锂离子电池单粒子模型的物理信息神经网络代理建模

Yi Zhuang*、Yusheng Zheng*、Yunhong Che*、Remus Teodorescu**奥尔堡大学，丹麦奥尔堡 *9220*（*yizhu@energy.aau.dk*、*yzhe@energy.aau.dk*、*ych@energy.aau.dk*、*ret@energy.aau.dk*）

摘要：基于物理的模型在电池管理中发挥着关键作用，但由于求解耦合代数偏微分方程的计算成本较高，在实时应用中面临挑战。为加速模型仿真，本研究对三种用于电池单粒子模型建模的物理信息神经网络（PINN）架构进行了基准测试，其中包括两种传统的 PINN架构和一种基于 DeepONet 的架构。我们在各种电流条件下评估并比较了这些物理信息神经网络的准确性和泛化能力。结果突显了物理信息神经网络在电池物理建模方面的潜力，同时也揭示了传统 PINN架构在高度动态的电流条件下存在的局限性。其中，傅里叶增强型 DeepONet展现出卓越的泛化性能，与数值求解器相比，加速比接近 10× 。本研究展示了将基于物理的模型与数据驱动解决方案相结合的实例，不仅能够加快计算，还能提供更多物理层面的洞见。

关键词：物理信息神经网络、电池建模、锂离子电池、单颗粒模型、深度算子网络

1. 引言

锂离子电池组是电动汽车的主要动力和储能部件，由数百甚至数千个电芯组成。因此，电池管理系统（BMS）在确保运行安全、效率和可靠性方面发挥着至关重要的作用（Li 等人，2025年）。传统的 BMS 实现依赖等效电路模型（ECM）进行状态估计或最优控制。尽管这些经验模型计算效率高，但难以捕捉电芯运行期间内部复杂的电化学过程。这一局限从根本上制约了基于 ECM 的估计方法的长期准确性和鲁棒性。相比之下，基于物理的模型（PBM）为下一代 BMS 技术提供了一个很有前景的发展方向。基于第一性原理电化学理论，PBM 通过耦合的偏微分方程和代数方程描述电池内部状态，从而能够高保真地预测浓度动态、反应动力学和内部电势。然而，这些模型固有的强非线性和多尺度耦合给实时控制和车载应用带来了重大挑战，因此需要采用各种模型降阶策略。正如 Li 等人（2022年）所总结的那样，现有的降阶方法主要基于数学简化。

近年来，机器学习的进步为重构基于物理的模型开辟了新的机遇，并显著提升了计算效率。与传统的降阶建模技术相比，数据驱动和物理信息学习方法有望在保留关键电化学行为的同时，实现快速、实时计算，从而为新一代电池管理系统（BMS）应用提供一种强有力的替代方案。

物理信息学习方法（Raissi 等人，2019年）因其出色的数据效率和强大的泛化能力而日益受到关注。Hassanaly 等人（2024a、2024b）针对单粒子模型（SPM）和伪二维（P2D）模型，开发了无需使用任何带标签数据的物理信息神经网络（PINN）代理模型，展现了物理信息神经网络在 P2D 建模中的巨大潜力。Lee 等人（2025年）也利用物理信息神经网络构建了 P2D 代理模型，并提出了一种处理 Butler–Volmer 方程非线性的方法。然而，这些模型的一大局限是仅将时间和空间作为输入，这限制了它们对训练期间所用特定电流曲线的适用性。为进一步提升物理信息神经网络的泛化能力，研究者引入了 PI-DeepONet（Lu 等人，2021a；Wang 等人，2021a）和 PI-FNO（Li 等人，2024年）等算子学习框架。这些方法学习函数空间之间的映射，因此具有强得多的泛化性能。Zheng 等人（2023年）应用 PI-DeepONet 构建了增强型单粒子模型（ESPM）代理模型，而 Brendel 等人（2025年）则将 PI-DeepONet 与物理参数化 PINN（Cho 等人，2024年）及其时空多尺度傅里叶特征（Wang 等人，2021b）相结合，以进一步增强泛化能力。

尽管取得了这些进展，现有研究仍缺乏对传统物理信息神经网络架构的泛化局限性，以及带标签数据如何影响物理信息神经网络性能的系统性研究。此外，传统物理信息神经网络与PI-DeepONet等算子学习方法之间的直接比较仍然较少，因此关于二者相对优势及其在电池建模中的适用性，仍存在许多未解问题。

为弥补这些不足，本研究作出了两项主要贡献。首先，我们设计了新型PINN架构，

将电流曲线作为输入，从而提升模型在不同工况下的泛化能力。为展示其数据效率，我们还探究了不同数量的带标签数据对模型准确度的影响。其次，我们全面比较了三种PINN架构的性能和泛化能力，为设计用于建模更复杂电池物理过程的PINN架构提供指导。

