

基于改进的 VAE-GAN 模型在电池 EIS 数据增强中的应用

常伟, 胡志超, 潘多昭, 师继文

(南通乐创新能源有限公司, 上海 201102)

摘要: 电化学阻抗谱(electrochemical impedance spectroscopy, EIS)是一种用于表征电池内部电化学过程的测试方法。电化学阻抗谱数据可以用于分析、评估和优化电池性能。测试 EIS 数据需要使用专业的仪器设备,成本较高,测试数据的数量往往不多,可以使用数据增强方法来增加 EIS 数据的数量。变分自编码器(variational autoencoder, VAE)是一种生成模型,可以通过对潜在分布中的采样来生成新的样本。生成对抗网络(generative adversarial networks, GAN)也是一种生成模型,其原理是通过两个相互对抗的网络模型来实现生成数据和判别数据的任务。VAE 模型和 GAN 模型都可以单独用于数据增强,但是 VAE 和 GAN 模型都存在一些缺点,通过组合 VAE 和 GAN 的方法,构建 VAE-GAN 模型,一定程度上弥补各自的缺点,达到更好的生成效果和性能。对 VAE-GAN 模型的网络结构进行优化,将 Transformer(转换器)模型用于 VAE 模型的编码器和解码器以及 GAN 模型的判别器中,提升了模型效果。使用改进的 VAE-GAN 模型,将 EIS 数据作为输入数据,构建 EIS 的预测模型,由生成器来生成 EIS 增强数据,由判别器来判断新生成的 EIS 数据是否是有效的增强数据。实验表明,提出的方法能够生成质量较好的 EIS 数据。

关键词: 变分自编码; 对抗生成网络; VAE; GAN; VAE-GAN; Transformer; EIS

中图分类号: TM912.9 **文献标志码:** A **文章编号:** 1671-1807(2024)22-0258-06

电化学阻抗谱(electrochemical impedance spectroscopy, EIS)是一种用于表征电池内部电化学过程的测试方法。电池的阻抗谱 EIS 数据,由实部阻抗和虚部阻抗组成。通过测量不同频率下的电池阻抗,可以获取关于电池内部特性的信息。

使用电池阻抗谱数据的常见应用主要有电池状态评估、故障诊断、电池设计和优化材料研究等。例如,可以使用电池 EIS 数据来对电池剩余使用寿命和健康度进行预测^[1-2]。总之,电池阻抗谱数据对于电池的分析、评估和优化都具有重要的作用^[3-6]。然而,测试 EIS 数据需要使用专业的仪器设备,成本较高,测试数据的数量往往不多,甚至偏少,因此可以使用数据增强方法来增加 EIS 数据的数量,为使用 EIS 数据做训练的模型提供更多数据,增强模型的泛化能力和鲁棒性。

变分自编码器(variational autoencoder, VAE)是一种生成模型,由编码器(encoder)和解码器(De-

coder)组成,它可以学习训练数据的潜在分布,可以通过对潜在分布中的采样来生成新的样本,同时保留原始数据的特征。

生成对抗网络(generative adversarial networks, GAN)是一种生成模型,由生成器(generator)和判别器(discriminator)组成,其原理是通过两个相互对抗的网络模型来实现生成和判别任务。

VAE 模型和 GAN 模型都可以用于数据增强,通过生成大量的合成样本,扩充训练数据数量,提高模型的泛化能力。但是 VAE 和 GAN 模型都存在一些缺点,这使得 VAE 和 GAN 在生成模型的应用中仍然具有一定的挑战性。不过,通过组合 VAE 和 GAN 的方法,即构建 VAE-GAN 模型,可以在一定程度上弥补各自的缺点,达到更好地生成效果和性能。诸多研究表明 VAE-GAN 模型在不同领域、不同数据、不同应用上具备较好的效果^[5-9]。

传统的 VAE-GAN 模型中,VAE 模型中的编

收稿日期: 2024-06-05

作者简介: 常伟(1976—),男,湖南长沙人,硕士,研究方向为电池工业;胡志超(1984—),男,湖北黄梅人,硕士,高级工程师,研究方向为电池热失控、EIS/SOH 估计;潘多昭(1991—),男,壮族,新疆阿勒泰人,硕士,高级工程师,研究方向为储能与能源工程、AI 算法、智慧能源;师继文(1990—),男,陕西宝鸡人,硕士,工程师,研究方向为新能源材料。

