

Safety Assessment of Aged Lithium-Ion Batteries During Thermal Runaway Using a Long Short-Term Memory Recurrent Neural Network Architecture

Ahmad Hajatzadeh Pordanjani¹, Alireza Daneh-Dezfuli^{2*}, Farshad Torabi³

¹ Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran, Ahmad.haj.p@gmail.com

² Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran, A.danehdezfuli@scu.ac.ir

³ Department of Mechanical Engineering/Energy System, K. N. Toosi University of Technology, Tehran, Iran, ftorabi@kntu.ac.ir

Keywords:

thermal runaway, aged lithium-ion battery, LSTM neural network, multiphysics modeling, temperature prediction, thermal management, warly warning

Abstract: Thermal runaway is one of the most critical safety challenges associated with aged lithium-ion batteries, and its accurate prediction plays an essential role in developing advanced battery management and early-warning systems. In this study, an integrated framework combining multiphysics modeling with a long short-term memory (LSTM) neural network was developed to predict the thermal runaway temperature of an aged 14500 lithium-ion cell. The physics-based model accounted for the simultaneous effects of calendar aging, solid–electrolyte interphase (SEI) growth, metallic lithium plating, furnace temperature, and the convective heat transfer coefficient. The results demonstrated that increasing the furnace temperature from 418 to 458 K increased the maximum cell temperature from 422.12 to 587.87 K, while reducing the time required to reach the maximum temperature from 2316 to 942 s. Furthermore, increasing the convective heat transfer coefficient reduced the intensity of exothermic reactions and improved the thermal stability of the cell. The LSTM model exhibited excellent performance in predicting the time-dependent temperature history, achieving minimum mean absolute error (MAE) and root mean square error (RMSE) values of 0.0001 and 0.0008, respectively, as well as maximum coefficient of determination (R2) and Nash–Sutcliffe efficiency (NSE) values of 0.9990. These findings demonstrate that the proposed framework provides a reliable tool for the real-time prediction of thermal runaway and the development of intelligent battery management systems

Original Research Article

Paper History:

Received: 2026/07/24

Revise: 2026/09/07

Accepted: 2026/09/07

How to cite this article: A, Hajatzadeh. A, Daneh- Dezfuli. F, Torabi. "Safety Assessment of Aged Lithium-Ion Batteries During Thermal Runaway Using a Long Short-Term Memory Recurrent Neural Network Architecture"

"Energy Engineering and Management, Vol. 15, No. 4, PP. 79- 98, 2026. <https://doi.org/10.22052/EEM.2026.259322.1191>
© 2023 University of Kashan Press.

This is an open access article under the CC BY license.(<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>)



Extended Abstract

Introduction

Safety remains the primary barrier to the widespread deployment of lithium-ion batteries (LIBs) in electric vehicles, aerospace systems, and renewable energy storage applications [1–3]. Although LIBs have become the dominant electrochemical energy storage technology because of their high energy density, long cycle life, and excellent efficiency, the continuous pursuit of higher-capacity cells and increasingly compact battery pack designs has significantly reduced their thermal safety margin. Among all failure modes, thermal runaway (TR) represents the most catastrophic event. It is a self-accelerating process initiated by a sequence of exothermic reactions, electrolyte decomposition, oxygen release from cathode materials, and rapid gas generation, which can ultimately lead to venting, fire, explosion, and thermal propagation to neighboring cells [4–6]. Previous studies have demonstrated that the surrounding thermal environment, particularly convective and radiative heat dissipation, plays a decisive role in determining both the onset and propagation characteristics of thermal runaway within battery modules and packs [4]. The evolution of thermal runaway is governed by multiple interacting factors, including cell geometry, material chemistry, electrochemical state, and operating conditions. Three-dimensional numerical investigations have shown that cell dimensions and internal structural configurations strongly influence temperature distribution, heat accumulation, and thermal propagation pathways [7]. Likewise, experimental studies have reported that higher states of charge significantly increase the peak temperature, flame intensity, and total energy released during thermal runaway events [8]. Cathode chemistry also plays a critical role in thermal stability. Nickel-rich cathode materials exhibit lower thermal stability, initiating thermal runaway at lower temperatures while releasing substantially greater thermal

energy than conventional chemistries [9]. Furthermore, electrolyte composition and solvent formulation directly affect decomposition kinetics, gas evolution, and the onset of thermal instability, highlighting the importance of material selection in battery safety design [10]. Another critical aspect of thermal runaway is the violent release of high-temperature gases and solid particles. Internal pressure accumulation has been identified as the primary driving force behind particle ejection, while vent-opening pressure and gas composition largely determine flame characteristics and explosion risk [11–13]. Beyond the immediate fire hazard, thermal runaway also generates toxic emissions containing fluorinated and phosphorus-containing compounds, posing significant environmental and health concerns [14]. Battery aging further complicates thermal runaway behavior. Electrochemical degradation mechanisms, including solid electrolyte interphase (SEI) growth, lithium plating, and increased internal resistance, progressively alter the thermal stability of lithium-ion cells [15,16]. However, the influence of aging is not simply proportional to capacity loss. Previous investigations have demonstrated that cells with similar state-of-health (SOH) values but different aging histories may exhibit substantially different thermal runaway characteristics [17,18]. Moreover, low-temperature aging has been shown to reduce the onset temperature of thermal instability while simultaneously limiting the severity of the final reaction [19]. Aging also modifies both the quantity and composition of vented gases, making accurate prediction of thermal runaway behavior in degraded batteries considerably more challenging [20, 21]. Despite significant advances in understanding the mechanisms of thermal runaway, conventional battery management systems (BMSs) still rely primarily on macroscopic parameters such as Voltage, current, and average temperature. These measurements often fail to capture the early physical signatures preceding thermal instability,