2. 基于物理的模型

2.1 单粒子模型

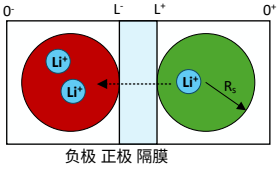

图1. 单粒子模型示意图

与包含沿 x 轴分布的多个粒子的伪二维模型不同，单粒子模型假设整个x轴上的摩尔通量密度 j_n 均匀。因此，每个电极均由单个粒子表示，且 j_n 可直接计算如下（Zhang et al., 2000）：

$$j_n^+(t) = -\frac{I(t)}{Aa_s^+FL^+},\ j_n^-(t) = \frac{I(t)}{Aa_s^-FL^-} \tag{1}$$

其中，I（t）为输入电流，a_s 为比界面面积 $a_s = 3\varepsilon_s/R_s$。

粒子内部锂离子浓度的扩散由以下方程描述：

$$\frac{\partial c_s(r,t)}{\partial t} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 D_s \frac{\partial c_s(r,t)}{\partial r}\right) \tag{2}$$

其中，r表示活性材料颗粒的径向坐标。式 (2) 的边界条件和初始条件如下：

$$c_s(r,0) = c_s^0$$

$$\left.\frac{\partial c_s}{\partial r}\right|_{r=0} = 0$$

$$D_s \left.\frac{\partial c_s}{\partial r}\right|_{r=R_s} = -j_n(t)$$

过电位根据巴特勒-沃尔默方程计算：

$$j_n(t) = \frac{2i_0}{F} sinh\left(\frac{F}{2RT}\eta(t)\right) \tag{3}$$

其中，$\eta(t)$ 为反应过电位，$i_0(t)$ 为交换电流密度，其表达式为：

$$i_0(t) = k\bar{c}_e^{0.5} c_{ss}^{0.5}(t)\left(c_{s,max} - c_{ss}(t)\right)^{0.5}$$

因此，端电压可表示为正极与负极之间的固相电势差：

$$V(t) = \Phi_s(0^+,t) - \Phi_s(0^-,t) \tag{4}$$

固体电极中的电势为：

$$\Phi_s(t) = U_{OCP}\left(c_{ss}\,(t)/c_{s,max}\right) - \eta(t) \tag{5}$$

其中，$c_{ss}(t)$为颗粒表面浓度。

这些模型参数的含义及对应数值见表 A1。

3. SPM 代理模型

基于物理的电池模型通常涉及偏微分方程（PDE），这会显著减慢数值模拟。为实现实时应用，我们采用物理信息神经网络（PINN）的概念来求解嵌入单粒子模型（SPM）中的偏微分方程，从而得到一种称为物理信息单粒子模型（PI-SPM）的替代模型。本节将简要介绍物理信息神经网络，描述可采用的网络架构，并讨论如何引入无量纲化和硬约束，以促进更高效的训练。

3.1 物理信息神经网络

物理信息神经网络是一类深度学习模型，将通常表示为偏微分方程的控制物理定律直接嵌入训练目标中。考虑定义在时空域 $\Omega \subset \mathrm{R}^d \times [0,T]$ 上的一般时变偏微分方程：

$$\mathcal{N}[u(x,t)] = 0, (x,t) \in \Omega,$$

满足初始条件和边界条件

$$u(x,0) = h(x), \qquad u(x,t) = g(x,t), \qquad (x,t) \in \partial\Omega.$$

其中，x 和 t 分别表示空间坐标和时间坐标，$\mathcal{N}$ 是一般的线性或非线性微分算子，$u(x,t)$ 表示偏微分方程解，$\mathrm{h}(x)$ 是给定的初始条件，而 $g(x,t)$ 定义了边界 $\partial\Omega$ 上的边界条件。该表述具有一般性，通过将高阶偏微分方程改写为一阶方程组，可以方便地扩展到高阶偏微分方程。

为近似未知解 $u(x,t)$，构建一个全连接神经网络 $u_{NN}(x,t)$。自动微分如今已广泛应用于现代机器学习框架，可对微分算子 $\mathcal{N}[u_{NN}]$ 进行精确的无网格求值，从而避免离散化误差，并大幅简化实现过程。在训练过程中，通过优化网络参数以最小化复合损失函数，确保其满足偏微分方程所编码的物理约束，同时纳入初始条件、边界条件以及可选的观测数据。所得损失函数可写为：

$$\mathcal{L} = \lambda_{\mathrm{r}}\mathcal{L}_{\mathrm{r}} + \lambda_{\mathrm{b}}\mathcal{L}_{\mathrm{b}} + \lambda_0\mathcal{L}_0 + \lambda_{\mathrm{d}}\mathcal{L}_{\mathrm{d}},$$

其中

$$\mathcal{L}_{\mathrm{r}} = \frac{1}{\mathrm{N_r}} \sum_{\mathrm{i=1}}^{\mathrm{N_r}} \| \mathcal{N}[\mathrm{u_{NN}}(x_{\mathrm{i}}, t_{\mathrm{i}})] \|^2 ,$$

$$\mathcal{L}_{\mathrm{b}} = \frac{1}{\mathrm{N_b}} \sum_{\mathrm{i=1}}^{\mathrm{N_b}} \| u_{NN}(x_i, t_i) - g(x_i, t_i) \|^2 ,$$

$$\mathcal{L}_{0} = \frac{1}{\mathrm{N_0}} \sum_{\mathrm{i=1}}^{\mathrm{N_0}} \| u_{NN}(x_i, 0) - h(x_i) \|^2 ,$$

$$\mathcal{L}_{\mathrm{d}} = \frac{1}{\mathrm{N_d}} \sum_{\mathrm{i=1}}^{\mathrm{N_d}} \| u_{NN}(x_i, t_i) - u_i^{data} \|^2 .$$