码器和解码器以及 GAN 模型的判别器一般使用全连接神经网络或者卷积神经网络模型。Transformer(转换器)模型自 2017 年由 Vaswani 等^[7]提出以来,已经在自然语言处理(natural language processing, NLP)和其他领域取得了显著的成功。Transformer 模型相对于全连接神经网络或卷积神经网络而言,具有以下优点:

(1)长距离依赖:Transformer 模型使用了自注意力机制,可以同时考虑输入序列中的所有位置,而不受距离限制。这使得它能够更好地捕捉长距离依赖关系,解决了传统神经网络在处理长序列时的限制。

(2)编码器-解码器结构:Transformer 模型采用了编码器-解码器的结构,可以同时处理源语言和目标语言的序列,广泛应用于机器翻译等任务。这种结构可以更好地捕捉输入和输出序列之间的关联,提高模型的性能。

(3)注意力机制:Transformer 模型中的自注意力机制非常灵活,可以根据输入序列的不同部分来调整注意力的权重。这使得模型可以自动学习到输入序列的重要部分,并更好地建模序列之间的依赖关系。

总的来说,Transformer 模型引入了自注意力机制和编码器-解码器结构,能够处理长序列、更好地捕捉序列之间的依赖关系,因此在很多任务中取得了显著的性能提升。

本文对 VAE-GAN 模型的网络结构进行了优化,将 Transformer 模型应用于 VAE 模型的编码器和解码器,以及 GAN 模型的判别器中,从而提升了模型效果^[8-12]。

本文的创新之处体现在三个方面:

(1)数据增强:使用 VAE-GAN 模型对 EIS 测试数据进行增强,从而增加了 EIS 数据量。这一方法有效地丰富了数据集,提升了模型的泛化能力。

(2)编码器和解码器的优化:在 VAE-GAN 模型中,VAE 模型的编码器和解码器的网络结构采用了 Transformer 结构。Transformer 结构因其强大的表示能力和并行计算能力,使得编码器和解码器能够更高效地学习数据的潜在表示。

(3)判别器的优化:在 VAE-GAN 模型中的 GAN 模型的判别器网络结构使用了 Transformer 结构。通过引入 Transformer,判别器能够更好地捕捉生成数据和真实数据之间的差异,提高了生成数据的质量和判别器的判别能力。

通过这些创新,本文在 EIS 数据增强、模型结构优化以及生成数据质量提升方面,为后续研究和应用提供了新的思路和方法。

1 数据采集

1.1 采集电池 EIS 数据

在选择和校准 EIS 测试设备时,确保精确度至关重要。例如,可以使用电化学分析测试仪来进行 EIS 测试,这样可以保证所获得的测试数据是准确的。EIS 测试通常会在不同的温度和频率下进行,以便收集到电池在不同条件下的阻抗谱。本文中,测试设定的温度分别是 25 °C、35 °C 和 45 °C,而频率为 $10^{-2} \sim 10^5$ Hz,在这个范围内选取了 60 个具体的频率值,这些值可以在表 1 中找到详细信息。

在进行 EIS 测试时,必须注意保持测试条件(包括温度、电池状态等)的一致性,这是为了保证测试结果的准确性和可重复性。在数据采集过程中,对电池进行多次完整的充电和放电循环测试,并记录每个频率点对应的阻抗数据^[13]。

表 1 EIS 频率取值一览

频段	频率				
高频率	20 004.4	12 516.7	9 909.44	7 835.48	6 217.24
	4 905.29	3 070.98	2 430.77	1 923.15	1 522.43
	1 203.84	754.275	596.718	471.963	373.208
中频率	295.472	185.059	146.358	115.778	91.672 1
	72.517 0	45.362 9	35.931 3	28.409 0	22.482 0
	17.796 1	11.144 8	8.817 72	6.975 45	5.517 30
低频率	4.369 41	2.735 47	2.160 54	1.709 52	1.353 52
	1.070 79	0.670 72	0.530 67	0.419 76	0.331 83
	0.262 61	0.164 52	0.130 07	0.103 09	0.081 53
	0.064 43	0.040 42	0.031 92	0.025 28	0.019 99