limiting their effectiveness in early warning applications [6]. At the same time, physics-based thermal runaway models require detailed material properties, complex multiphysics formulations, and high computational cost, making them unsuitable for real-time implementation. Consequently, data-driven approaches based on machine learning and deep learning have emerged as promising alternatives for capturing the highly nonlinear thermal behavior of lithium-ion batteries. Among these methods, Long Short-Term Memory (LSTM) neural networks have demonstrated exceptional capability in learning temporal dependencies from sequential thermal data and accurately predicting future system behavior. Recent studies have also highlighted the potential of hybrid deep learning architectures for hotspot prediction and battery safety monitoring [22]. Nevertheless, a significant research gap remains in accurately predicting the thermal runaway temperature of aged 14500 lithium-ion cells while simultaneously considering the coupled influence of environmental operating conditions. Most existing studies focus either on fresh batteries or on isolated operating parameters, with limited attention given to the combined effects of battery degradation and external thermal boundary conditions. Addressing this gap, the present study develops an LSTM-based predictive framework for estimating the thermal runaway temperature of aged 14500 lithium-ion batteries under varying operating conditions. Particular emphasis is placed on evaluating the sensitivity of the critical temperature to two key environmental parameters: the ambient convective heat transfer coefficient and oven temperature. By learning temporal thermal patterns under different aging conditions, the proposed model provides accurate prediction of thermal runaway evolution and offers a computationally efficient tool for early warning and intelligent battery safety management. Integrating degradation-aware thermal analysis with deep learning, this work establishes a practical framework for enhancing the safety and reliability of next-

generation lithium-ion battery systems operating under realistic environmental conditions.

Materials and Methods

A multiphysics numerical framework was developed to investigate the thermal runaway behavior of aged 14500 lithium-ion batteries by coupling heat transfer with degradation-induced reaction kinetics. The cylindrical cell was represented using a two-dimensional axisymmetric model to accurately capture radial and axial heat transport while reducing computational cost. Transient heat conduction was coupled with multiple exothermic reactions, including SEI decomposition, negative electrode decomposition, lithium plating–electrolyte reactions, positive electrode decomposition, and electrolyte decomposition. Heat exchange between the cell and the surrounding environment was modeled through combined convective and radiative boundary conditions. Calendar and cyclic aging effects were incorporated by introducing state-of-health (SOH)-dependent lithium plating and SEI growth into the kinetic model, enabling direct representation of degradation-induced changes in heat generation. The governing equations were solved in COMSOL Multiphysics using an implicit backward differentiation formula (BDF) solver with adaptive time stepping. The numerical model was validated against published experimental thermal runaway data, and mesh independence and time-step sensitivity analyses were performed to ensure numerical convergence and solution accuracy. The temperature histories generated from the validated numerical model were subsequently used to develop a data-driven prediction framework based on a Long Short-Term Memory (LSTM) neural network. Thermal time-series data were preprocessed using a sliding-window strategy and standardized before training. To improve learning stability and preserve short-term thermal dynamics, the LSTM architecture was enhanced with a residual

connection that directly transferred the latest observed temperature to the output layer. The model was trained to predict the next-step thermal runaway temperature under different aging conditions and thermal boundary conditions. Prediction accuracy was evaluated using four statistical metrics: Mean Absolute Error (MAE), Root Mean Square Error (RMSE), the coefficient of determination (R^2), and the Nash–Sutcliffe Efficiency (NSE). This integrated physics-informed and deep learning framework provides an efficient and reliable approach for predicting thermal runaway eVolution in aged lithium-ion batteries under varying environmental conditions.

Results

The multiphysics simulations demonstrated that oven temperature and the convective heat transfer coefficient were the dominant parameters governing the thermal runaway behavior of aged 14500 lithium-ion cells. Increasing the oven temperature from 418 K to 458 K raised the peak cell temperature from 422.12 K to 587.87 K (39%) while reducing the time to reach the maximum temperature from 2316 s to 942 s (59%), indicating a significant acceleration of thermal runaway. Kinetic analysis revealed that elevated ambient temperatures promote the simultaneous activation of multiple exothermic reactions, resulting in rapid energy release and intensified thermal instability. Variations in the convective heat transfer coefficient primarily influenced the onset time of thermal runaway, heating rate, and heat generation profile, highlighting the importance of external thermal boundary conditions in controlling battery safety. The developed LSTM model accurately reproduced the temporal eVolution of cell

temperature under all investigated scenarios, achieving MAE and RMSE values as low as 0.0001 and 0.0008, respectively, with R^2 and NSE consistently exceeding 0.95 and reaching 0.9990. The close agreement between predicted and reference temperature profiles, together with the narrow error distribution around zero, confirms the model's capability to capture the highly nonlinear dynamics of thermal runaway.

