dass die Verwendung von Simulationsdaten und künstlich erstellten Daten zu einer Verbesserung der ML Modelle führt. Durch das Training mit künstlichen Daten konnte die Generalisierungsfähigkeit erhöht werden und somit der Testfehler von 0,51% ohne künstliche Daten auf 0,27% mit künstlichen Daten fast halbiert werden.

Bei Punkt 2, der SoH Schätzung mit datengetriebenen Modellen, wurde eine GPR für drei verschiedene Arten von Lithium-Ionen-Batterien entwickelt. Die geeignete Auswahl von Zeitschritten, in diesem Fall in einem geringen SoC Bereich, führt zu einer Verbesserung des Schätzmodells, wodurch ein weiterer aufwändiger Schritt zur Datenvorver-

beitung nicht notwendig ist. Mit einem ARD Kernel mit verschiedenen Skalen für Kurz- und Langzeiteffekte konnte ein Test MAE auf unbekannte Daten von 1,33% erreicht werden. Zusätzlich beträgt die Abweichung in einem 95% Konfidenzintervall unter 2%, was die Robustheit und Sicherheit der Schätzung zeigt. Darüber hinaus sind höhere Fehler erst ab einem SoH von 80% erkennbar, was weiterhin die Einsatzmöglichkeiten in einer automobilen Anwendung erhöht, da die Batteriezellen meist nur bis zu einem SoH von 80% verwendet werden.

Punkt 3 beinhaltet die datengetriebene Optimierung der Impedanzbestimmung. Dabei konnte ein Modell entwickelt werden, das mit lediglich vier Messfrequenzen bei einer EIS Messung ein Ersatzschaltbildmodell einer Lithium-Ionen-Batterie parametrisieren kann. Dieses wurde rein mit Simulationsdaten trainiert und auf reale Daten getestet. Die Testergebnisse mit hoher Genauigkeit zeigen das Potential, um den Messaufwand bei einer EIS Messung zu reduzieren und einen vollständigen Impedanzverlauf anhand weniger Messpunkte abzuschätzen. Zusätzlich wurden weitreichende EIS Messungen über die Degradation und einem variierenden SoC von Lithium-Ionen-Batterien analysiert. Da die Ergebnisse einer EIS Messung stark von dem Batteriezustand und den Umgebungsbedingungen abhängig sind, war das Ziel, den Zustand für eine EIS Messung mit maximalem Informationsgewinn zu identifizieren. Dabei wurden die Korrelationen zwischen Impedanz und Kapazität über variierende SoCs und Temperaturen berechnet. Die höchsten Korrelationen treten, unabhängig von der Temperatur, bei einem SoC von 10% auf. Aufbauend auf diesen Erkenntnissen wurden die einzelnen Messfrequenzen ausgewertet und die Aussagekraft der einzelnen Messpunkte auf die SoH Schätzung analysiert. Dabei wurden die höchsten Korrelationen, trotz einem lokalen Minimum in diesem Bereich, bei Frequenzen zwischen 100 und 10 Hz berechnet. Werden gezielt die Impedanzwerte bei diesen Frequenzen für eine SoH Schätzung verwendet, kann der Fehler ohne weitere Optimierung mehr als halbiert werden. Das Schätzmodell basierend auf einer SVR erzielt dabei einen MAE von 0,86% bei einer gleichzeitig hohen Robustheit. Das entwickelte MLP weist höhere Schwankungen auf, erreicht aber einen leicht niedrigeren MAE von 0,84%. Besonders für die Entwicklung von Messplänen für die Zustandsüberwachung ist es von höchster Relevanz, die aufwendigen Messungen an einem geeigneten Zeitpunkt durchzuführen. Dieser Zustand konnte je nach Anwendung bei einem SoC von 10% mit den höchsten Korrelationen oder einem SoC von 100% mit den zweithöchsten Korrelationen identifiziert werden.

Zusammenfassend wurden in dieser Arbeit Modelle basierend auf ML Algorithmen entwickelt, um die Zustandsschätzung von Lithium-Ionen-Batterien zu optimieren. Dabei wurden nicht nur finale Schätzmodelle entwickelt, sondern der ganze Prozess von Datenauswahl bis Modellevaluierung berücksichtigt. Somit konnten Methoden zum Ersatz von zeit- und kostenaufwendigen Batterietests entwickelt werden. Darüber hinaus wurden ML Modelle entwickelt, die basierend auf den messbaren Batterieparametern Strom, Spannung, Temperatur und Impedanz die nicht-messbaren Zustände, wie den SoC und den SoH, mit hoher Genauigkeit schätzen können. Mit diesen Algorithmen kann die Überwachung der Batteriezellen durch das BMS weiter optimiert und der Betrieb dementsprechend angepasst werden, wodurch die Effizienz und die Lebensdauer des Batteriesystems erhöht wird.

Somit können die gestellten Forschungsfragen folgendermaßen beantwortet werden:

1. Können Simulationsdaten und künstlich erstellte Daten reale Experimente ersetzen und das Training von ML Modellen verbessern?

Während bei der SoH Bestimmung künstliche Daten zu keiner Verbesserung der Modelle führen, zeigt sich besonders bei der SoC Bestimmung eine deutliche Verbesserung. Damit können reale Experimente reduziert und eine höhere Variation der Trainingsdaten durch künstlich erstellte Daten erreicht werden.

2. Wie kann die Bestimmung des SoC und des SoH durch die Datenvorverarbeitung optimiert und gleichzeitig der Rechenaufwand reduziert werden?

Ein geeignetes Verfahren zur Auswahl von Merkmalen aus den initialen Daten führt nicht nur zu einer Erhöhung der Genauigkeit, sondern auch zu einer Reduktion der Komplexität der finalen Modelle. Während bei der SoC Bestimmung mit der HKA ein Projektionsverfahren die besten Ergebnisse liefert, ist es bei der SoH Bestimmung ein manuelles Verfahren, bei dem definierte Zeitschritte statt einer vollständigen Entladung für die Schätzung verwendet werden.

3. Kann ein einzelnes datengetriebenes Modell zur SoH Bestimmung von Lithium-Ionen-Batterien für mehrere Zellarten verwendet werden und welche Merkmale sind dafür entscheidend?

Es ist möglich, den SoH von mehreren Batteriearten mit einem Modell zu schätzen. Die Genauigkeit für eine jeweilige Batterieart nimmt dabei aber leicht ab. Es wurden nur ähnliche Arten getestet, wodurch der Einfluss von verschiedenen Zellechemien nicht untersucht wurde. Für ähnliche Zellarten konnte aber ein Schätzmodell mit geringen Fehlern unter 1,5% entwickelt werden. Als Merkmale für das Schätzmodell sind besonders die Batterieparameter in einem niedrigen SoC Bereich geeignet.

4. An welchem Zeitpunkt im Lebenszyklus einer Batteriezelle sollte eine EIS Messung mit maximalem Informationsgewinn durchgeführt werden?

Basierend auf der Korrelation zwischen Impedanz und Kapazität zeigt sich, unabhängig von der Temperatur, der SoC von 10% als Zustand mit dem maximalen Informationsgewinn für eine EIS Messung. Als Kompromiss zwischen Messaufwand und Informationsgewinn kann auch ein SoC von 100% mit den zweithöchsten Korrelationen zwischen Impedanz und Kapazität gewählt werden.