2 数据增强模型

2.1 VAE 模型

VAE 是一种生成模型,可以学习数据的隐空间分布,并从中随机采样生成新数据。这种随机生成过程可以实现数据的增强。VAE 模型结构如图 1 所示。

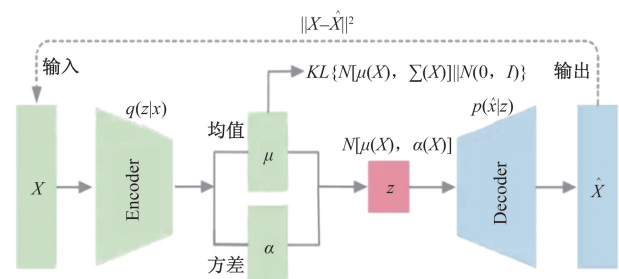


图 1 VAE 模型结构

图1中, x 为输入数据; encoder 为编码器, 编码器将输入数据 x 映射到潜在分布 $q(z|x)$ 中; 然后将潜在分布映射到高斯分布 $N(\mu, \sigma)$ 中, 对高斯分布进行采样, 对采样样本加入服从 $N(0, 0.01)$ 分布的随机扰动, 得到采样样本即潜在向量 z ; decoder 表示解码器, 其将潜在向量 z 还原成 $\hat{x}$, 此时 decoder 中的变量服从分布 $p(\hat{x}|z)$ 。

VAE 通过在潜在分布进行采样, 然后利用解码器将采样的潜在向量转换成新的数据样本。

VAE 模型的缺点包括:

(1) 生成数据质量可能较差: VAE 模型在生成数据时, 可能会产生噪声较大的样本, 这是因为 VAE 在优化过程中, 倾向于平均化潜在空间的采样。

(2) 基于均值和方差: VAE 模型假设潜在空间中的数据服从均值和方差分布, 这种假设可能会导致模型在某些情况下无法准确地捕捉数据分布的复杂性。

(3) 模式塌陷: VAE 模型容易出现“模式塌陷”问题, 即生成器偏向于生成相似的样本, 缺乏多样性和创造力。

2.2 GAN 模型

GAN 模型中的生成器网络(generator)接收一个随机噪声向量作为输入, 并生成伪造的样本数据。生成器的目标是生成逼真的样本, 以欺骗判别器。判别器网络(discriminator)接收真实样本和生成器生成的伪造样本, 并将其分类为真实或伪造(图2)。判别器的目标是能够准确地区分真实样本和伪造样本。

在训练过程中, 生成器和判别器相互对抗、不断优化, 通过反复迭代来提高性能。生成器试图生成更逼真的样本, 以欺骗判别器, 而判别器则努力区分真实样本和伪造样本。

GAN 模型的缺点包括:

(1) 不稳定性: GAN 训练过程中存在不稳定

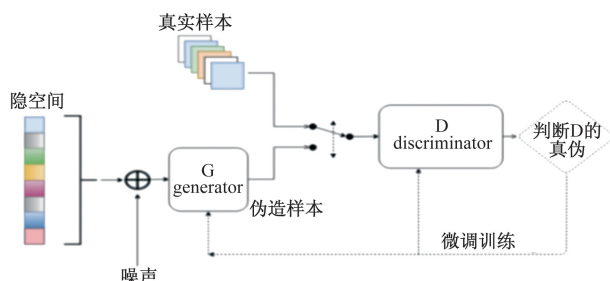


图2 GAN 模型结构

性, 可能导致生成器和判别器之间的失衡, 难以实现理想的生成效果。

(2) 模式崩溃: GAN 在生成过程中容易出现“模式崩溃”, 即生成器仅学习到训练数据中的一部分模式, 并且无法生成其他模式。

(3) 训练难度: GAN 模型的训练比较困难, 需要仔细调整超参数, 同时对初始配置和网络架构非常敏感。

(4) 缺乏数值稳定性: GAN 中的相关概念, 如 Jensen-Shannon 散度或 KL 散度, 在数值上难以估计和优化。

2.3 VAE-GAN 模型

VAE-GAN 模型结构如图3所示。

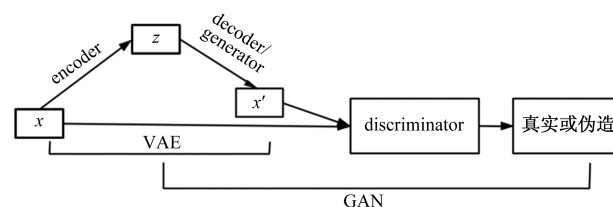


图3 VAE-GAN 模型结构

图3中, x 为输入数据; encoder 为编码器, decoder 为解码器, 同时也是 GAN 模型的生成器(generator), VAE 模型通过编码器-解码器结构生成新的数据 x' ; GAN 模型通过判别器(discriminator)来判断生成数据 x' 是否和原始数据 x 具有相似的结构。

VAE 和 GAN 的组合模型, 即 VAE-GAN 模型, 融合了两个模型的优点, 具有以下优点:

(1) 改善样本质量: VAE-GAN 模型继承了 GAN 的生成能力, 能够生成更逼真和高质量的样本, 相较于传统的 VAE 模型有更好的生成效果。

(2) 学习潜在空间: VAE-GAN 模型将 VAE 的潜在变量纳入 GAN 的生成和判别中, 通过学习潜在空间, 使得模型可以更好地掌握数据的潜在结构和特征。

(3) 可控生成: VAE-GAN 模型通过潜在变量的调节, 可以实现对生成样本的控制和操作, 如进行插值、干扰等, 增强了生成模型的可控性。

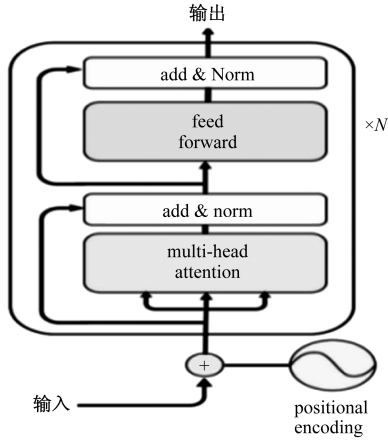
(4) 改善收敛性: VAE-GAN 模型在训练过程中通过 GAN 的对抗性训练, 可以提高模型的收敛性, 减少训练过程中出现的模式塌陷问题。

综上所述, VAE-GAN 模型的组合能够结合 VAE 和 GAN 的优势, 提高生成样本的质量、潜在空间的学习和控制生成等方面的能力。这种组合

模型在生成模型领域得到了广泛应用,为生成模型的发展带来了新的思路和方法。

2.4 Transformer 模型

Transformer 模型结构如图 4 所示。



N 表示有 N 个编码器堆砌而成; $\oplus$ 表示输入数据嵌入编码器与位置编码器的求和计算

图 4 Transformer 模型结构

Transformer 模型主要结构和作用如下:

(1)位置编码(positional encoding):为输入序列提供顺序信息,帮助 attention 学习序列顺序特征。

(2)多头注意力(multi-head attention)机制:该模块用于学习输入序列不同位置之间的相关性,得到输入的特征表示。

(3)前馈全连接网络(feed forward network):该模块对注意力模块输出再进行非线性转换,以学习更复杂的特征表示。

(4)残差连接和 layer norm 层(add & norm):残差连接 add 用来避免深度网络中的梯度消失问题;layer norm 用来正则化模型,加快训练速度,增加模型稳定性。

总之,这些模块协同工作,逐步学习输入的特征表示,支持序列转换任务。位置编码引入位置信息,多头注意力学习全局依赖,全连接网络增强特征,残差和正则化加速和稳定特征学习。