在这些表达式中，N_r、 N_b、 N_0和N_d 分别表示残差点、边界点、初始值点和数据点的数量，而λ_r、 λ_b、 λ_0、 λ_d 是用于平衡不同损失分量的权重系数。最小化 L 可确保学习得到的解同时满足观测数据和控制物理规律。物理信息神经网络在求解正问题和反问题、参数估计以及不确定性量化方面展现出巨大潜力。它们能够将数据驱动学习与物理约束相结合，因此是科学机器学习和计算建模的有力工具。

3.2 模型架构

如图2所示，构建了三种不同的模型架构：分离式架构、合并式架构和基于 DeepONet 的架构。前两种架构基于传统物理信息神经网络结构，第三种则对应 PI-DeepONet 模型。三种架构的输入均相同：时间、空间和电流。在分离式架构中，两个浓度状态分别由两个独立的神经网络进行预测。这种配置的优点是网络参数彼此独立，使每个网络都能更好地捕捉相应状态的特定特征。相比之下，合并式架构采用单个神经网络同时预测两种浓度。由于这两种状态满足相似的控制方程，共享参数能够构建更紧凑的架构，并降低计算复杂度。第三种架构基于 DeepONet，其改动是在分支网络和主干网络的输出合并后添加一个线性层（图2中的蓝色方块），从而实现对两种状态的预测。由于 DeepONet 旨在学习输入函数与输出函数（即算子）之间的映射，因此预计它在处理动态电流输入时能取得更好的性能。

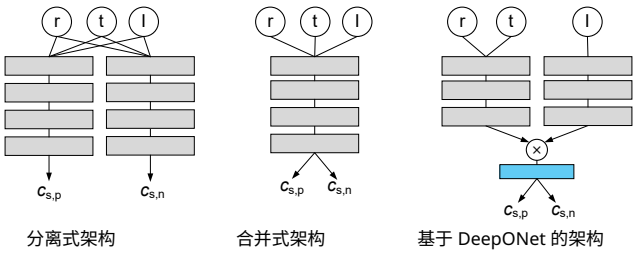

图 2. PI-SPM 的架构。

3.3 无量纲化

数据归一化是机器学习中的一项重要预处理步骤，它将输入特征和输出转换到相近的尺度，有助于使训练过程更加稳定并加快收敛。在单粒子模型中，存在一个微观坐标（r）和一个时间坐标（t）。这些多尺度特征往往会导致物理信息神经网络训练无法收敛（Wang等，2022）。与数据/特征归一化类似，物理信息神经网络中的无量纲化技术已被证明会显著影响模型准确度和收敛速度（Wang等，2023）。在单粒子模型的无量纲化过程中，坐标 t、r, 和浓度 c 根据特征参考值进行重新缩放，如下所示：

$$\tilde{t} = \frac{t}{(R_s^-)^2 / D_s^-}, \qquad \tilde{r} = \frac{r}{R_s}, \qquad \tilde{c}_s = \frac{c_s}{c_{s,max}}$$

经过无量纲化后，重新缩放的控制方程（2）及其对应的初始条件和边界条件如下：

$$\frac{\partial \tilde{c}_s^+}{\partial \tilde{t}} \tilde{r} = \left(\frac{\partial \tilde{c}_s^{+2}}{\partial^2 \tilde{r}} \tilde{r} + 2 \frac{\partial \tilde{c}_s^+}{\partial \tilde{r}} \right) \cdot \frac{D_s^+}{D_s^-} \frac{(R_s^-)^2}{(R_s^+)^2}$$

$$\frac{\partial \tilde{c}_s^-}{\partial \tilde{t}} \tilde{r} = \left(\frac{\partial \tilde{c}_s^{-2}}{\partial^2 \tilde{r}} \tilde{r} + 2 \frac{\partial \tilde{c}_s^-}{\partial \tilde{r}} \right)$$

$$\left. \frac{\partial \tilde{c}_s}{\partial \tilde{r}} \right|_{\tilde{r}=0} = 0$$

$$\left. \frac{\partial \tilde{c}_s}{\partial \tilde{r}} \right|_{\tilde{r}=1} = -j_n \frac{R_s}{D_s c_{s,max}}$$

为避免在 $r = 0$ 处由 $1/r$ term 引起的数值不稳定性，方程两边均乘以 r。

3.4 初始条件硬约束

在原始物理信息神经网络框架中，初始条件和边界条件是通过在损失函数中最小化其残差来施加的，这种策略通常称为软约束方法。尽管这种方法应用广泛且通常效果良好，但纳入这些残差项不可避免地会增加训练复杂度。为缓解这一问题，一些研究（Lu等，2021b；Sukumar和Srivastava，2022）提出了硬约束方法，通过重构神经网络输出，使其天然满足初始条件和边界条件。

