

附录 B 锂离子电池多物理场模型敏感性分析方法及结果

B.1 响应曲线差异性量化方法

为量化响应曲线 $Y(t)$ 与基线曲线 $Y_b(t)$ 之间的差异性，定义三个差异性指标，分别为位置差异 δ_p 、尺度差异 δ_s 和形状差异 δ_r 。具体计算方法如下：

(1) 位置差异计算：衡量两条曲线在整体上的位置偏移程度，反映了响应变量的整体水平。定义如下：

$$\delta_p[Y(t), Y_b(t)] = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N Y(t) - \frac{1}{N_b} \sum_{t=1}^{N_b} Y_b(t), \quad (\text{B.1})$$

其中， N 和 N_b 分别是第一条和第二条曲线的数据点数。

(2) 尺度差异计算：衡量两条曲线在变量幅度上的差异，反映了响应变量的波动水平。定义如下：

$$\delta_s[Y(t), Y_b(t)] = (\max[Y(t)] - \min[Y(t)]) - (\max[Y_b(t)] - \min[Y_b(t)]). \quad (\text{B.2})$$

(3) 形状差异计算：衡量两条曲线在形状上的差异，反映了响应变量的变化模式。定义为位置和尺度校正后两个曲线的均方根误差（Root Mean Square Error, RMSE）。具体步骤如下：

Step1: 位置校正：

$$Y'(t) = Y(t) - \delta_p[Y(t), Y_b(t)], \quad (\text{B.3})$$

Step2: 尺度校正（包括响应变量取值跨度和时间跨度两个维度的尺度）：

$$Y''(t) = \frac{Y'(t) - \min[Y'(t)]}{\max[Y'(t)] - \min[Y'(t)]} + \min[Y_b(t)], \quad (\text{B.4})$$

$$Y'''(t) = Y''\left(\frac{N_b}{N}t\right), \quad (\text{B.5})$$

Step3: 形状差异计算：

$$\delta_r[Y(t), Y_b(t)] = \sqrt{\frac{1}{N_b} \sum_{t=1}^{N_b} [Y'''(t) - Y_b(t)]^2}, \quad (\text{B.6})$$

其中， δ_r 表示形状差异。

使用 $\delta_p + \delta_s + \delta_r$ 作为评估 $Y(t)$ 和 $Y_b(t)$ 之间差异性的整体指标，其物理含义为：响应曲线 $Y(t)$ 通过平移、缩放和形状调整等变换操作与基线曲线 $Y_b(t)$ 重合所需的最小调整量。

B.2 Sobol 敏感性分析算法

Sobol 敏感性分析通过方差分解, 量化每个参数及其交互项对模型输出的影响。其核心指标一阶效应值 $S1_i$ 、二阶效应值 $S2_{ij}$ 和总效应值 ST 分别通过公式 (B.7)、(B.8) 和 (B.9) 计算:

$$S_i = \frac{\text{Var}[\mathbb{E}(\delta|P_i)]}{\text{Var}(\delta)}, \quad (\text{B.7})$$

$$S_{ij} = \frac{\text{Var}[\mathbb{E}(\delta|P_i, P_j)] - \text{Var}[\mathbb{E}(\delta|P_i)] - \text{Var}[\mathbb{E}(\delta|P_j)]}{\text{Var}(\delta)}, \quad (\text{B.8})$$

$$S_T = 1 - \frac{\text{Var}[\mathbb{E}(\delta|P_{\sim i})]}{\text{Var}(\delta)}. \quad (\text{B.9})$$

其中, $\mathbb{E}(\delta|P_i)$ 是固定参数 P_i 时模型输出差异 δ 的条件期望, $\text{Var}(\delta)$ 为模型输出差异的总方差; $P_{\sim i}$ 表示除 P_i 之外的所有参数。

Sobol 敏感性分析具体算法如算法 3 所示。

算法 3: Sobol 敏感性分析算法

Input: 参数空间 Θ , 参数样本数量 N , 模型 M , 基线曲线 $Y_b(t)$

Output: 各参数的影响程度

Step 1: 参数采样

使用 Sobol 序列从参数空间 Θ 中生成 N 组参数样本 $\{\theta_i\}_{i=1}^N$ 。

Step 2: 仿真计算

foreach $\theta_i \in \{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_N\}$ **do**
 | 运行模型 M , 计算输出 $Y_i(t)$;
end