Discussion and Conclusion

This study presents an integrated physics-informed and deep learning framework for analyzing and predicting thermal runaway in aged 14500 lithium-ion batteries. The results demonstrate that ambient thermal conditions strongly influence both the initiation and progression of thermal runaway, with oven temperature governing reaction kinetics and peak thermal severity, while convective cooling primarily controls the timing of thermal instability. These findings emphasize that effective thermal management and optimization of environmental boundary conditions are essential for mitigating thermal runaway risks in aged batteries. Furthermore, the proposed LSTM model provides highly accurate real-time prediction of thermal behavior, successfully learning the complex temporal characteristics associated with degradation-induced thermal runaway. The combination of validated multiphysics simulations with data-driven prediction offers a reliable and computationally efficient framework for battery safety assessment, enabling early-warning systems, intelligent battery management, and the development of safer next-generation lithium-ion energy storage technologies.

ایمنی باتری لیتیوم یون فرسوده حین فرار حرارتی با استفاده از روش معماری شبکه عصبی بازگشتی حافظه طولانی - کوتاه مدت

احمد حاجت زاده پردنجانی^۱، علیرضا دنه دزفولی^{۲*}، فرشاد ترابی^۳

^۱ دانشجوی دکتری، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده مهندسی، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران،

Ahmad.haj.p@gmail.com

^۲ دانشیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده مهندسی، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران،

A.danehdezfuli@scu.ac.ir

^۳ دانشیار، گروه مهندسی مکانیک/سیستم های انرژی، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران، ایران،

ftorabi@kntu.ac.ir

واژه های کلیدی:

فرار حرارتی، باتری لیتیوم یون فرسوده، شبکه عصبی حافظه بلند- کوتاه مدت، مدل سازی چندفیزیکی، پیش بینی دما، مدیریت حرارتی، هشدار زود هنگام.

مقاله علمی پژوهشی

تاریخ دریافت: ۱۴۰۵/۰۵/۰۲

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۵/۰۶/۱۶

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۵/۰۶/۱۶

چکیده: فرار حرارتی یکی از مهم ترین چالش های ایمنی باتری های لیتیوم یون فرسوده است و پیش بینی دقیق آن نقش مهمی در توسعه سامانه های مدیریت باتری و هشدار زود هنگام دارد. در این پژوهش، یک چارچوب یکپارچه مبتنی بر مدل سازی چندفیزیکی و شبکه عصبی حافظه بلند-کوتاه مدت برای پیش بینی دمای فرار حرارتی باتری لیتیوم یون ۱۴۵۰۰ توسعه داده شد. مدل فیزیکی با در نظر گرفتن اثر هم زمان پیری تقویمی، رشد لایه فصل مشترک الکترولیتی جامد، رسوب لیتیوم فلزی، دمای کوره و ضریب انتقال حرارت جابه جایی ایجاد شد. نتایج نشان داد که افزایش دمای کوره از ۴۱۸ به ۴۵۸ کلوین، دمای بیشینه سلول را از ۴۲۲/۱۲ به ۵۸۷/۸۷ کلوین افزایش داده و زمان رسیدن به دمای بیشینه را از ۲۳۱۶ به ۹۴۲ ثانیه کاهش می دهد. همچنین، افزایش ضریب انتقال حرارت جابه جایی موجب کاهش شدت واکنش های گرمازا و بهبود پایداری حرارتی سلول شد. مدل شبکه عصبی حافظه بلند کوتاه مدت عملکرد بسیار مطلوبی در پیش بینی تاریخچه زمانی دما از خود نشان داد؛ به طوری که کمترین مقادیر MAE و RMSE به ترتیب ۰/۰۰۰۱ و ۰/۰۰۰۸، و بیشترین مقدار R^2 و NSE برابر با ۰/۹۹۹۰ به دست آمد. نتایج این پژوهش نشان می دهد که چارچوب پیشنهادی ابزاری قابل اعتماد برای پیش بینی فرار حرارتی و توسعه سامانه های هوشمند مدیریت باتری است.