在我们的工作中，神经网络的输出 $NN(\tilde{r}, \tilde{t}, I;\ \theta)$ 会经过一个输出变换层，以确保初始条件 $\tilde{c}(\tilde{r}, 0) = \tilde{c}_0$ 得到精确满足。具体而言，变换后的输出定义为

$$\tilde{c}(\tilde{r}, \tilde{t}) = NN(\tilde{r}, \tilde{t}, I; \theta)\, \tilde{t} + \tilde{c}_0,$$

该方法通过构造方式强制满足初始条件。

4. 结果

本节将全面比较三种代理模型在恒定电流和动态电流条件下的表现。参考模型为采用有限差分法求解的单粒子模型。我们还将探讨带标签数据对模型准确度和泛化性能的影响。所有训练实验均在 NVIDIA RTX 4500 Ada Generation GPU 上进行。

4.1 恒流条件下的 *PI-SPM*

首先，在恒流条件下对这三个模型进行了评估。训练电流为

$$I_{\text{train}} = [1, 2, 4, 6, 8, 10]\ \text{A},$$

测试电流为

$$I_{\text{test}} = [1.5, 3, 5, 7, 9]\ \text{A}.$$

为确保比较相对公平，我们调整了每个模型中的神经元数量，使三个网络架构包含的可训练参数数量大致相同（约 6,650 个）。此外，所有训练超参数和采样策略均保持一致。模型采用 Adam 优化器进行训练，初始学习率为 1×10^{-4}，随后每 1,500 个训练轮次衰减 90%。两个边界条件和偏微分方程残差所用的样本数分别为 200、500 和 2,000。训练轮次总数为 20,000。

三种模型在测试数据上的表现如图 3 所示。分离式与合并式架构的准确度没有显著差异。基于 DeepONet 的模型误差较大，且需要更长的训练时间。然而，这并不意味着 DeepONet 架构逊于另外两种架构。由于这三种架构存在显著差异，它们各自的最优超参数可能并不相同。尽管 DeepONet 的相对表现是三者中最差的，但如图 4 所示，其预测的浓度和端电压仍与基于有限差分法得到的参考解吻合良好。

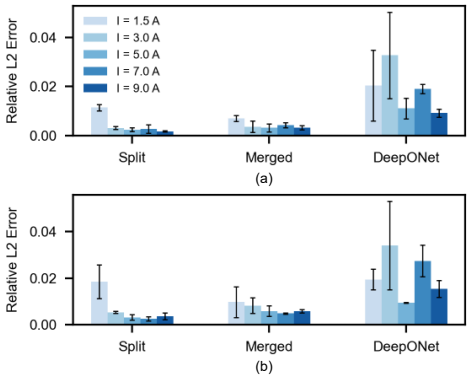

图 3. 测试条件下三个模型的相对 L_2 误差。(a) 正极浓度误差。(b) 负极浓度误差。

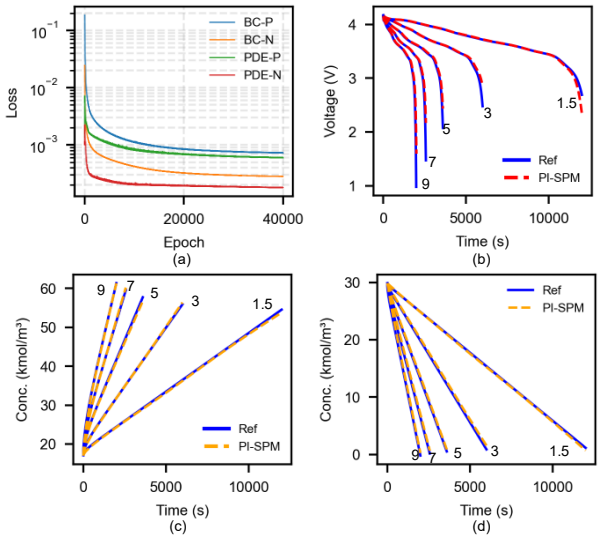

图 4. PI-SPM（DeepONet）模型在测试条件下的性能。（a）边界条件（BC）损失和偏微分方程损失。（b）端电压。（c）正极表面浓度。（d）负极表面浓度。

此外，我们评估了模型在超出训练数据上限（10 A）的电流条件下的表现，以测试模型的外推能力，并选取 11 A 和 13 A 作为测试电流。结果表明，分离式与合并式架构的外推表现没有显著差异。两个模型在 11 A 时都能准确预测，但在 13 A 时性能均明显下降。这些观察结果表明，模型具备一定的外推能力，但仅限于有限范围内。