5. Kann die Kapazität einer Batteriezelle mithilfe von Impedanzdaten geschätzt werden und welche Merkmale aus einem Impedanzspektrum sind dafür relevant?

Die Schätzung der Kapazität kann durch Impedanzdaten weiter optimiert werden. Mit lediglich den Daten von elf verschiedenen Frequenzen aus dem mittleren und dem niedrigen Frequenzbereich lässt sich der SoH mit Fehlerwerten von unter 1% schätzen.

9.2 Ausblick

ML Modelle sind stark von dem verwendeten Datensatz abhängig. Die Prozessschritte von Datenauswahl über Datenvorverarbeitung nehmen einen Großteil des gesamten Arbeitsaufwand ein. Besonders für die Zustandsbestimmung von Lithium-Ionen-Batterien ist noch unklar, welche Merkmale zu den höchsten Genauigkeiten führen. Obwohl die Erstellung von Merkmalen durch Hintergrundwissen über Batterieparameter und Degradationsmechanismen zu guten Ergebnissen führt, ist unklar, ob mit anderen Merkmalen höhere Genauigkeiten erreicht werden. Eine Alternative zur manuellen Datenvorverarbeitung ist das Automatische Maschinelle Lernen (AutoML). Durch die Fortschritte im Bereich KI werden dabei die Prozessschritte Datenvorverarbeitung, Modellauswahl und Parameter Optimierung automatisiert. Basis dafür ist allein die Datenstruktur und kein Hintergrundwissen des Entwicklers. Erste Tests mit einem AutoML Modell zeigen, dass damit bereits mittelmäßige Ergebnisse für die SoH Schätzung mit Fehlerwerten unter 2% erreicht werden können. Obwohl die Modelle basierend auf ihrer Genauigkeit noch nicht mit manuell optimierten Verfahren konkurrieren können, zeigt dies bereits das Potential von AutoML. Bei weiteren Fortschritten in der Zukunft könnte dies eine Alternative zur zeitaufwändigen Datenvorverarbeitung darstellen. Nach aktuellem Entwicklungsstand verstärken diese Methoden aber das Blackbox Prinzip und es können nur wenig Rückschlüsse aus der Ergebnisfindung gezogen werden. Erst wenn diese Hindernisse überwunden werden, kann die Verwendung von AutoML zu einer Optimierung der Zustandsbestimmung von Lithium-Ionen-Batterien führen und zusätzlich dafür genutzt werden, um neue Zusammenhänge zwischen Batterieparametern und Batteriezuständen aufzudecken.

Die in dieser Arbeit entwickelten Modelle sowie die Modelle aus der Literatur wurden mit Daten aus dem Forschungsumfeld trainiert und getestet. Während dabei hohe Genauigkeiten erreicht werden, was die grundsätzliche Anwendbarkeit und den hohen Nutzen für Batteriesysteme beweist, muss das Verhalten in einer realen Anwendung erst getestet werden. Neben den schier unendlich möglichen Kombinationen aus Umgebungs- und Belastungsbedingungen kommen zusätzlich auch die mechanischen Belastungen bei mobilen Anwendungen hinzu, die im Forschungsumfeld nur schwer simuliert werden können. Zusätzlich wurde nur eine begrenzte Anzahl an Batteriezellen getestet, was die Übertragbarkeit auf andere Zelltypen erschwert. Selbst der Datensatz mit 48 Zellen ist im Vergleich zu anderen Branchen, in denen ML Algorithmen erfolgreich eingesetzt werden, gering. Um das volle Potential der datengetriebenen Modelle zu nutzen, müssen größere Datensätze verwendet werden. Dies ist aber auch gleichzeitig der große Vorteil der ML Algorithmen. Bei der Verwendung von neuen Daten muss das Modell nicht neu entwickelt, sondern nur nachtrainiert werden. Die Schätzverfahren profitieren so von jedem neuen Datensatz, der verfügbar wird.

Insgesamt ist die Zustandsbestimmung von Lithium-Ionen-Batterien ein komplexes Themengebiet, das noch einige Möglichkeiten zur Optimierung bietet. Dabei zeigen besonders ML Algorithmen großes Potential, um Entwicklungszeiten zu verkürzen und Genauigkeiten der Schätzmodelle zu erhöhen. Aufgrund der Leistungsfähigkeit der entwickelten Modelle und der guten Ergebnisse im Forschungsumfeld dient diese Arbeit als Grundlage für weitere Optimierungen und schafft die Voraussetzungen für den Einsatz in einer realen Anwendung.

Abkürzungsverzeichnis

ARD	Automatic Relevance Determination
AutoML	Automatische Maschinelle Lernen
BEV	Batterieelektrisches Fahrzeug
BMS	Batterie Management System
CNN	Convolutional Neural Network
EIS	Elektrochemische Impedanz Spektroskopie
EKF	Extended Kalman Filter
GAN	Generative Adversarial Network
GPR	Gauß Prozess Regression
GRU	Gated Recurrent Unit
HKA	Hauptkomponentenanalyse
KDD	Knowledge Discovery in Databases
KF	Kalman Filter
KI	Künstliche Intelligenz
KNN	Künstliches Neuronales Netz
SVM	Stützvektormaschine
LFP	Lithium-Eisenphosphat
LSTM	Long Short-Term Memory
MAE	Mean Absolute Error
ML	Maschinelles Lernen
MLP	Multi Layer Perceptron
NMC	Nickel-Mangan-Cobaltoxid
OEM	Original Equipment Manufacturer
PE	Polyethylen

PP	Polypropylen
RBF	Radial Basis Function
ReLU	Rectified Linear Unit
RMSE	Root Mean Square Error
RNN	Rekurrentes Neuronales Netz
SEI	Solid Electrolyte Interphase
SoC	State-of-Charge
SoH	State-of-Health
SVM	Stützvektormaschine oder Support Vector Machine
SVR	Stützvektorregression
SWZ	Singulärwertzerlegung
UKF	Unscented Kalman Filter

Verzeichnis der Formelzeichen

Lateinische Buchstaben

Symbol	Einheit	Bezeichnung
b	-	Biaswert
C	F	Kapazität
$c[t]$	-	Zellzustand des LSTM
f	Hz	Frequenz
$h[t]$	-	verdeckter Zustand des LSTM
I	A	Strom
I_A	A	Stromamplitude
L	H	Induktivität
l	-	Längenskala
$Q_{initial}$	Ah	Nennkapazität einer neuen Lithium-Ionen-Batterie
Q_{now}	Ah	aktuell verfügbare Kapazität einer Lithium-Ionen-Batterie
Q_{rest}	Ah	restliche Kapazität einer Lithium-Ionen-Batterie
R	Ω	Widerstand
s_{noise}^2	-	Term für das Datenrauschen
t	s	Zeit
U	V	Spannung
U_A	V	Spannungsamplitude
U_O	V	Ruhespannung
W	$\Omega/s^{\frac{1}{2}}$	Warburg Impedanz
w	-	Gewichtungswert
Z	Ω	Impedanz
$z[t]$	-	Zellzustand des GRU