۱. مقدمه

ایمنی، همچنان اصلی‌ترین چالش محدودکننده در به‌کارگیری گسترده و مطمئن باتری‌های لیتیوم‌یون در حمل‌ونقل الکتریکی، سامانه‌های هوافضا و زیرساخت‌های انرژی تجدیدپذیر به‌شمار می‌رود [۱، ۲]. با وجود چگالی انرژی بالا و بازدهی مناسب، پارادایم کنونی که بر استفاده از سلول‌های با ظرفیت بالا و طراحی‌های فشرده استوار است، مرزهای ایمنی حرارتی را به‌شدت محدود کرده است. در این میان، پدیده «فرار حرارتی» فاجعه‌بارترین حالت شکست محسوب می‌شود؛ فرآیندی که با یک حلقه بازخورد مثبت و خودشتاب‌دهنده از واکنش‌های شیمیایی گرمای آزادسازی اکسیژن از شبکه کریستالی و تولید گاز همراه است [۳، ۴]. پیامد این رخداد می‌تواند از خروج گاز و شعله‌وری تا انفجار و گسترش حرارتی به سلول‌های مجاور متغیر باشد. چنان‌که لای و همکاران [۳] نشان داده‌اند، شرایط محیطی پیرامون باتری و نحوه دفع حرارت از طریق جابه‌جایی و تابش، نقش تعیین‌کننده‌ای در تعیین سرعت و دامنه انتشار این پدیده در مجموعه‌های چندسلولی ایفا می‌کند. تحقیقات در سطح تک‌سلول نشان می‌دهد که تکامل فرار حرارتی به‌شدت به پیکربندی ساختاری، شیمی مواد و شرایط مرزی عملیاتی وابسته است. برای نمونه، مدل‌سازی‌های سه‌بعدی صورت‌گرفته توسط وانگ و همکاران [۵] بر روی سلول‌های با فرمت بزرگ، اثبات کرد که هندسه داخلی و ضخامت سلول، یکنواختی توزیع دما و مقاومت در برابر انتشار حرارت را دیکته می‌کنند. همچنین، وانگ و همکاران [۶] در مطالعات تجربی خود اشاره کردند که وضعیت شارژ بالا، دمای بیشینه و دینامیک شعله‌های خروجی را تشدید می‌کند. نقش شیمی کاتد نیز بسیار حیاتی است؛ به‌طوری‌که وانگ و همکاران [۷] گزارش کردند سلول‌های غنی از نیکل در دماهای پایین‌تری دچار ناپایداری شده و انرژی بسیار بالاتری را از طریق گازهای خروجی آزاد می‌کنند. علاوه بر این، یانگ و همکاران [۸] نشان دادند که فرمولاسیون الکترولیت و نوع حلال‌ها مستقیماً بر سینتیک تجزیه حرارتی و زمان آغاز خروج گاز اثر می‌گذارد. یکی از جنبه‌های کلیدی فرار حرارتی، خروج پرفشار گازها و ذرات است که خطر آتش‌سوزی را دوجندان می‌کند. کین و همکاران [۹] شناسایی کردند که انباشت فشار داخلی، محرک اصلی سرعت پرتاب ذرات است، درحالی‌که ترکیب گازهای خروجی و فشار پارگی دریاچه ایمنی، سرعت شعله و احتمال انفجار را کنترل می‌کنند [۱۰، ۱۱]. این پدیده نه‌تنها خطرات فیزیکی، بلکه به‌دلیل