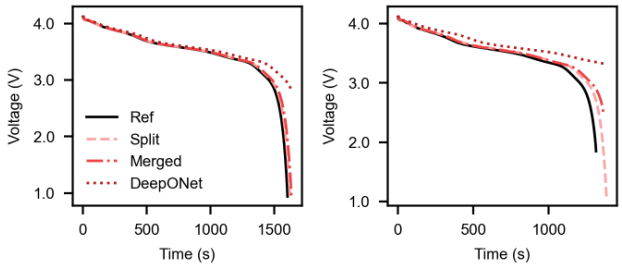

图 5. 模型在外推条件下的性能（左：11 A；右：13 A）。

4.2 动态电流条件下的 *PI-SPM*

在实际应用中，放电电流可能发生任意变化，因此不可能在训练数据中涵盖所有可能的电流曲线。因此，对于基于神经网络的代理模型而言，学习高度动态的动态电流输入与所得浓度分布之间的关系尤其具有挑战性。为简化这一任务，我们首先考虑使用高斯随机场（GRF）生成的低频动态电流曲线，其电流幅值范围为 1 至 10 A。

图6展示了三种架构在训练数据集中仅包含一种动态电流条件下的训练结果。在这三个模型中，只有基于 DeepONet 的 PI-SPM 表现

良好地适用于高斯随机场电流条件。若无法获取带标签数据，拆分式和合并式架构难以学习动态边界条件下的偏微分方程解。如图6(c)和图6(d)所示，尽管边界条件损失和偏微分方程损失在训练过程中均有所下降，但正极和负极浓度的预测误差却持续增加。即使增加样本数量、神经元数量和边界条件损失的权重，甚至应用课程正则化（Krishnapriyan 等人，2021），情况仍然如此。这两种架构始终表现出相似的失败模式。

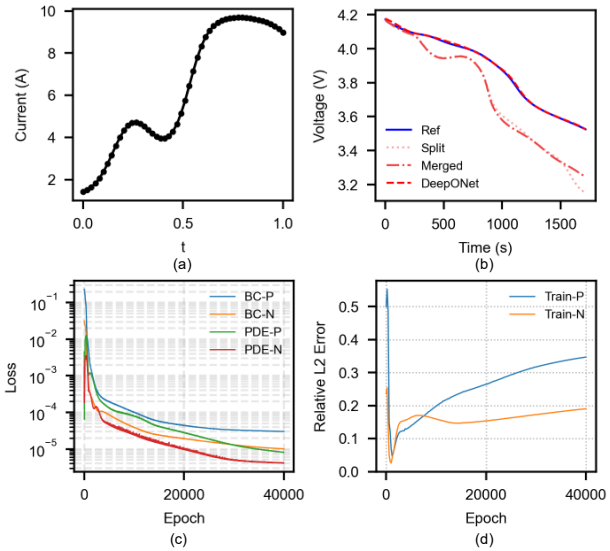

图 6. GRF 电流条件下三种模型的训练结果。(a) GRF 电流曲线样本。(b) 电压曲线。(c) 合并式 PI-SPM 的训练损失曲线。(d) 合并式 PI-SPM 浓度在训练过程中的相对 L_2误差。

基于 DeepONet 的 PI-SPM 在测试数据集上的性能如图 7 所示。训练数据集中包含 100 个电流样本，测试数据集中包含 50 个电流样本。如图 8 所示，其泛化能力在很大程度上取决于训练期间所使用的电流样本数量。要在测试数据上实现令人满意的泛化效果，需要将数百个高斯随机场电流样本纳入训练数据集。然而，这会显著增加计算成本。例如，使用 100 个电流样本训练 20,000 个训练轮次大约需要 15 小时。

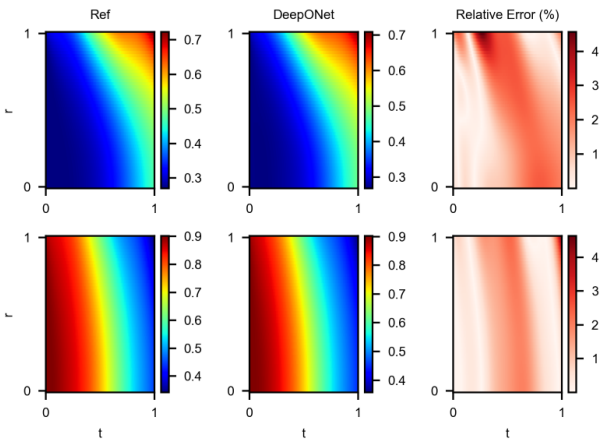

图 7. 基于 DeepONet 的 PI-SPM 在 GRF 测试电流条件下的性能。（上：正极浓度；下：负极浓度）。

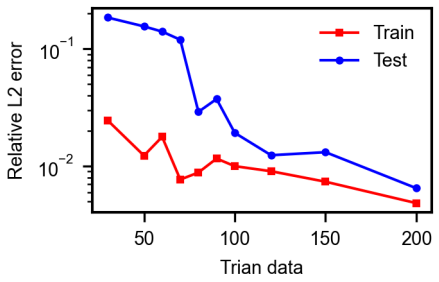

图 8. 不同训练电流样本数量下的误差趋势。

高斯随机场电流曲线仅在非常低的频率下发生变化，这使得算子相对容易学习，但无法代表实际应用。在实践中，储能系统和电动汽车中的电流具有高度动态性，并且包含频繁的突变。为了更好地捕捉此类行为，我们引入了随机阶跃电流（RSC）曲线。随机阶跃电流（RSC）是一种分段常数波形，其幅值通过随机采样获得，并具有突变，从而形成高度动态的非周期性电流曲线。