Griechische Buchstaben

Symbol	Einheit	Bezeichnung
α	-	Lernrate
α_i, α_j	-	Lagrange-Multiplikatoren
β	-	Parameter für die Stärke der Regularisierung
δ	-	Delta-Wert
ϵ	-	Parameter für den Toleranzbereich
λ	-	Regularisierungsparameter
φ	Hz	Phasenverschiebung
σ^2	-	Standardabweichung
σ_f	-	Forget-Gate
σ_i	-	Input-Gate
σ_o	-	Output-Gate
σ_r	-	Reset-Gate
θ	-	Aktivierungsfunktion
ϕ	-	Basisfunktion
ω	Hz	Kreisfrequenz
ζ_i	-	Parameter für die erlaubte Abweichung

Abbildungsverzeichnis

1.1	Spezifische gravimetrische Leistungs- und Energiedichte von Speichertechnologien	2
1.2	Aufbau und Struktur der Dissertation	4
1.3	Veröffentlichungen im Zusammenhang dieser Dissertation	5
2.1	Wirkprinzip einer Lithium-Ionen-Zelle	8
2.2	Impedanz als Verhältnis zwischen komplexer Spannung und komplexem Strom	10
2.3	Impedanzspektrum einer Lithium-Ionen-Batterie	12
2.4	Ersatzschaltbildmodell einer Lithium-Ionen-Batterie	12
3.1	KDD-Prozess zur Verarbeitung von Daten und Extrahierung von Wissen . .	16
3.2	Unter- und Überanpassung eines Modells	17
3.3	Fluch der Dimensionalität	18
3.4	Darstellung des Gradientenverfahrens	21
3.5	Visualisierung des Kernel-Tricks	25
3.6	Wirkprinzip eines vorwärts gerichteten neuronalen Netzes	29
3.7	Wirkprinzip eines CNN	31
3.8	Wirkprinzip des LSTM	34
3.9	Wirkprinzip des GRU	35
4.1	Datengetriebene Modelle zur Bestimmung des SoC nach [77]	39
4.2	Vorgehensweise zur Bestimmung des SoH mit datengetriebenen Modellen nach [84]	43
4.3	Batteriezustände, an denen die EIS Messungen in [95] durchgeführt wurden	47
4.4	Pearson und Distanz Korrelation zwischen Kapazität und Impedanz bei den Messreihen aus [95]	47
5.1	Temperaturverlauf einer Batteriezelle während der Entladung	53
5.2	Belastung der Batteriezellen während den Lebensdauertests	54
5.3	Testbedingungen der durchgeführten Batterieexperimente	54
5.4	Strom und Spannungsverlauf während eines Kapazitätstests	56
5.5	Entwicklung der Impedanzspektren über die Batteriealterung	56
6.1	Ersatzschaltbildmodell einer Batterie	58
6.2	Transformation der Spannungswerte	59
6.3	Ergebnisse des linearen Regressionsmodells der SoC Schätzung	60
6.4	Ergebnisse des linearen Regressionsmodells mit zwei Spannungsintervallen .	62
6.5	Einfluss der Data Augmentation Methoden auf die SoC Schätzung von MLP und CNN	64
6.6	Ergebnisse der SoC Schätzung mit dem CNN	65

7.1	Initiale Merkmalsmatrix für die SoH Schätzung mit einer GPR	68
7.2	Ergebnisse der HKA	69
7.3	Vergleich der Schätzergebnisse für den SoH für die Dimensionsreduktion durch die Verringerung der Zeitschritte	71
7.4	Vergleich der Ergebnisse der GPR mit verschiedenen Verfahren zur Daten- vorverarbeitung	73
7.5	Posterior Verteilung der GPR	75
7.6	Ergebnisse der finalen GPR	75
8.1	Nyquist Plot der simulierten EIS Verläufe	80
8.2	Nyquist Plot der realen EIS Messungen und der Schätzungen durch das Kombinationsmodell	82
8.3	Vergleich der realen EIS Messungen und der Schätzung bei SoC 30% und 70%	83
8.4	Histogramm der Pearson Korrelation mit Werten über $ 0,7 $ zwischen den Real- und Imaginärteilen der Impedanz und dem SoH	85
8.5	Heatmap der Korrelation zwischen den Real- und Imaginärteilen der Impe- danz und dem SoH	86
8.6	Distanz Korrelation zwischen den Real- und Imaginärteilen der Impedanz und dem SoH bei einem SoC von 10%	87
8.7	Vorgehen zur Analyse der Korrelation zwischen Impedanz und SoH	89
8.8	Testergebnisse der SVR	90
8.9	Struktur des MLP zur Schätzung des SoH basierend auf Impedanzdaten	91
8.10	Testergebnisse des MLP	92
8.11	Testergebnisse der SoH Schätzung für zwei Zellen mit der SVR	93

Tabellenverzeichnis

2.1	Aktuell verwendete Zellformen der OEMs und Prognose für 2030	9
4.1	Ergebnisse der SoC Schätzung in [80]	40
4.2	Ergebnisse der SoC Schätzung mit einem GRU in [82]	41
4.3	Ergebnisse der SoC Schätzung mit einem CNN in [83]	41
6.1	Ergebnisse des linearen Regressionsmodells der SoC Schätzung	61
6.2	Ergebnisse der SoC Schätzung mit den nicht-linearen Modellen SVM, MLP, CNN und GRU	63
6.3	Ergebnisse der SoC Schätzung mit dem CNN basierend auf künstlich erstell- ten Daten	64
7.1	Ergebnisse der SoH Schätzung mit der HKA	70
7.2	Ergebnisse der SoH Schätzung mit der Oversampling Strategie	72
7.3	Ergebnisse der SoH Schätzung mit der reduzierten Anzahl an Zeitschritten .	73
8.1	Hyperparameter des MLP zur Schätzung der Parameter eines Ersatzschalt- bildmodells	81
8.2	Hyperparameter der SVR zur Schätzung des SoH mit Impedanzdaten	88
8.3	Hyperparameter der MLP zur Schätzung des SoH mit Impedanzdaten . . .	91

Algorithmen

5.1	Belastungsprotokoll bei den Alterungstests der Lithium-Ionen-Batterien (vier 18650 Zellen) in [99]	51
5.2	Belastungsprotokoll bei den Alterungstests der Lithium-Ionen-Batterien (fünf Batteriezellen des Typs Sony US18650 VTC5 und fünf Zellen des Typs Samsung INR18650 25R) in [100]	52
5.3	Belastungsprotokoll bei den Alterungstests der Molicel-Zellen INR21700-P42A.	55

Publikationsliste

Journal Erstautor

- [1] S. Pohlmann, A. Mashayekh, J. Buberger, J. Estaller, A. Wiedenmann, M. Kuder, A. Neve, T. Weyh, Correlation analysis and feature extraction using impedance spectroscopy over aging of lithium ion batteries, *Journal of Energy Storage* 105 (2025) 114715. doi:10.1016/j.est.2024.114715.
- [2] S. Pohlmann, A. Mashayekh, F. Stroebel, D. Karnehm, M. Kuder, A. Neve, T. Weyh, State-of-health prediction of lithium-ion batteries based on a low dimensional gaussian process regression, *Journal of Energy Storage* 88 (2024) 111649. doi:10.1016/j.est.2024.111649.
- [3] S. Pohlmann, A. Mashayekh, M. Kuder, A. Neve, T. Weyh, Data augmentation and feature selection for the prediction of the state of charge of lithium-ion batteries using artificial neural networks, *Energies* 16 (18)(2023). doi:10.3390/en16186750.