3 EIS 数据增强

3.1 EIS 数据增强模型结构

基于改进 VAE-GAN 模型的 EIS 数据增强模型结构如图 5 所示。

其中,输入部分实部 1~实部 60 表示从高频至低频对应的阻抗数据的实部数据,虚部 1~虚部 60 表示从高频至低频对应的阻抗数据的虚部

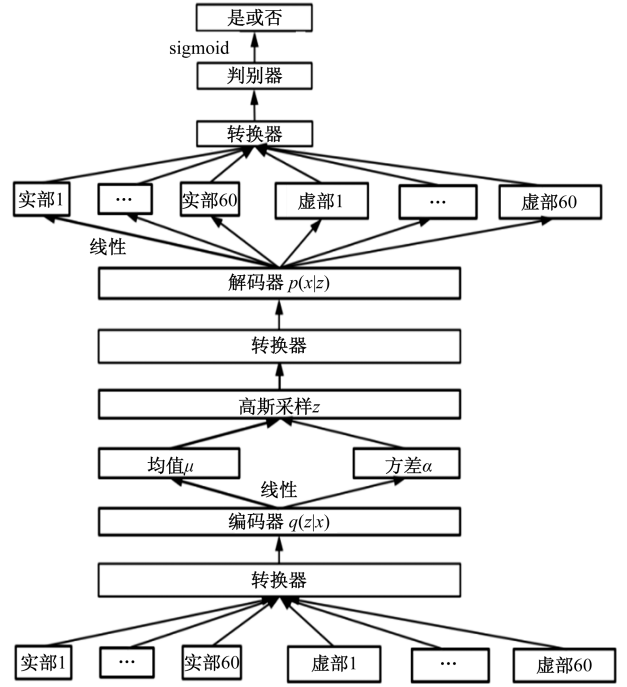


图 5 用于 EIS 数据增强的 VAE-GAN 模型结构

数据;

接下来输入数据连接到一个编码器,通过转换器模型进行连接,编码器将输入数据映射到潜在分布 $q(z|x)$ 中;

然后,将潜在分布映射到高斯分布中,分别连接到均值 μ 和方差 σ 上;

之后,对高斯分布进行采样,加入服从 $N(0, 0.01)$ 的随机扰动,生成采样样本 z ,即潜在变量;

再然后,将采样得到的潜在变量 z 通过 Transformer 模型输入到解码器中;

之后,解码器输出预测的数值,即生成数据;

最后,将生成数据和真实数据作为输入数据,输入到判别器中,训练判别器模型,直到判别器无法区分生成数据和真实数据为止。

3.2 EIS 数据增强流程

基于改进 VAE-GAN 模型的 EIS 数据增强模型流程如图 6 所示。

第一步:测试并采集电池 EIS 数据。使用电化学工作站配置频率扫描测试,在不同频率点测试电池的阻抗值和相位,记录频率响应数据,主要是测试阻抗的实部数据和虚部数据。EIS 配置频率为 $10^{-2} \sim 10^5$ Hz,选取 60 个频率值作为样例。

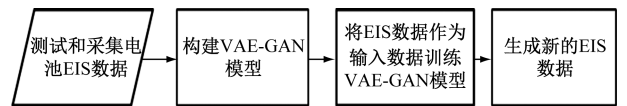


图 6 基于 VAE-GAN 模型的 EIS 数据增强整体流程

第二步:构建 VAE-GAN 模型。根据图 4 中的 VAE-GAN 模型结构,搭建 VAE-GAN 模型。基于 keras 平台进行 VAE-GAN 模型搭建。

VAE 结构包含输入数据和编码器(潜在分布)之间的 Transformer 连接层,输入数据的神经元个数为 120,编码器的神经元个数为 80;编码器分别与高斯分布的均值和方差的全连接层,神经元个数均为 40;对高斯分布进行采样,加入服从 $N(0, 0.01)$ 分布的随机扰动,生成 40 维度的潜在变量。潜在变量和解码器之间的连接层为 Transformer 模型,解码器神经元个数为 80;解码器与输出层之间的全连接层,神经元个数为 120。VAE 模型中的重构误差为均方误差(mean square error, MSE)。VAE 模型的损失函数为均方误差与 KL 散度误差之和。