图 9(a) 展示了一个随机阶跃电流曲线示例，图 9(b) 对比了基于 DeepONet 的 PI-SPM 预测的两个电极表面浓度与参考解。结果表明，DeepONet 能够跟随总体趋势，但无法捕捉高频分量。这一局限与全连接神经网络的谱偏置密切相关；谱偏置是一种众所周知的缺陷，会妨碍 PINN 类模型准确学习高频函数（Wang 等人，2021b）。Wang 等人（2021b）利用神经切线核理论分析了这一问题，并提出了两种多尺度架构：多尺度傅里叶特征架构和时空多尺度傅里叶特征架构。

在时空多尺度傅里叶特征方法中，可以根据目标问题的特性选择不同的频带。在本研究中，我们使用 $\sigma_r = 1$ $\sigma_t = 30$ and，以帮助网络更好地学习时域中的高频动态。如图 9(c) 所示，应用傅里叶特征映射后，预测的表面浓度与参考解的动态特征吻合度显著提高。

我们进一步比较了传统有限差分求解器（径向区域内有 50 个离散点）与傅里叶增强 DeepONet 代理模型在 RSC 电流曲线下的计算时间。在中央处理器上重复仿真 50 次，有限差分法的平均计算时间为 551 毫秒，代理模型则为 56 毫秒，对应约 10× 倍的加速比。这种加速在需要重复仿真的场景中特别有优势，包括灵敏度分析、参数辨识和实时控制；在这些场景中，快速评估电池模型至关重要。

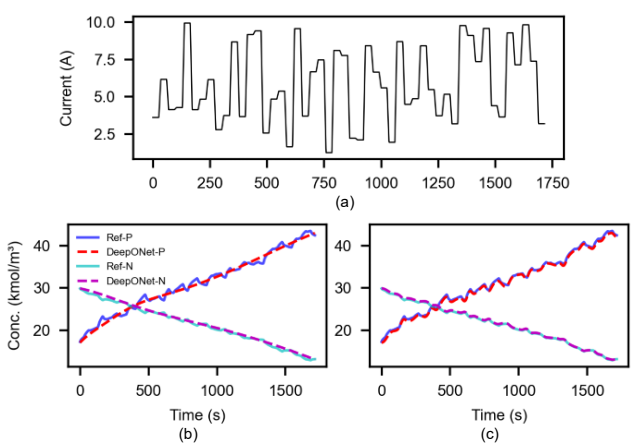

图9. 高频电流条件下的模型性能。(a) 随机阶跃电流曲线示例。(b) 未使用傅里叶特征映射时的表面浓度。(c) 使用傅里叶特征映射时的表面浓度。

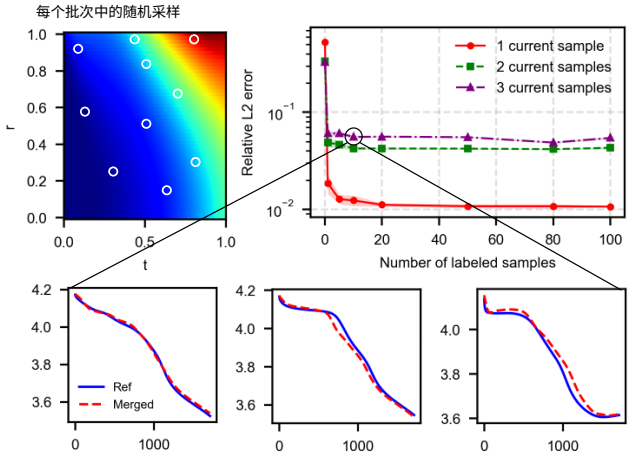

图10. 合并式 PI-SPM 在不同带标签样本数量下的训练结果。

4.3 带标签数据上的模型评估

在上一节中，未使用带标签数据进行训练时，拆分式和合并式 PI-SPM 模型未能学会 GRF 电流输入与浓度分布之间的正确映射。物理信息建模的核心思想是将数据信息与物理约束相结合，从而实现准确且具有良好泛化能力的预测。然而，现有文献中的研究往往只采用基于物理的损失或基于数据的损失，鲜有研究探讨如何通过引入带标签数据来提升模型性能。本节将考察带标签数据对训练性能的影响，重点关注合并式 PI-SPM架构。

训练过程中，每个批次都会从参考数据集中随机选取指定数量的带标签样本，并将其作为数据损失项纳入损失函数。我们评估了合并式 PI-SPM 在不同训练电流曲线数量和不同带标签样本数量下的表现。结果如图10所示。