Journal Co-Autor

- [1] K. Cicvaric, S. Pohlmann, B. Zhang, F. Rahmanian, L. Merker, M. Gaberscek, H. S. Stein, Fast formation of anode-free li-metal batteries by pulsed current, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 26 (20) (2024) 14713–14720. doi:10.1039/D4CP00775A.
- [2] D. Karnehm, A. Samanta, L. Anekal, S. Pohlmann, A. Neve, and S. Williamson, “Comprehensive Comparative Analysis of Deep-Learning-Based State-of-Charge Estimation Algorithms for Cloud-Based Lithium-Ion Battery Management Systems,” *IEEE Journal of Emerging and Selected Topics in Industrial Electronics*, vol. 5, no. 2, pp. 597–604, 2024. doi: 10.1109/JESTIE.2024.3373267.
- [3] D. Karnehm, W. Bliemetsrieder, S. Pohlmann, and A. Neve, “Controlling Algorithm of Reconfigurable Battery for State of Charge Balancing Using Amortized Q-Learning,” *Batteries*, vol. 10, no. 4, 2024. doi: 10.3390/batteries10040131.
- [4] A. Mashayekh, S. Pohlmann, J. Estaller, M. Kuder, A. Lesnicar, R. Eckerle, T. Weyh, Multi-agent reinforcement learning-based decentralized controller for battery modular multilevel inverter systems, *Electricity* (3) (2023) 235–252. doi:10.3390/electricity4030014.
- [5] S. Stock, S. Pohlmann, F. J. Günter, L. Hille, J. Hagemeister, G. Reinhart, Early quality classification and prediction of battery cycle life in production using machine learning, *Journal of Energy Storage* 50 (2022) 104144. doi:10.1016/j.est.2022.104144.

Konferenz Erstautor

- [1] S. Pohlmann, A. Wiedenmann, D. Karnehm, M. Kuder, A. Neve, and T. Weyh, “Automated machine learning for estimating the state of health of lithium ion batteries,” in 2025 IEEE/AIAA Transportation Electrification Conference and Electric Aircraft Technologies Symposium (ITEC+EATS), 2025, pp. 1–5.
- [2] S. Pohlmann, A. Mashayekh, D. Karnehm, M. Kuder, A. Neve, T. Weyh, Lithium ion batteries impedance approximation and model parameterization using artificial neural networks, in: 2024 IEEE International Conference on Industrial Technology (ICIT), 2024, pp. 1–6.doi:10.1109/ICIT58233.2024.10540962
- [3] S. Pohlmann, A. Mashayekh, D. Karnehm, M. Kuder, A. Gieraths, T. Weyh, State of charge prediction of lithium-ion batteries based on artificial neural networks and reduced data, in: 2022 24th European Conference on Power Electronics and Applications (EPE’22 ECCE Europe), 2022, pp. 1–10.
- [4] S. Pohlmann, D. Karnehm, A. Mashayekh, M. Kuder, A. Gieraths, T. Weyh, State-of-charge estimation of lithium-ion batteries using machine learning based on augmented data, in: 2022 International Conference on Smart Energy Systems and Technologies (SEST), 2022, pp. 1–6.doi:10.1109/SEST53650.2022.9898474.
- [5] S. Pohlmann, A. Mashayekh, F. Schwitzgebel, M. Kuder, A. Gieraths, T. Weyh, Introduction of a battery performance characteristic map based on the internal impedance on cell and system level, in: 2022 IEEE 16th International Conference on Compatibility, Power Electronics, and Power Engineering (CPE-POWERENG), 2022, pp. 1–6.doi:10.1109/CPE-POWERENG54966.2022.9880888.

Konferenz Co-Autor

- [1] J. Estaller, N. Sorokina, W. Grupp, J. Buberger, T. Hoegerl, A. Wiedenmann, S. Pohlmann, M. Kuder, and T. Weyh, “Cost and Efficiency Optimization for a Reconfigurable E-Bike Battery System for EPE’25,” in The 26th European Conference on Power Electronics and Applications. Paris, France: GDR SEEDS France EPE Association, Mar. 2025. [Online]. Available: <https://utc.hal.science/hal-05105927>
- [2] T. M. Hoegerl, J. Estaller, J. Buberger, W. Grupp, A. Wiedenmann, N. Sorokina, W. Bliemetsrieder, S. Pohlmann, C. Rothmund, M. Kuder, and T. Weyh, “Comparative Loss Analysis of an Axial-Flux PMSM Fed by a Modular Multilevel Inverter (BM3) Versus a Two-level Inverter (SVPWM),” in The 26th European Conference on Power Electronics and Applications. Paris, France: GDR SEEDS France EPE Association, Mar. 2025. [Online]. Available: <https://utc.hal.science/hal-05105873>
- [3] D. Karnehm, A. Samanta, L. Anekal, S. Pohlmann, A. Neve, and S. Williamson, “Five-layer IoT and Fog Computing Framework Towards Digital Twinning of Battery Management Systems for e-Transportation,” in 4th International Conference on Smart Grid and Renewable Energy (SGRE24), IEEE, Jan. 2024.

-
- [4] A. Mashayekh, S. Pohlmann, M. Hohenegger, M. Khorasani, M. Kuder, T. Weyh, "State-of-charge estimation of battery modular multilevel inverter systems based on extended and dual extended kalman filter, in: 2023 International Conference on Smart Energy Systems and Technologies (SEST), 2023, pp. 1–6. doi:10.1109/SEST57387.2023.10257345.
- [5] D. Karnehm, S. Pohlmann, and A. Neve, "State-of-Charge (SoC) Balancing of Battery Modular Multilevel Management (BM3) Converter using Q-Learning," in 2023 IEEE Green Technologies Conference (GreenTech), Denver, CO, USA: IEEE, 2023, pp. 107–111. doi: 10.1109/GreenTech56823.2023.10173832.
- [6] D. Karnehm, S. Pohlmann, A. Wiedenmann, M. Kuder, and A. Neve, "Introduction of a Cloud Computing Architecture for the Condition Monitoring of a Reconfigurable Battery System for Electric Vehicles," in 2023 6th Conference on Cloud and Internet of Things (CIoT), Lisbon, Portugal: IEEE, 2023, pp. 29–33. doi: 10.1109/CIoT57267.2023.10084883.
- [7] D. Karnehm, N. Sorokina, S. Pohlmann, M. Ackermann, M. Kuder, and A. Gieraths (Neve), "High Performance Simulation Framework of Three-Phase Battery Modular Multilevel Management Converter System," in IECON 2022 – 48th Annual Conference of the IEEE Industrial Electronics Society, 2022, pp. 1–5. doi: 10.1109/IECON49645.2022.9968544.
- [8] D. Karnehm, N. Sorokina, S. Pohlmann, A. Mashayekh, M. Kuder, and A. Gieraths (Neve), "A High Performance Simulation Framework for Battery Modular Multilevel Management Converter," in 2022 International Conference on Smart Energy Systems and Technologies (SEST), IEEE, 2022, pp. 1–6. doi: 10.1109/SEST53650.2022.9898406.