Step 3: 量化差异

foreach $Y_i(t)$ **do**
 | 根据公式 (B.1) 计算位置差异 δ_p ;
 | 根据公式 (B.2) 计算尺度差异 δ_s ;
 | 根据公式 (B.6) 计算形状差异 δ_r ;
 | 计算总差异 $\Delta_i = \delta_p + \delta_s + \delta_r$;
end

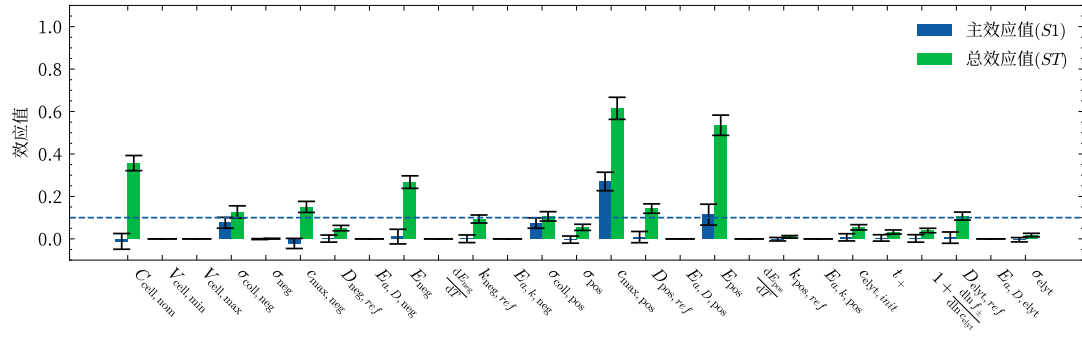
Step 4: 估算方差

计算总差异 $\{\Delta_i\}$ 的方差 $\text{Var}[\Delta]$;
 通过条件期望估算各参数对方差 $\text{Var}[\Delta]$ 的贡献。

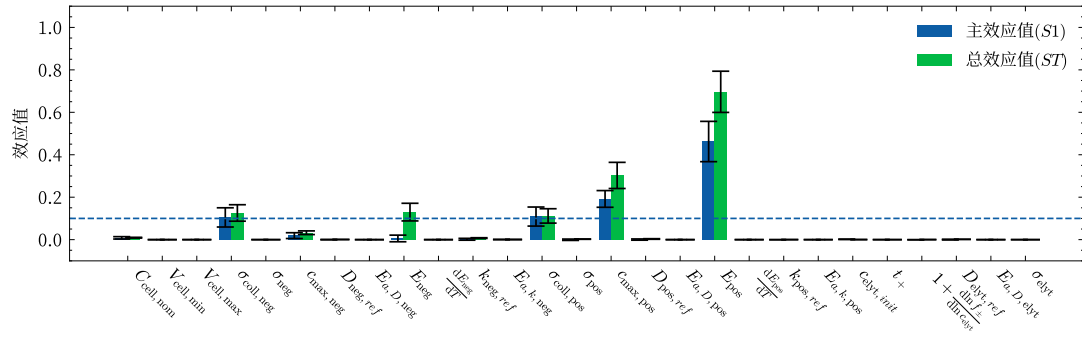
Step 5: 计算效应值

根据公式 (B.7)、(B.8) 和 (B.9), 计算一阶、二阶和总效应值 $S1_i$ 、 $S2_{ij}$ 和 ST_i 。
return 各参数的效应值($S1_i, S2_{ij}, ST_i$)