这些观察结果揭示了几个重要趋势。首先，即使只有一个带标签样本，也足以引导神经网络趋向正确解。当带标签样本数量增加到约十个以上时，准确度不再进一步提升，表明其收益逐渐递减。其次，合并式 PI-SPM 在仅使用一条电流曲线进行训练时，误差非常低。然而，当使用两条电流曲线进行训练时，其误差显著增加；使用三条曲线训练时，性能退化更加明显。与图 8 中基于 DeepONet 的 PI-SPM 相比，这凸显了传统基于物理信息神经网络的架构存在的根本局限：尽管它们能够在具有固定边界条件的单个偏微分方程上实现高准确度，但在学习具有变化边界条件的一族偏微分方程时表现不佳，这说明其算子学习能力弱于 DeepONet。

5. 结论

本研究系统评估了用于单粒子模型的三种物理信息代理架构，即分离式 PI-SPM、合并式 PI-SPM 和基于 DeepONet 的 PI-SPM。在恒流条件下，所有模型都实现了良好的准确度和适当的外推能力。然而，当引入动态电流曲线后，根本性差异开始显现。传统基于物理信息神经网络的架构在没有带标签数据的情况下，始终无法学习动态边界条件下的偏微分方程解；相比之下，基于 DeepONet 的 PI-SPM 仍然有效，但需要数百个训练电流样本才能实现良好的泛化。对于随机阶跃电流等高度动态的输入，DeepONet 存在谱偏置局限，难以捕捉高频浓度动态。引入时空傅里叶特征映射可以显著缓解这一问题，从而实现对快速瞬态的准确预测。为展示数据效率，我们还研究了不同数量的带标签数据对模型准确度的影响。

总体而言，本研究阐明了基于物理信息神经网络的单粒子模型代理模型在哪些运行条件下仍然可行，并指出傅里叶增强型 DeepONet 是一种更稳健的方法，适用于真实且高度动态的电池运行场景。这些见解为开发适用于电池管理应用、具有更强泛化能力的物理信息代理模型奠定了实用基础。

未来研究仍有几个重要问题亟待解决。单粒子模型仅适用于低 C倍率（≤1C），而要为 P2D模型乃至多物理场框架构建具有强泛化能力的代理模型，仍面临巨大挑战。物理编码模型（Faroughi等，2024；Huang等，2024）或许能为此提供有前景的研究方向。此外，模型参数可能随温度、应力和老化而变化。如何使代理模型捕捉参数的变化，是另一项重要挑战。尽管一些研究（Brendel等，2025；Hassanaly等，2024b；Panahi等，2025）已将部分参数作为神经网络输入，但基于物理的电池模型通常包含二十多个参数，