Literaturverzeichnis

- [1] UNRIC - Regionales Informationszentrum der Vereinten Nationen, Agenda 2030 - ziele für nachhaltige entwicklung.
URL <https://unric.org/de/17ziele/>
- [2] Die Bundesregierung, Ziele für nachhaltige entwicklung bezahlbare und saubere energie.
URL <https://www.bundesregierung.de/breg-de/schwerpunkte-der-\bundesregierung/bezahlbare-und-saubere-energie-1581908>
- [3] Die Bundesregierung, Ziele für nachhaltige entwicklung weltweit klimaschutz umsetzen.
URL <https://www.bundesregierung.de/breg-de/schwerpunkte-der-\bundesregierung/weltweit-klimaschutz-umsetzen-181812>
- [4] W. Bernhart, Challenges and opportunities in lithium-ion battery supply, in: Future Lithium-ion Batteries, The Royal Society of Chemistry, 2019, pp. 316–334. doi: 10.1039/9781788016124-00316.
- [5] A. Kwade, W. Haselrieder, R. Leithoff, A. Modlinger, F. Dietrich, K. Droeder, Current status and challenges for automotive battery production technologies, Nature Energy 3 (4) (2018) 290–300. doi:10.1038/s41560-018-0130-3.
- [6] A. Kampker, H. H. Heimes (Eds.), Elektromobilität: Grundlagen einer Fortschritts-technologie, 3rd Edition, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2024. doi: 10.1007/978-3-662-65812-3.
- [7] K. Kuhlmann, S. Wolf, C. Pieper, G. Xu, J. Ahmad, The future of battery production for electric vehicles, Bost. Consult. Gr (2018) 1–22.
- [8] Akash Basia, Zineb Simeu-Abazi, Eric Gascard, Peggy Zwolinski, Review on state of health estimation methodologies for lithium-ion batteries in the context of circular economy, CIRP Journal of Manufacturing Science and Technology 32 (2021) 517–528. doi:10.1016/j.cirpj.2021.02.004.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1755581721000249>
- [9] Rui Xiong, Linlin Li, Jinpeng Tian, Towards a smarter battery management system: A critical review on battery state of health monitoring methods, Journal of Power Sources 405 (2018) 18–29. doi:10.1016/j.jpowsour.2018.10.019.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037877531831111X>

- [10] W. Li, Battery digital twin with physics-based modeling, battery data and machine learning, Dissertation, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, Aachen, veröffentlicht auf dem Publikationsserver der RWTH Aachen University 2022; Dissertation, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, 2021 (2021). doi:10.18154/RWTH-2022-02292.
URL <https://publications.rwth-aachen.de/record/842209>
- [11] J. Zhu, Y. Wang, Y. Huang, R. Bhushan Gopaluni, Y. Cao, M. Heere, M. J. Mühlbauer, L. Mereacre, H. Dai, X. Liu, A. Senyshyn, X. Wei, M. Knapp, H. Ehrenberg, Data-driven capacity estimation of commercial lithium-ion batteries from voltage relaxation, Nature Communications 13 (1) (2022) 2261. doi:10.1038/s41467-022-29837-w.
- [12] K. Beard, Linden's Handbook of Batteries, Fifth Edition, McGraw Hill LLC, 2019.
URL <https://books.google.de/books?id=7oCSDwAAQBAJ>
- [13] Din 40729-1 (1985) galvanische sekundärelemente: Grundbegriffe.
- [14] C. Hamann, W. Vielstich, Elektrochemie, Wiley-VCH, 2005.
URL <https://books.google.de/books?id=TLXeAAAACAAJ>
- [15] S. Link, C. Neef, T. Wicke, T. Hettesheimer, M. Diehl, O. Krätzig, F. Degen, F. Klein, P. Fanz, M. Burghard, R. Kleinert, Development perspectives for lithium-ion battery cell formats, Fraunhofer Institute for Systems and Innovation Research ISI (2022).
- [16] R. Korthauer, Lithium-Ion Batteries: Basics and Applications, Springer Berlin Heidelberg, 2018.
URL <https://books.google.de/books?id=111oDwAAQBAJ>
- [17] M. Bauer, Elektrische und mechanische verfahren zur detektion von alterungseffekten in lithium-ionen-batterien, Ph.D. thesis, Technische Universität München (2017).
- [18] R. Hausbrand, G. Cherkashinin, H. Ehrenberg, M. Gröting, K. Albe, C. Hess, W. Jaegermann, Fundamental degradation mechanisms of layered oxide li-ion battery cathode materials: Methodology, insights and novel approaches, Materials Science and Engineering: B 192 (2015) 3–25, electrical Fatigue. doi:<https://doi.org/10.1016/j.mseb.2014.11.014>.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921510714002657>
- [19] J. Schmitt, State of health estimation for lithium-ion batteries, Ph.D. thesis, Technische Universität München (2023).
- [20] F. Kindermann, Implications of current density distribution in lithium-ion battery graphite anodes on sei formation, Ph.D. thesis, Technische Universität München (2017).
URL <https://mediatum.ub.tum.de/1380608>

-
- [21] T. Hettesheimer, C. Neef, I. Rosellón Inclán, S. Link, T. Schmaltz, F. Schuckert, A. Stephan, M. Stephan, A. Thielmann, L. Weymann, et al., Lithium-Ion Battery Roadmap - Industrialization Perspectives toward 2030, 2023. doi:10.24406/publica-2153.
URL <https://publica.fraunhofer.de/handle/publica/456809>
- [22] Nina Meddings, Marco Heinrich, Frédéric Overney, Jong-Sook Lee, Vanesa Ruiz, Emilio Napolitano, Steffen Seitz, Gareth Hinds, Rinaldo Raccichini, Miran Gaberšček, Juyeon Park, Application of electrochemical impedance spectroscopy to commercial li-ion cells: A review, *Journal of Power Sources* 480 (2020) 228742. doi:10.1016/j.jpowsour.2020.228742.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378775320310466>
- [23] D. Pritzl, Electrochemical impedance spectroscopy (eis) and surface analysis of high-energy cathodes for lithium-ion batteries, Ph.D. thesis, Technische Universität München (2019).
URL <https://mediatum.ub.tum.de/1463216>
- [24] S. Käbitz, Untersuchung der Alterung von Lithium-Ionen-Batterien mittels Elektroanalytik und elektrochemischer Impedanzspektroskopie, Dissertation, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, Aachen, veröffentlicht auf dem Publikationsserver der RWTH Aachen University; Dissertation, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, 2016 (2016). doi:10.18154/RWTH-2016-12094.
URL <https://publications.rwth-aachen.de/record/680923>
- [25] A. J. Peter Keil, Aufbau und parametrierung von batteriemodellen, in: 19. DESIGNELEKTRONIK-Entwicklerforum Batterien Ladekonzepte, 2012.
- [26] T. F. Landinger, Electrochemical impedance spectroscopy and power line communications for automotive battery management systems, Ph.D. thesis, Technische Universität München (2022).
URL <https://mediatum.ub.tum.de/1631521>
- [27] A. Vezzini, Elektrofahrzeuge. mobilität und erneuerbare energie, *Physik in unserer Zeit* 41 (1) (2010) 36–42. doi:10.1002/piuz.201001221.
- [28] J. T. Warner, *The Handbook of Lithium-Ion Battery Pack Design: Chemistry, Components, Types, and Terminology*, Elsevier Science, 2024.
URL https://books.google.de/books?id=xc_hEAAAQBAJ
- [29] Zhe Li, Jun Huang, Bor Yann Liaw, Viktor Metzler, Jianbo Zhang, A review of lithium deposition in lithium-ion and lithium metal secondary batteries, *Journal of Power Sources* 254 (2014) 168–182. doi:10.1016/j.jpowsour.2013.12.099.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378775313020880>