B.3 电化学参数组的敏感性分析结果

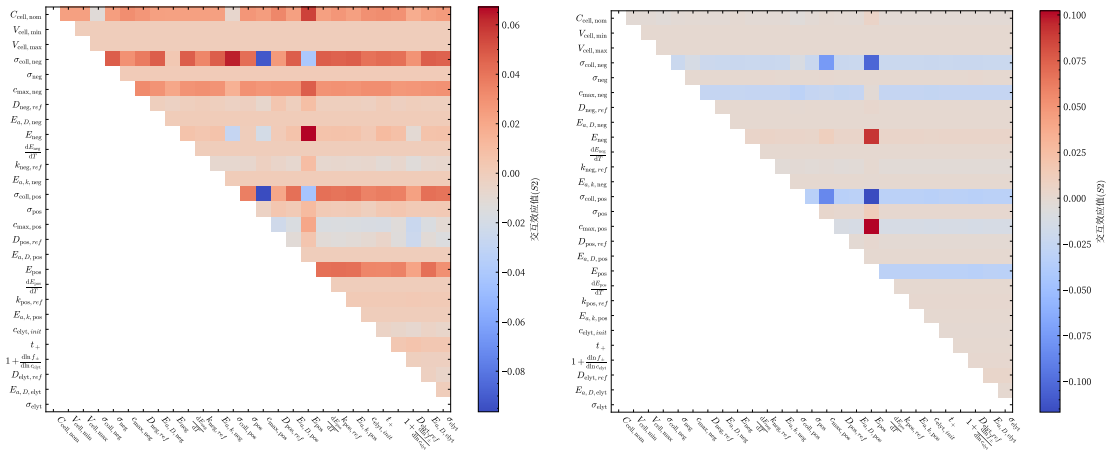


(a) 标准充放电工况



(b) 高倍率脉冲工况

图 B.1 电化学参数组的敏感性分析结果 (S1 和 ST)

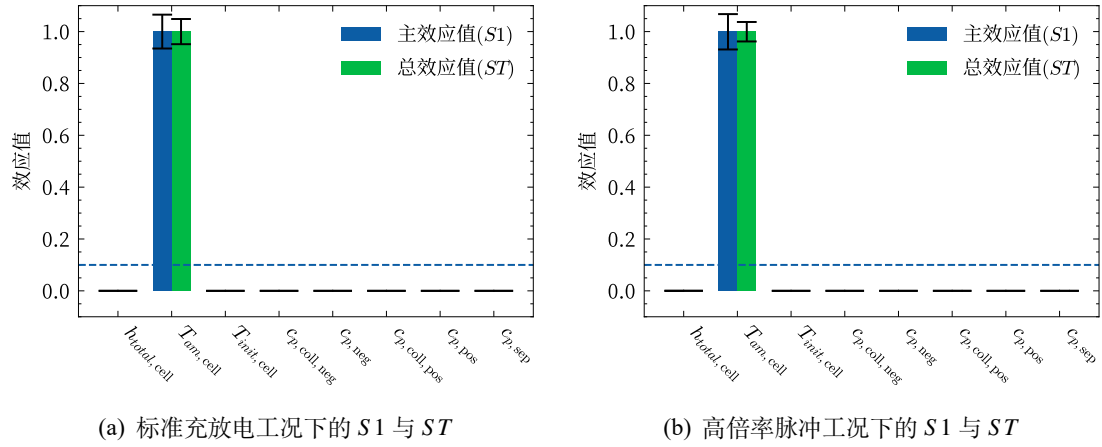
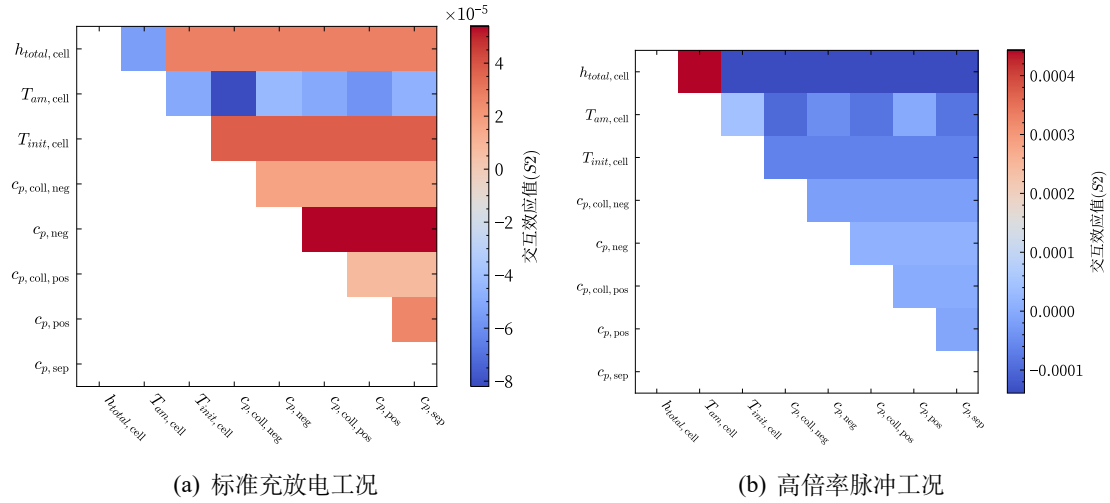


(a) 标准充放电工况

(b) 高倍率脉冲工况

图 B.2 电化学参数组的敏感性分析结果 (S2)

B.4 热学参数组的敏感性分析结果

图 B.3 热学参数组的敏感性分析结果 ($S1$ 和 ST)图 B.4 热学参数组的敏感性分析结果 ($S2$)