GAN 模型中的生成器函数就是 VAE 模型的解码器。GAN 模型的判别器采用基于 Transformer 结构的分类模型。将 EIS 数据和 EIS 生成数据,作为判别器的输入,其中 EIS 数据作为正样本,EIS 生成数据作为负样本,用于训练判别器。判别器采用交叉熵函数作为损失函数。采用 1 层 Transformer 结构,参数 d_model 为 80,num_heads 为 10,dff 为 1。d_model 表示特征嵌入(embedding)的维度;num_heads 表示多头注意力机制的头的个数;dff 表示残差连接的步长。

第三步:将 EIS 数据作为输入数据,训练 VAE-GAN 模型。在模型训练的每一次迭代中,要进行以下步骤:①使用 VAE 模型生成 EIS 假数据,将 EIS 真实数据作为正样本,生成的假数据作为负样本,用于判别器的训练;②冻结判别器,使其参数不能更新,训练 VAE 模型中的生成器;③解冻判别器,使其参数可更新,重新从①开始循环。进一步的,以上①~③构成一次模型迭代。模型训练的迭代次数 epoch_number=100。在每次迭代中,步骤①中判别器的训练次数和步骤②中的 VAE 生成器的训练次数均为 epoch=1。

第四步:生成新的 EIS 数据,即获取 EIS 增强数据:使用第三步中训练好的 VAE-GAN 模型,对真实 EIS 数据进行预测,或者对随机生成的向量进行预测,得到生成的 EIS 数据,同时计算判别函数的预测值,如果判别函数的预测值在 0.5 左右,说明模型无法区分真实样本和生成样本,即生成样本可以以假乱真,可以作为增强数据来使用。

4 预测效果展示

本文在公开数据集上测试效果,对其中的阻抗数据进行增强。输入数据共有 120 个特征,特征序号依次是 $f_1 \sim f_{120}$,前 60 个特征是频率从高到低对应的阻抗数据的实部数据,后 60 个特征是频率从高到低对应的阻抗数据的虚部数据。

基于 VAE-GAN 模型对 EIS 数据进行增强。对真实的 EIS 数据进行增强,得到增强数据如表 3 所示。

表 2 电池 EIS 数据集样例(部分)

f_1	f_2	f_3	...	f_{119}	f_{120}
0.384 70	0.391 56	0.396 84	...	0.290 26	0.327 95
0.388 86	0.393 43	0.400 66	...	0.280 64	0.323 00
0.390 38	0.396 00	0.402 50	...	0.287 73	0.329 55
0.391 94	0.396 43	0.404 06	...	0.297 68	0.336 73
0.392 25	0.397 60	0.405 40	...	0.283 96	0.325 62

注: $f_1 \sim f_{120}$ 为 EIS 频率特征。

表 3 电池 EIS 预测电池 SOH 数据集增强数据样例

f_1	f_2	f_3	...	f_{119}	f_{120}
0.520 7	0.306 5	0.528 0	...	0.247 4	0.356 7
0.531 5	0.538 5	0.332 8	...	0.318 8	0.575 9
0.465 4	0.258 4	0.373 5	...	0.186 2	0.269 7
0.530 0	0.594 0	0.414 1	...	0.193 3	0.519 0
0.446 3	0.427 6	0.379 2	...	0.347 9	0.382 2

注: $f_1 \sim f_{120}$ 为 EIS 频率特征。

以上每条数据的 VAE-GAN 模型的判别器的预测值基本在 0.569 左右,都在 0.5 附近,说明效果尚可。另外,还可以通过计算生成数据与原始数据的 cosine 相似度或者欧氏距离来进一步对生成数据进行筛选。

5 结论

本文对 VAE-GAN 模型的网络结构进行优化,将 Transformer 模型用于 VAE 模型的编码器和解码器以及 GAN 模型的判别器中,提升了模型效果。使用了改进的 VAE-GAN 模型,将 EIS 数据作为输入数据,构建 EIS 的预测模型,由生成器来生成增强数据,由判别器来判断新生成的数据是否是有效的增强数据。提供了一种 EIS 数据增强方法,具有一定的实用价值。

参考文献

- [1] 常伟,潘多昭,胡志超.一种基于 VAE 模型数据增强算法的电池 RUL 预测方法:202311608920[P]. 2024-04-19.
- [2] 常伟,潘多昭,胡志超.一种基于 VAE 模型数据增强算