- [30] Mathias Petzl, Michael Kasper, Michael A. Danzer, Lithium plating in a commercial lithium-ion battery – a low-temperature aging study, *Journal of Power Sources* 275 (2015) 799–807. doi:10.1016/j.jpowsour.2014.11.065.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378775314018928>
- [31] T. Bach, Electromechanical interactions in lithium-ion batteries: Aging effects and analytical use, Ph.D. thesis (09 2017).
- [32] R. Korthauer, *Handbuch Lithium-Ionen-Batterien*, Springer Berlin Heidelberg, 2013.
URL <https://books.google.de/books?id=LPQfBAAAQBAJ>
- [33] T. Gewald, M. Lienkamp, A systematic method for accelerated aging characterization of lithium-ion cells in automotive applications, *Forschung im Ingenieurwesen/Engineering Research* 83 (4) (2019) 831–841, publisher Copyright: © 2019, Springer-Verlag GmbH Deutschland, ein Teil von Springer Nature. doi:10.1007/s10010-019-00318-9.
- [34] E. Alpaydin, *Maschinelles Lernen*, De Gruyter Studium, De Gruyter, 2019.
URL <https://books.google.de/books?id=drztDwAAQBAJ>
- [35] I. Döbel, M. Leis, M. Molina Vogelsang, D. Neustroev, H. Petzka, A. Riemer, S. Rüping, A. Voß, M. Wegele, J. Welz, *Maschinelles lernen. eine analyse zu kompetenzen forschung und anwendung* (2018).
URL <https://publica.fraunhofer.de/handle/publica/299081>
- [36] U. Fayyad, G. Piatetsky-Shapiro, P. Smyth, From data mining to knowledge discovery in databases, *AI Magazine* 17 (3) (1996) 37–54. doi:10.1609/aimag.v17i3.1230.
- [37] A. V. Joshi, *Machine Learning and Artificial Intelligence*, Springer International Publishing, 2019.
URL <https://books.google.de/books?id=ybyxDwAAQBAJ>
- [38] S. Schacht, C. Lanquillon, *Blockchain und maschinelles Lernen: Wie das maschinelle Lernen und die Distributed-Ledger-Technologie voneinander profitieren*, Springer Berlin Heidelberg, 2019.
URL https://books.google.de/books?id=nL_ADwAAQBAJ
- [39] F. Pedregosa, G. Varoquaux, A. Gramfort, V. Michel, B. Thirion, O. Grisel, M. Blondel, P. Prettenhofer, R. Weiss, V. Dubourg, J. Vanderplas, A. Passos, D. Cournapeau, M. Brucher, M. Perrot, E. Duchesnay, Scikit-learn: Machine learning in Python, *Journal of Machine Learning Research* 12 (2011) 2825–2830.
- [40] J. Frochte, *Maschinelles Lernen: Grundlagen und Algorithmen in Python*, Carl Hanser Verlag GmbH & Company KG, 2020.
URL <https://books.google.de/books?id=oMHEAAAQBAJ>
- [41] C. Karpfinger, *Höhere Mathematik in Rezepten: Begriffe, Sätze und zahlreiche Beispiele in kurzen Lerneinheiten*, Springer Berlin Heidelberg, 2017.
URL https://books.google.de/books?id=_ng2DwAAQBAJ

- [42] H. Yanai, K. Takeuchi, Y. Takane, Projection Matrices, Generalized Inverse Matrices, and Singular Value Decomposition, 1st Edition, Statistics for Social and Behavioral Sciences, Springer New York, New York, NY, 2011.
- [43] D. Edelman, T. F. Móri, G. J. Székely, On relationships between the pearson and the distance correlation coefficients, Statistics & Probability Letters 169 (2021) 108960. doi:10.1016/j.spl.2020.108960.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167715220302637>
- [44] Z. Zhou, Measuring nonlinear dependence in time-series, a distance correlation approach, Journal of Time Series Analysis 33 (3) (2012) 438–457. doi:10.1111/j.1467-9892.2011.00780.x.
- [45] F. Pokropp, Lineare Regression und Varianzanalyse, Lehr- und Handbücher der Statistik, De Gruyter, 2015.
URL <https://books.google.de/books?id=prbyCQAAQBAJ>
- [46] A. Géron, K. Rother, T. Demmig, Praxiseinstieg Machine Learning mit Scikit-Learn, Keras und TensorFlow: Konzepte, Tools und Techniken für intelligente Systeme, dpunkt, 2020.
URL <https://books.google.de/books?id=hUZqzQEACAAJ>
- [47] C. Cortes, V. Vapnik, Support-vector networks, Machine Learning 20 (3) (1995) 273–297. doi:10.1007/BF00994018.
- [48] B. Lantz, Machine Learning with R: Expert techniques for predictive modeling to solve all your data analysis problems, Packt Publishing, 2015.
URL <https://books.google.de/books?id=ZaJNCgAAQBAJ>
- [49] R. Khemchandani, S. Chandra, Twin Support Vector Machines: Models, Extensions and Applications, Studies in Computational Intelligence, Springer International Publishing, 2016.
URL <https://books.google.de/books?id=HhdADQAAQBAJ>
- [50] R. Schwenkert, Y. Stry, Operations Research kompakt: Eine an Beispielen orientierte Einführung, Springer Berlin Heidelberg, 2015.
URL <https://books.google.de/books?id=zsvjCgAAQBAJ>
- [51] S. Y. Kung, Kernel Methods and Machine Learning, Kernel Methods and Machine Learning, Cambridge University Press, 2014.
URL <https://books.google.de/books?id=aRcmAwAAQBAJ>
- [52] J. Kocijan, Modelling and Control of Dynamic Systems Using Gaussian Process Models, Advances in Industrial Control, Springer International Publishing, 2015.
URL https://books.google.de/books?id=_Gn_CgAAQBAJ
- [53] D. Duvenaud, Automatic model construction with gaussian processes (04 2015).