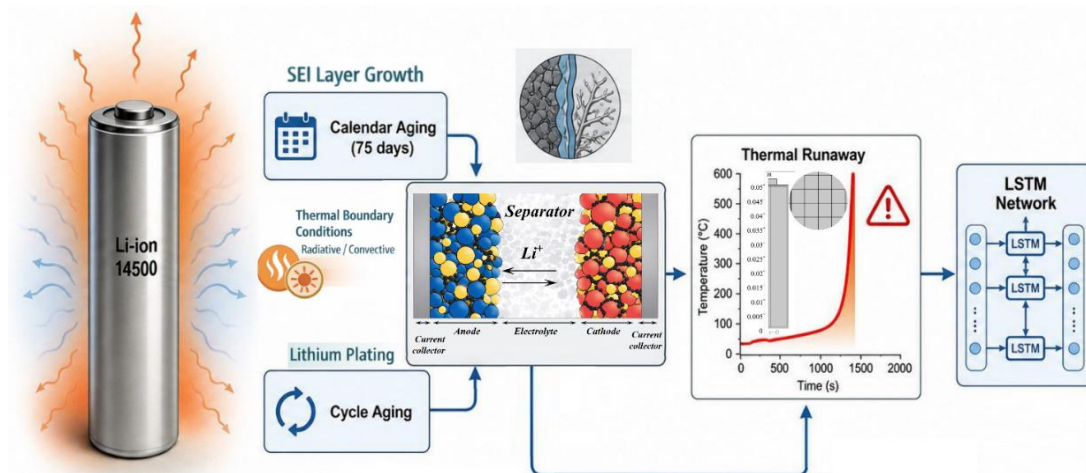
تولید دوده و ذرات سمی حاوی فلئوئور و فسفر، خطرات زیست‌محیطی شدیدی نیز به‌همراه دارد [۱۲]. علاوه بر متغیرهای طراحی، فرآیندهای پیری الکتروشیمیایی و ساختاری از محرک‌های اصلی تغییر رفتار باتری در شرایط فرار حرارتی هستند. پژوهش‌های یوان و همکاران [۱۳] و لیو و همکاران [۱۴] نشان داد که در باتری‌های فرسوده، واکنش بین لیتیوم فلزی رسوب‌کرده و الکترولیت، منبع اصلی تولید گرمای شدید است. باین‌حال، اثر پیری بر پایداری حرارتی همیشه خطی نیست؛ ژانگ و همکاران [۱۵] و سان و همکاران [۱۶] در مطالعات تطبیقی خود دریافتند که تاریخچه پیری (حتی در سطح سلامت مشابه) به‌طور بنیادین ویژگی‌های فرار حرارتی را تغییر می‌دهد. همچنین، ژانگ و همکاران [۱۷] مشاهده کردند که پیری در دمای پایین، دمای آغاز ناپایداری حرارتی را جلو می‌اندازد، اما شدت واکنش نهایی را محدود می‌کند. با توجه به اینکه پیری بر حجم و ترکیب گازهای تولیدی نیز اثرگذار است [۱۸]، پیش‌بینی رفتار سلول‌های فرسوده پیچیدگی‌های مضاعفی دارد. در این پژوهش، تمرکز بر باتری‌های لیتیوم‌یون فرسوده سایز ۱۴۵۰۰ است که به‌عنوان جایگزینی برای باتری‌های آلکالین در کاربردهای خاص پیشنهاد شده‌اند. علیرغم پیشرفت‌های گسترده در درک سینتیک فرار حرارتی، روش‌های سنتی مدیریت باتری به‌دلیل اتکا به پارامترهای کلان مانند ولتاژ، در شناسایی پیش‌نشانگرهای فیزیکی ناتوان هستند [۴]. برای غلبه بر محدودیت‌های مدل‌سازی فیزیکی محض و مدل‌های جعبه‌سیاه، استفاده از رویکردهای یادگیری عمیق ضرورت یافته است. در این راستا، گوسوامی و همکاران [۱۹] استفاده از شبکه‌های عصبی ترکیبی را برای پیش‌بینی نقاط داغ پیشنهاد کردند. از طرف دیگر تیان و همکاران [۲۰] با استفاده از یک مدل یادگیری عمیق مبتنی بر شبکه عصبی، مقدار لیتیوم فلزی تشکیل‌شده در اطراف آند باتری‌های تجاری لیتیوم‌یون ۱۸۶۵۰ را برآورد کردند. آزمایش‌ها تحت سیکل‌های مختلف شارژ و دشارژ و با سه سلول، به‌منظور بررسی تکرارپذیری و کاهش اثر ناهمبستگی سلول‌ها، انجام شد. هونگ و همکاران [۲۱] با بهره‌گیری از پلتفرم کلان‌داده و روش آنروپی، طرحی برای پیش‌بینی فرار حرارتی در سامانه‌های باتری خودروهای الکتریکی ارائه کردند. ووک کیم و همکاران [۲۲] برای مدل‌سازی و پیش‌بینی فرار حرارتی باتری لیتیوم‌یون از یک شبکه عصبی چندفیزیکی استفاده کردند. نظری و همکاران [۲۳] رویکردهای مبتنی بر فیزیک و یادگیری ماشین را برای پیش‌بینی رفتار حرارتی

الکترولیتی جامد در سطح آند می شود؛ درحالی که هم زمان، بخشی از لیتیوم فعال نیز به صورت لیتیوم فلزی رسوب کرده بر روی آند ظاهر می گردد. این دو پدیده، با کاهش ظرفیت مؤثر باتری به میزان حدود ۱۰ درصد، ساختار الکتروشیمیایی سلول را دگرگون کرده و زمینه را برای تغییر در رفتار گرمایی و کاهش پایداری حرارتی فراهم می سازند. از دیدگاه فیزیکی، افزایش ضخامت لایه فصل مشترک الکترولیتی جامد موجب محدود شدن انتقال یون ها، افزایش مقاومت داخلی و تغییر در نرخ واکنش های مرزی می شود. در مقابل، حضور لیتیوم فلزی رسوب کرده بر سطح آند، یک مسیر گرمای اضافی در سامانه ایجاد می کند که می تواند در دماهای میانی، خود گرمایی سلول را تشدید کرده و آغاز فرار حرارتی را تسریع کند؛ بنابراین، دمای وقوع فرار حرارتی نه تنها تابع شرایط آزمون حرارتی، بلکه تابع مستقیم حالت پیری سلول نیز هست. در این پژوهش، عمر تقویمی ۷۵ روز به عنوان یک سناریوی ذخیره سازی در انبار در نظر گرفته می شود که منجر به تکامل هم زمان این دو سازوکار تخریبی و تغییر در حالت سلامت سلول می گردد. بر این اساس، مسئله حاضر به صورت یک مسئله پیش بینی داده محور و مبتنی بر دینامیک زمانی فرموله می شود که در آن، ورودی های مدل شامل تاریخچه دما، شرایط مرزی حرارتی و شاخص های مرتبط با پیری سلول بوده و خروجی اصلی، دمای فرار حرارتی است. بدین ترتیب، هدف نهایی پژوهش، توسعه یک چارچوب پیش بینی دقیق و قابل اعتماد برای دمای فرار حرارتی باتری های فرسوده ۱۴۵۰۰ است که بتواند اثر توأم پیری تقویمی، رسوب لیتیوم فلزی، رشد لایه فصل مشترک الکترولیتی جامد و شرایط مرزی حرارتی را در یک مدل منسجم بازتاب دهد.