- 法预测电池 SOH 方法: 202311608918[P]. 2024-04-19.
- [3] 常伟, 胡志超, 潘多昭. 基于多模型组合和 EIS 的锂电池 SOH 和 RUL 预测 [J]. 科技和产业, 2024, 24 (2): 192-199.
- [4] 李艳辉, 王衍萌. 基于数据增强技术与 CNN-BiLSTM-Attention 的油田注水流量预测及效果 [J]. 科学技术与工程, 2023, 23 (32): 13896-13902.
- [5] 周雅夫, 王伟东, 董启超. 基于改进多频正弦激励的燃料电池电化学阻抗谱测量 [J]. 科学技术与工程, 2022, 22 (22): 9679-9685.
- [6] 孙佳佳, 李承礼, 常德显, 等. 基于生成对抗网络的入侵检测类别不平衡问题数据增强方法 [J]. 科学技术与工程, 2022, 22 (18): 7965-7971.
- [7] VASWANI A, NOAM S, NIKI P, et al. Attention is all you need [J]. Neural Information Processing System, 2017, 182: 5998-6008.
- [8] 范振杰, 罗娜. 基于改进 VAE 的时间序列数据增强方法 [J]. 华东理工大学学报(自然科学版), 2023, 50 (3): 1-11.
- [9] 张钊光, 蒋庆磊, 詹瑜滨, 等. 基于 VAE-GAN 数据增强算法的小样本滚动轴承故障分类方法 [J]. 原子能科学技术, 2023, 57 (ZK): 228-237.
- [10] 孙辉. 基于生成对抗网络的图像修复研究 [D]. 徐州: 中国矿业大学, 2020.
- [11] 徐晔波, 倪颖杰. 基于 VAEGAN 的缺失数据填补研究 [J]. 信息工程大学学报, 2022, 23 (2): 224-229.
- [12] 范宇飞, 丁博, 何勇军. 基于判别器反馈的零样本图像分类方法 [J]. 哈尔滨理工大学学报, 2023, 28 (1): 46-53.
- [13] ZHANG Y, TANG Q, ZHANG Y, et al. Identifying degradation patterns of lithium ion batteries from impedance spectroscopy using machine learning [J]. Nat Commun, 2020, 11: 1706.

Application of Improved VAE-GAN Model in Battery EIS Data Enhanced Applications

CHANG Wei, HU Zhichao, PAN Duozhao, SHI Jiwen

(Nantong Le Chuang New Energy Co. Ltd., Shanghai 201102, China)

Abstract: Electrochemical Impedance Spectroscopy (EIS) is a testing method used to characterize the internal electrochemical processes of batteries. Electrochemical impedance spectroscopy data can be used to analyze, evaluate, and optimize battery performance. Testing EIS data requires the use of professional instruments and equipment, which is costly. The amount of test data is often limited, and data augmentation methods can be used to increase the amount of EIS data. Variational Autoencoder (VAE) is a generative model that can generate new samples by sampling from potential distributions. Generative Adversarial Networks (GANs) are also a type of generative model, whose principle is to achieve the task of generating and discriminating data through two opposing network models. Both VAE and GAN models can be used separately for data augmentation, but both have some drawbacks. By combining VAE and GAN methods to construct VAE-GAN models, some shortcomings can be compensated and achieve better generation results and performance. In traditional VAE-GAN models, the encoder and decoder in the VAE model, as well as the discriminator in the GAN model, generally use fully connected neural networks or convolutional neural network models. The network structure of the VAE-GAN model was optimized by using the Transformer model in the encoder and decoder of the VAE model, as well as in the discriminator of the GAN model, which improved the model performance. Improved VAE-GAN model was used to construct a prediction model for EIS using EIS data as input. The generator generates EIS enhancement data, and the discriminator determines whether the newly generated EIS data is effective enhancement data. Experiments have shown that the method proposed in this article can generate high-quality EIS data.

Keywords: variational autocoding; adversarial generative network; VAE; GAN; VAE-GAN; transformer; EIS