因此，如何对参数进行全面条件化，虽困难却至关重要，仍是一个重要的研究课题。

致谢

本研究部分经费由Villum基金会智能电池项目（编号：222860）提供。Yunhong Che感谢诺和诺德基金会（编号：NNF24OC0088261）的支持。

生成式人工智能及写作过程中人工智能辅助技术的声明

在准备本研究的过程中，作者使用ChatGPT协助润色语言、提升表达清晰度。所有技术内容、分析和结论均由作者独立完成，作者对最终稿件承担全部责任。

参考文献

Brendel, P., Mele, I., Rosskopf, A., Katrašnik, T., Lorentz, V., 2025年. 用于试验设计的参数化物理信息深度算子网络：应用于锂离子电池电芯. 《储能杂志》128, 117055. https://doi.org/10.1016/j.est.2025.117055 Cho, W., Jo, M., Lim, H., Lee, K., Lee, D., Hong, S., Park, N., 2024年. 参数化偏微分方程的参数化物理信息神经网络. https://doi.org/10.48550/arXiv.2408.09446 Faroughi, S.A., Pawar, N.M., Fernandes, C., Raissi, M., Das, S., Kalantari, N.K., Kourosh Mahjour, S., 2024年. 科学计算中的物理引导、物理信息和物理编码神经网络及算子：流体与固体力学. J. Comput. Inf. Sci. Eng 24. https://doi.org/10.1115/1.4064449 Hassanaly, M., Weddle, P.J., King, R.N., De, S., Doostan, A., Randall, C.R., Dufek, E.J., Colclasure, A.M., Smith, K., 2024a. 用于参数推断的锂离子电池模型物理信息神经网络代理模型。第一部分：单颗粒模型的实现与多保真层级结构. https://doi.org/10.48550/arXiv.2312.17329 Hassanaly, M., Weddle, P.J., King, R.N., De, S., Doostan, A., Randall, C.R., Dufek, E.J., Colclasure, A.M., Smith, K., 2024b. 用于参数推断的锂离子电池模型物理信息神经网络代理模型，第二部分：伪二维模型的正则化与应用. 《储能杂志》98, 113104. https://doi.org/10.1016/j.est.2024.113104 Huang, Y., Zou, C., Li, Y., Wik, T., 2024年. MINN：微分代数方程的动力学学习及其在电池建模中的应用. 《IEEE模式分析与机器智能汇刊》46, 11331–11344. https://doi.org/10.1109/TPAMI.2024.3456475 Krishnapriyan, A.S., Gholami, A., Zhe, S., Kirby, R.M., Mahoney, M.W., 2021. 物理信息神经网络中可能的失效模式分析. https://doi.org/10.48550/arXiv.2109.01050 Lee, M.-S., Oh, J., Lee, D.-C., Lee, K., Park, S., Hong, Y., 2025年。使用神经网络对锂离子电池伪二维模型进行正向与逆向模拟。《计算力学与工程方法》438，117856。https://doi.org/10.1016/j.cma.2025.117856 Li, J., Che, Y., Zhang, K., Guo, J., Liu, H., Zhuang, Y., Liu, C., Hu, X., Teodorescu, R., 2025年。基于高斯过程回归置信区间的锂离子电池故障检测与安全风险评估：面向实际应用。《机械系统与信号处理》235，112951。https://doi.org/10.1016/j.ymssp.2025.112951 Li, Y., Karunathilake, D., Vilathgamuwa, D.M., Mishra, Y., Farrell, T.W., Choi, S.S., Zou, C., 2022年。基于物理的锂离子电池管理模型降阶技术：综述。《IEEE工业电子杂志》16，36–51。https://doi.org/10.1109/MIE.2021.3100318 Li, Z., Zheng, H., Kovachki, N., Jin, D., Chen, H., Liu, B., Azizzadenesheli, K., Anandkumar, A., 2024年。用于学习偏微分方程的物理信息神经算子。《ACM / IMS数据科学杂志》1，1–27。https://doi.org/10.1145/3648506 Lu, L., Jin, P., Pang, G., Zhang, Z., Karniadakis, G.E., 2021a。基于算子通用逼近定理，通过DeepONet学习非线性算子。《自然机器智能》3，218–229。https://doi.org/10.1038/s42256-021-00302-5 Lu, L., Pestourie, R., Yao, W., Wang, Z., Verdugo, F., Johnson, S.G., 2021b。采用硬约束的物理信息神经网络进行逆向设计。https://doi.org/10.48550/arXiv.2102.04626 Panahi, A.A., Luder, D., Wu, B., Offer, G., Sauer, D.U., Li, W., 2025年。用于锂离子电池模拟的快速且具备良好泛化能力的参数嵌入神经算子。https://doi.org/10.48550/arXiv.2508.08087 Raissi, M., Perdikaris, P., Karniadakis, G.E., 2019年。物理信息神经网络：用于求解涉及非线性偏微分方程的正向与逆向问题的深度学习框架。《计算物理学杂志》378，686–707。https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045 Sukumar, N., Srivastava, A., 2022年。利用距离函数在物理信息深度神经网络中精确施加边界条件。《计算力学与工程方法》389，114333。https://doi.org/10.1016/j.cma.2021.114333 Wang, S., Sankaran, S., Wang, H., Perdikaris, P., 2023年。训练物理信息神经网络的专家指南。https://doi.org/10.48550/arXiv.2308.08468 Wang, S., Wang, H., Perdikaris, P., 2021a。利用物理信息DeepONet学习参数化偏微分方程的解算子。https://doi.org/10.48550/arXiv.2103.10974 Wang, S., Wang, H., Perdikaris, P., 2021b。关于傅里叶特征网络的特征向量偏差：从回归到利用物理信息神经网络求解多尺度偏微分方程

。《计算力学与工程方法》384，113938。https://doi.org/10.1016/j.cma.2021.113938 Wang, S., Yu, X., Perdikaris, P., 2022年。物理信息神经网络何时以及为何训练失败：神经正切核视角。《计算物理学杂志》449，110768。https://doi.org/10.1016/j.jcp.2021.110768 Zhang, D., Popov, B., White, R., 2000。动电位控制下单个尖晶石颗粒中锂嵌入的建模。《电化学学会志》147，831–838。https://doi.org/10.1149/1.1393279 Zheng, Q., Yin, X., Zhang, D., 2023年。基于深度算子网络推断锂离子电池的电化学性能与参数。《储能杂志》65，107176。https://doi.org/10.1016/j.est.2023.107176

附录A. 第一附录 表 A1 单粒子模型参数

参数	Unit	描述	正极电极	负极电极
L	m	电极厚度	75.6e-6	85.2e-6
R_s	m	颗粒半径	5.22e-6	5.86e-6
ε_s		活性材料体积分数	0.665	0.75
D_s	m^2s^{-1}	扩散系数	4.0e-15	2.0e-14
k	$A m^{2.5}mol^{-1.5}$	反应速率常数	1.0e-5	1.0e-5
$c_{s,max}$	$mol\ m^{-3}$	最大值固相浓度	63104	33133
$c_{e,0}$	$mol\ m^{-3}$	初始值电解质浓度	1000	
A	m^2	电极涂层面积	0.1027	
T	K	温度	298.15	
F	$C\ mol^{-1}$	法拉第常数	96485	
R	$J\ mol^{-1}K^{-1}$	通用气体常数	8.3145	