باتری های تجاری با شیمی های لیتیوم آهن فسفات/گرافیت، اکسید لیتیوم منگنز/گرافیت و اکسید لیتیوم کبالت/گرافیت بررسی کردند. با این حال، خلأ بزرگی در زمینه پیش بینی دقیق دمای فرار حرارتی باتری های فرسوده ۱۴۵۰۰ با در نظر گرفتن اثر توأم متغیرهای محیطی وجود دارد. این پژوهش با هدف پر کردن این شکاف، از «شبکه عصبی بازگشتی با حافظه طولانی- کوتاه مدت (LSTM)» برای پیش بینی دقیق دمای فرار حرارتی استفاده می کند. نوآوری اصلی این تحقیق در تحلیل دمای بحرانی نسبت به دو پارامتر «ضریب انتقال حرارتی جابه جایی اطراف باتری» و «دمای کوره» نهفته است. مدل توسعه یافته قادر است با یادگیری توالی های زمانی داده های حرارتی در حالت های مختلف فرسودگی، یک ابزار پیش بینی قدرتمند برای سیستم های هشدار زودهنگام فراهم کند. این رویکرد، پیوندی میان تحلیل مکانیکی پیری و یادگیری عمیق ایجاد کرده و مبنایی علمی برای ارتقای ایمینی نسل بعدی تجهیزات متکی بر باتری های لیتیوم یون فرسوده فراهم می آورد.

۲. تعریف مسئله

مسئله اصلی این پژوهش، پیش بینی دمای فرار حرارتی باتری های لیتیوم یون فرسوده سایز ۱۴۵۰۰ جایگزین آلکالین است؛ به گونه ای که اثر هم زمان پیری تقویمی و چرخه ای بر رفتار حرارتی سلول لحاظ شود. مطابق شماتیک کلی ارائه شده در شکل ۱، باتری مورد مطالعه تحت شرایط مرزی حرارتی مشخص و در حضور سازوکارهای تخریبی وابسته به پیری بررسی می شود. در این چارچوب، پیری تقویمی به عنوان فرآیندی وابسته به زمان و شرایط نگهداری، موجب افزایش ضخامت لایه فصل مشترک



شکل (۱): شماتیک کلی مسئله و باتری لیتیوم یون ۱۴۵۰۰.

۳. معادلات حاکم

با توجه به هندسه سلول استوانه‌ای و ناچیز بودن تغییرات دما در راستای محیطی، میدان حرارتی سلول با استفاده از یک دامنه دوبعدی متقارن محوری در مختصات r - z مدل‌سازی شد [۲۴]. این تقریب ضمن حفظ انتقال حرارت شعاعی و محوری، هزینه محاسباتی را در مقایسه با مدل سه‌بعدی کامل به میزان قابل توجهی کاهش می‌دهد. با فرض خواص حرارتی ناهمسانگرد، معادله حاکم بر بقای انرژی به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r k_r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \dot{Q}_{abuse} \quad (۱)$$

که در آن، ρ ، C_p ، T ، k_r و k_z به ترتیب چگالی، ظرفیت گرمایی ویژه، دمای سلول و رسانندگی‌های گرمایی مؤثر در راستاهای شعاعی و محوری هستند. عبارت $\dot{Q}_{abuse}$ نرخ کل تولید گرمای حجمی ناشی از واکنش‌های تخریبی را نشان می‌دهد و از مجموع سهم حرارتی واکنش‌های تجزیه لایه فصل مشترک الکترولیت جامد، الکتروود منفی، لیتیوم رسوب‌کرده، الکتروود مثبت و الکترولیت محاسبه می‌شود [۲۴، ۲۵]:

$$\dot{Q}_{abuse} = \sum_i \dot{Q}_i = \sum_i H_i W_i R_i \quad (۲)$$

$i \in \{SEI, ne, Li, pe, e\}$

در رابطه (۲)، H_i ، W_i و R_i به ترتیب آنتالپی ویژه، مقدار مؤثر ماده واکنش‌پذیر و نرخ سینتیکی واکنش i هستند. تبادل گرما میان سطح خارجی سلول و محیط اطراف نیز با در نظر گرفتن هم‌زمان همرفت و تابش حرارتی توسط شرط مرزی زیر اعمال شد [۲۴، ۲۵]:

$$-n \cdot (k \nabla T) = h(T_{surf} - T_{amb}) + \varepsilon \sigma (T_{surf}^4 - T_{amb}^4) \quad (۳)$$

که در آن، n بردار واحد عمود بر سطح، k تانسور رسانندگی گرمایی، h ضریب انتقال حرارت همرفتی، ε گسیلندگی سطح، σ ثابت استفان-بولتزمن و T_{surf} و T_{amb} به ترتیب دمای سطح سلول و محیط پیرامون هستند. نرخ این واکنش‌ها و معادلات تکامل متغیرهای حالت به صورت فشرده از روابط زیر محاسبه می‌شوند:

$$R_{SEI} = A_{SEI} \exp \left(-\frac{E_{a,SEI}}{RT} \right) c_{SEI}^{m_{SEI}} \quad (۴)$$

$$R_{ne} = A_{ne} \exp \left(-\frac{E_{a,ne}}{RT} \right) c_{ne}^{m_{ne}} \exp \left(-\frac{t_{SEI}}{t_{SEI,ref}} \right)$$