- [54] C. Sammut, G. I. Webb (Eds.), *Encyclopedia of Machine Learning and Data Mining*, Springer US, Boston, MA, 2017.
- [55] C. E. Rasmussen, C. Williams, *Gaussian Processes for Machine Learning*, Adaptive Computation and Machine Learning series, MIT Press, 2005.
URL <https://books.google.de/books?id=Tr34DwAAQBAJ>
- [56] A. Mallasto, A. Feragen, Wrapped gaussian process regression on riemannian manifolds, in: 2018 IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), IEEE Computer Society, Los Alamitos, CA, USA, 2018, pp. 5580–5588. doi:10.1109/CVPR.2018.00585.
URL <https://doi.ieeecomputersociety.org/10.1109/CVPR.2018.00585>
- [57] D. Dong, A. B. Chan, Generalized gaussian process models, in: 2013 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, IEEE Computer Society, Los Alamitos, CA, USA, 2011, pp. 2681–2688. doi:10.1109/CVPR.2011.5995688.
URL <https://doi.ieeecomputersociety.org/10.1109/CVPR.2011.5995688>
- [58] W. S. McCulloch, W. Pitts, A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity, *The bulletin of mathematical biophysics* 5 (4) (1943) 115–133. doi:10.1007/BF02478259.
- [59] F. Rosenblatt, The perceptron: A probabilistic model for information storage and organization (1958), in: *Ideas That Created the Future: Classic Papers of Computer Science*, The MIT Press, 2021. doi:10.7551/mitpress/12274.003.0020.
- [60] C. M. Bishop, H. Bishop, *Deep Learning: Foundations and Concepts*, Springer, 2024.
- [61] A. Vaswani, N. Shazeer, N. Parmar, J. Uszkoreit, L. Jones, A. N. Gomez, L. Kaiser, I. Polosukhin, Attention is all you need, *CoRR* abs/1706.03762 (2017). arXiv:1706.03762.
URL <http://arxiv.org/abs/1706.03762>
- [62] M. Awad, R. Khanna, *Efficient Learning Machines: Theories, Concepts, and Applications for Engineers and System Designers*, Books for professionals by professionals, Apress, 2015.
URL <https://books.google.de/books?id=Bk4nCgAAQBAJ>
- [63] A. Burkov, *Machine Learning kompakt: Alles, was Sie wissen müssen*, mitp Professional, MITP, 2019.
URL <https://books.google.de/books?id=PtufDwAAQBAJ>
- [64] R. Kruse, C. Borgelt, C. Braune, F. Klawonn, C. Moewes, M. Steinbrecher, *Computational Intelligence: Eine methodische Einführung in Künstliche Neuronale Netze, Evolutionäre Algorithmen, Fuzzy-Systeme und Bayes-Netze*, Computational Intelligence, Springer Fachmedien Wiesbaden, 2015.
URL https://books.google.de/books?id=X_jNCgAAQBAJ

-
- [65] S. Ioffe, C. Szegedy, Batch normalization: Accelerating deep network training by reducing internal covariate shift (2015). *arXiv:1502.03167*.
URL <https://arxiv.org/abs/1502.03167>
- [66] Leonidas Deligiannidis, George Dimitoglou, Hamid R. Arabnia (Eds.), Artificial Intelligence: Machine Learning, Convolutional Neural Networks and Large Language Models, De Gruyter, Berlin, Boston, 2024. doi:10.1515/9783111344126.
- [67] I. Goodfellow, Y. Bengio, A. Courville, Deep Learning, MIT Press, 2016, <http://www.deeplearningbook.org>.
- [68] F. M. Bianchi, E. Maiorino, M. C. Kampffmeyer, A. Rizzi, R. Jenssen, Recurrent Neural Networks for Short-Term Load Forecasting: An Overview and Comparative Analysis, SpringerBriefs in Computer Science, Springer International Publishing, 2017.
URL <https://books.google.de/books?id=wu09DwAAQBAJ>
- [69] S. Hochreiter, J. Schmidhuber, Long short-term memory, Neural Comput. 9 (8) (1997) 1735–1780. doi:10.1162/neco.1997.9.8.1735.
URL <https://doi.org/10.1162/neco.1997.9.8.1735>
- [70] F. M. Salem, Recurrent Neural Networks: From Simple to Gated Architectures, Springer International Publishing, 2022.
URL <https://books.google.de/books?id=bJpXEAAAQBAJ>
- [71] K. Cho, B. van Merriënboer, Ç. Gülçehre, F. Bougares, H. Schwenk, Y. Bengio, Learning phrase representations using RNN encoder-decoder for statistical machine translation, CoRR abs/1406.1078 (2014). *arXiv:1406.1078*.
URL <http://arxiv.org/abs/1406.1078>
- [72] Marc Doyle, Thomas F. Fuller, John Newman, Modeling of galvanostatic charge and discharge of the lithium/polymer/insertion cell, Journal of The Electrochemical Society 140 (6) (1993) 1526. doi:10.1149/1.2221597.
- [73] W. Li, Battery digital twin with physics-based modeling, battery data and machine learning, Ph.D. thesis, RWTH Aachen University (11 2021). doi:10.18154/RWTH-2022-02292.
- [74] A. Mashayekh, S. Pohlmann, M. Hohenegger, M. Khorasani, M. Kuder, T. Weyh, State-of-charge estimation of battery modular multilevel inverter systems based on extended and dual extended kalman filter, in: 2023 International Conference on Smart Energy Systems and Technologies (SEST), 2023, pp. 1–6. doi:10.1109/SEST57387.2023.10257345.
- [75] Gonçalo dos Reis, Calum Strange, Mohit Yadav, Shawn Li, Lithium-ion battery data and where to find it, Energy and AI 5 (2021) 100081. doi:10.1016/j.egyai.2021.100081.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2666546821000355>

- [76] Vedhanayaki Selvaraj, Indragandhi Vairavasundaram, A comprehensive review of state of charge estimation in lithium-ion batteries used in electric vehicles, *Journal of Energy Storage* 72 (2023) 108777. doi:10.1016/j.est.2023.108777.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352152X23021746>
- [77] M.S. Hossain Lipu, M.A. Hannan, Aini Hussain, Afida Ayob, Mohamad H.M. Saad, Tahia F. Karim, Dickson N.T. How, Data-driven state of charge estimation of lithium-ion batteries: Algorithms, implementation factors, limitations and future trends, *Journal of Cleaner Production* 277 (2020) 124110. doi:10.1016/j.jclepro.2020.124110.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S095965262034155X>
- [78] Xin Lai, Yuejiu Zheng, Tao Sun, A comparative study of different equivalent circuit models for estimating state-of-charge of lithium-ion batteries, *Electrochimica Acta* 259 (2018) 566–577. doi:10.1016/j.electacta.2017.10.153.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0013468617322880>
- [79] Mehmet Korkmaz, Soc estimation of lithium-ion batteries based on machine learning techniques: A filtered approach, *Journal of Energy Storage* 72 (2023) 108268. doi:10.1016/j.est.2023.108268.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352152X23016651>
- [80] Ephrem Chemali, Phillip J. Kollmeyer, Matthias Preindl, Ali Emadi, State-of-charge estimation of li-ion batteries using deep neural networks: A machine learning approach, *Journal of Power Sources* 400 (2018) 242–255. doi:10.1016/j.jpowsour.2018.06.104.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378775318307080>
- [81] Dynamometer drive schedules.
URL <https://www.epa.gov/vehicle-and-fuel-emissions-testing/dynamometer-drive-schedules>
- [82] Meng Jiao, Dongqing Wang, Jianlong Qiu, A gru-rnn based momentum optimized algorithm for soc estimation, *Journal of Power Sources* 459 (2020) 228051. doi:10.1016/j.jpowsour.2020.228051.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378775320303542>
- [83] M. A. Hannan, D. N. T. How, M. S. H. Lipu, P. J. Ker, Z. Y. Dong, M. Mansur, F. Blaabjerg, Soc estimation of li-ion batteries with learning rate-optimized deep fully convolutional network, *IEEE Transactions on Power Electronics* 36 (7) (2021) 7349–7353. doi:10.1109/TPEL.2020.3041876.