$$R_{Li} = A_{Li} \exp \left(-\frac{E_{a,Li}}{RT} \right) \left(\frac{k_{Li} c_{Li}}{1 + k_{Li} c_{Li}} \right) c_e$$

$$R_{pe} = A_{pe} \exp \left(-\frac{E_{a,pe}}{RT} \right) \alpha^{m_{pe}^{p1}} (1 - \alpha)^{m_{pe}^{p2}}$$

$$R_e = A_e \exp \left(-\frac{E_{a,e}}{RT} \right) c_e^{m_e}$$

$$-\frac{dc_{SEI}}{dt} = R_{SEI} \quad (۵)$$

$$-\frac{dc_{ne}}{dt} = \frac{dt_{SEI}}{dt} = R_{ne}$$

$$\frac{dc_{Li}}{dt} = -R_{Li}$$

$$\frac{d\alpha}{dt} = R_{pe}$$

$$\frac{dc_e}{dt} = -R_e - k_{ele} R_{Li}$$

چارچوب سینتیکی مدل بر پایه روابط آرنیوسی تدوین شد و شامل تجزیه لایه SEI، واکنش الکتروود منفی-الکترولیت، واکنش لیتیوم رسوب‌کرده-الکترولیت، واکنش الکتروود مثبت-الکترولیت و تجزیه حرارتی الکترولیت است [۲۶، ۲۷]. در رابطه (۴)، $A_{a,i}$ و m_i به ترتیب ضریب پیش‌نمایی، انرژی فعال‌سازی و مرتبه واکنش هستند. متغیرهای c_{SEI} ، c_{ne} ، c_{Li} و c_e به ترتیب مقدار بدون بعد اجزای واکنش‌پذیر مرتبط با لایه SEI، الکتروود منفی، لیتیوم فلزی رسوب‌کرده و الکترولیت را نشان می‌دهند. همچنین، t_{SEI} و $t_{SEI,ref}$ به ترتیب ضخامت جاری و ضخامت مرجع لایه SEI هستند و α میزان پیشرفت واکنش الکتروود مثبت-الکترولیت را بیان می‌کند. پارامتر k_{Li} رفتار اشباعی واکنش لیتیوم رسوب‌کرده با الکترولیت را کنترل می‌کند، درحالی‌که k_{ele} ضریب مصرف الکترولیت در این واکنش است. برای وارد کردن اثر پیری در مدل، وضعیت سلامت سلول بر اساس نسبت ظرفیت باقی‌مانده به ظرفیت اولیه تعریف شد [۲۴، ۲۵]:

$$SOH = 1 - \frac{C_{loss}}{C_{ini}} \quad (۶)$$

که در آن، C_{ini} ظرفیت اولیه و C_{loss} ظرفیت ازدست‌رفته سلول است. با فرض اینکه افت ظرفیت برگشت‌ناپذیر عمدتاً به رسوب لیتیوم روی آند مربوط می‌شود، مقدار اولیه بدون بعد لیتیوم رسوب‌کرده از رابطه زیر تعیین شد:

$$c_{Li,0} = \frac{C_{loss}}{C_{ini}} = 1 - SOH \quad (۷)$$

بنابراین، اثر حالت پیری مستقیماً از طریق مقدار اولیه $c_{Li,0}$ وارد چارچوب سینتیکی می‌شود؛ به گونه‌ای که کاهش SOH مقدار لیتیوم رسوب‌کرده و در نتیجه ظرفیت بالقوه تولید گرما از واکنش لیتیوم-الکترولیت را افزایش می‌دهد. شرایط مرزی به این صورت است که در $r=0$ شرط مرزی محور تقارن، در سطح بیرونی باتری $r=r_{mm}$ همان‌طور که در شکل ۱ شرط مرزی جابه‌جایی و تشعشع وجود دارد. چگالی مؤثر سلول $2231/2$ کیلوگرم بر متر مکعب، ظرفیت گرمایی ویژه 1100 ژول بر کلونین و رسانایی حرارتی شعاعی و محوری به ترتیب $0.7/0.7$ و 140 وات بر متر کلونین است. علاوه بر این، ضریب گسیلندگی سطح به صورت $\varepsilon=0.8$ مشخص شد که با مقادیر گزارش شده برای سطوح باتری لیتیوم‌یون در مقالات [۲۵-۲۷] مطابقت دارد. مقادیر