-
- [84] A. Haraz, K. Abualsaud, A. Massoud, State-of-health and state-of-charge estimation in electric vehicles batteries: A survey on machine learning approaches, *IEEE Access* 12 (2024) 158110–158139. doi:10.1109/ACCESS.2024.3486989.
- [85] Xin Sui, Shan He, Søren B. Vilsen, Jinhao Meng, Remus Teodorescu, Daniel-Ioan Stroe, A review of non-probabilistic machine learning-based state of health estimation techniques for lithium-ion battery, *Applied Energy* 300 (2021) 117346. doi:10.1016/j.apenergy.2021.117346.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0306261921007546>
- [86] Sijia Yang, Caiping Zhang, Jiuchun Jiang, Weige Zhang, Linjing Zhang, Yubin Wang, Review on state-of-health of lithium-ion batteries: Characterizations, estimations and applications, *Journal of Cleaner Production* 314 (2021) 128015. doi:10.1016/j.jclepro.2021.128015.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0959652621022332>
- [87] Duo Yang, Xu Zhang, Rui Pan, Yujie Wang, Zonghai Chen, A novel gaussian process regression model for state-of-health estimation of lithium-ion battery using charging curve, *Journal of Power Sources* 384 (2018) 387–395. doi:10.1016/j.jpowsour.2018.03.015.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378775318302398>
- [88] B. Bole, C. Kulkarni, M. Daigle, Randomized battery usage data set, <https://www.nasa.gov/content/prognostics-center-of-excellence-data-set-repository>.
- [89] H. Feng, G. Shi, SoH and RUL prediction of Li-ion batteries based on improved gaussian process regression, *Journal of Power Electronics* 21 (12) (2021) 1845–1854. doi:10.1007/s43236-021-00318-5.
- [90] R. R. Richardson, M. A. Osborne, D. A. Howey, Battery health prediction under generalized conditions using a gaussian process transition model, *Journal of Energy Storage* 23 (2019) 320–328. doi:<https://doi.org/10.1016/j.est.2019.03.022>.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352152X18307734>
- [91] Piyush Tagade, Krishnan S. Hariharan, Sanoop Ramachandran, Ashish Khandelwal, Arunava Naha, Subramanya Mayya Kolake, Seong Ho Han, Deep gaussian process regression for lithium-ion battery health prognosis and degradation mode diagnosis, *Journal of Power Sources* 445 (2020) 227281. doi:10.1016/j.jpowsour.2019.227281.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378775319312741>

- [92] K. Liu, Y. Li, X. Hu, M. Lucu, W. D. Widanage, Gaussian process regression with automatic relevance determination kernel for calendar aging prediction of lithium-ion batteries, *IEEE Transactions on Industrial Informatics* 16 (6) (2020) 3767–3777. doi:10.1109/TII.2019.2941747.
- [93] K. M. Carthy, H. Gullapalli, K. M. Ryan, T. Kennedy, Review—use of impedance spectroscopy for the estimation of li-ion battery state of charge, state of health and internal temperature, *Journal of The Electrochemical Society* 168 (8) (2021) 080517. doi:10.1149/1945-7111/ac1a85.
- [94] Y. Li, K. Liu, A. M. Foley, A. Zülke, M. Berecibar, E. Nanini-Maury, J. V. Mierlo, H. E. Hoster, Data-driven health estimation and lifetime prediction of lithium-ion batteries: A review, *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 113 (2019) 109254. doi:10.1016/j.rser.2019.109254.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S136403211930454X>
- [95] Y. Zhang, Q. Tang, Y. Zhang, J. Wang, U. Stimming, A. A. Lee, Identifying degradation patterns of lithium ion batteries from impedance spectroscopy using machine learning, *Nature Communications* 11 (1) (2020) 1706. doi:10.1038/s41467-020-15235-7.
- [96] J. Obregon, Y.-R. Han, C. W. Ho, D. Muraliraman, C. W. Lee, J.-Y. Jung, Convolutional autoencoder-based soh estimation of lithium-ion batteries using electrochemical impedance spectroscopy, *Journal of Energy Storage* 60 (2023) 106680. doi:10.1016/j.est.2023.106680.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352152X23000774>
- [97] C. Chang, S. Wang, J. Jiang, Y. Gao, Y. Jiang, L. Liao, Lithium-ion battery state of health estimation based on electrochemical impedance spectroscopy and cuckoo search algorithm optimized elman neural network, *Journal of Electrochemical Energy Conversion and Storage* 19 (3) (2022) 030912. doi:10.1115/1.4054128.
- [98] Seongyoon Kim, Yun Young Choi, Jung-Il Choi, Impedance-based capacity estimation for lithium-ion batteries using generative adversarial network, *Applied Energy* 308 (2022) 118317. doi:10.1016/j.apenergy.2021.118317.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0306261921015725>
- [99] B. Bole, C. Kulkarni, M. Daigle, Adaptation of an electrochemistry-based li-ion battery model to account for deterioration observed under randomized use, in: *Proceedings of the Annual Conference of the Prognostics and Health Management Society*, 2014.
- [100] M. Spielbauer, J. Soellner, P. Berg, K. Koch, P. Keil, C. Rosenmüller, O. Bohlen, A. Jossen, Experimental investigation of the impact of mechanical deformation on aging, safety and electrical behavior of 18650 lithium-ion battery cells, *Journal of Energy Storage* 55 (2022) 105564. doi:10.1016/j.est.2022.105564.

- [101] S. Pohlmann, A. Mashayekh, M. Kuder, A. Neve, T. Weyh, Data augmentation and feature selection for the prediction of the state of charge of lithium-ion batteries using artificial neural networks, *Energies* 16 (18) (2023). doi:10.3390/en16186750.
URL <https://www.mdpi.com/1996-1073/16/18/6750>
- [102] N. Kunz, SMOGN: Synthetic minority over-sampling technique for regression with gaussian noise (2020).
URL <https://pypi.org/project/smogn/>
- [103] L. Torgo, R. Ribeiro, B. Pfahringer, P. Branco, Smote for regression, Vol. 8154, 2013, pp. 378–389. doi:10.1007/978-3-642-40669-0\textunderscore}33.
- [104] P. Branco, L. Torgo, R. P. Ribeiro, Smogn: a pre-processing approach for imbalanced regression, in: P. B. Luís Torgo, N. Moniz (Eds.), *Proceedings of the First International Workshop on Learning with Imbalanced Domains: Theory and Applications*, Vol. 74 of *Proceedings of Machine Learning Research*, PMLR, 2017, pp. 36–50.
URL <https://proceedings.mlr.press/v74/branco17a.html>