۴. روش عددی و یادگیری ماشین

در این پژوهش، جهت تحلیل پدیده فرار حرارتی در باتری‌های لیتیوم یون، ابتدا شبیه‌سازی‌های عددی با استفاده از حل‌گر وابسته به زمان در نرم‌افزار کامسول مولتی فیزیک انجام شد. این چارچوب عددی بر پایه حل جفت‌شده معادلات انتقال حرارت گذرا و معادلات دیفرانسیل جبری بنا شده است تا تعامل هم‌زمان تولید حرارت و پاسخ گرمایی سیستم را به دقت لحاظ کند. تحلیل پارامتریک در دمای کوره ۴۲۸ کلون طی بازه زمانی ۱۲۰ دقیقه انجام گرفت. جهت تضمین پایداری و دقت در مواجهه با گرادیان‌های شدید دمایی، از روش ضمنی فرمول تمایز عقب‌گرد برای گسسته‌سازی زمان استفاده شد که در آن گام‌های زمانی به صورت تطبیقی توسط حل‌گر تعیین و نتایج در فواصل خروجی مشخص ذخیره گردیدند. در این میان، LSTM به عنوان ابزار پیش‌بینی انتخاب شده است؛ زیرا این معماری توانایی بالایی در یادگیری وابستگی‌های زمانی، استخراج الگوهای غیرخطی و بازنمایی رفتار حرارتی وابسته به گذشته دارد. در این پژوهش، از یک مدل مبتنی بر معماری LSTM مجهز به اتصال باقی‌مانده استفاده شده است. وجود اتصال باقی‌مانده با انتقال مستقیم آخرین وضعیت دمایی مشاهده شده به خروجی نهایی، به پایداری آموزش، سرعت همگرایی و حفظ روند محلی کمک شایانی می‌کند. این روش شامل چهار گام اصلی آماده‌سازی داده‌ها، پیش‌پردازش و استانداردسازی، گذر زمان در لایه‌های پنهان مدل به همراه اتصال میان‌بر و در نهایت بهینه‌سازی و ارزیابی است. ارزیابی عملکرد مدل بر روی داده‌های آزمون با استفاده از معیارهای آماری شامل میانگین مطلق خطا در رابطه (۸)، ریشه میانگین مربع خطا در رابطه (۹)، ضریب تبیین در رابطه (۱۰) و کارایی ناش-ساتکلیف در رابطه (۱۱) صورت گرفت [۳۵، ۳۴]:

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (8)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (9)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (10)$$

$$NSE = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (11)$$

۵. اعتبارسنجی

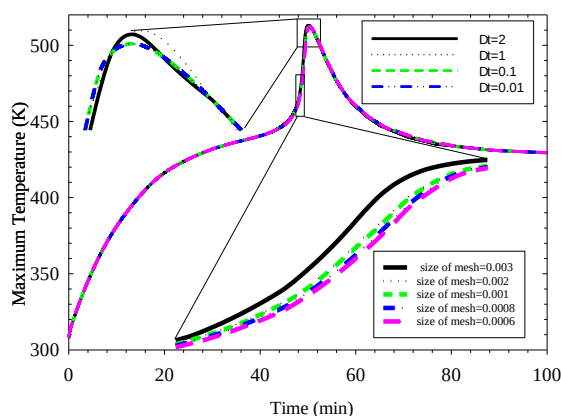
به منظور اعتبارسنجی مدل عددی توسعه یافته، نتایج حاصل از حل معادلات حاکم در نرم‌افزار کامسول با نتایج آبادا و همکاران

خواص ترموفیزیکی، ضرایب سینتیکی، انرژی‌های فعال‌سازی، آنتالپی واکنش‌ها و شرایط اولیه مدل در جدول ۱ ارائه شده‌اند.

جدول (۱): پارامترهای فیزیکی و شیمایی سینتیکی برای شبیه‌سازی فرار حرارتی در باتری‌های لیتیوم یون [۲۷، ۲۶].

Category	Symbol / Unit	(LFP)
انرژی فعال‌سازی [۲۹-۲۷]	$E_{a,SEI} \text{ (J mol}^{-1}\text{)}$	$1/38 \times 10^5$
	$E_{a,ne} \text{ (J mol}^{-1}\text{)}$	$1/32 \times 10^5$
	$E_{a,pe} \text{ (J mol}^{-1}\text{)}$	$0/99 \times 10^5$
	$E_{a,e} \text{ (J mol}^{-1}\text{)}$	$2/7 \times 10^5$
	$E_{a,Li} \text{ (J mol}^{-1}\text{)}$	$2/05 \times 10^5$
ضریب واکنش [۳۰-۲۷، ۲۴]	$A_{SEI} \text{ (s}^{-1}\text{)}$	$1/66 \times 10^{15}$
	$A_{ne} \text{ (s}^{-1}\text{)}$	$2/50 \times 10^{13}$
	$A_{pe} \text{ (s}^{-1}\text{)}$	$2/0 \times 10^4$
	$A_e \text{ (s}^{-1}\text{)}$	$5/14 \times 10^{25}$
	$A_{Li} \text{ (s}^{-1}\text{)}$	$9/41 \times 10^{21}$
مرتبه واکنش	$m_{SEI}, m_{ne}, m_{pe}, m_e$	۱
مقادیر اولیه متغیرهای کلیدی [۲۸، ۲۷]	$C_{SEI,0} \text{ (-)}$	۰/۱۵
	$C_{ne,0} \text{ (-)}$	۰/۷۵
	$\alpha_0 \text{ (-)}$	۰/۰۴
	$C_{e,0} \text{ (-)}$	۱
حرارت آزاد شده [۳۰-۲۷، ۲۴]	$H_{SEI} \text{ (J kg}^{-1}\text{)}$	$2/57 \times 10^5$
	$H_{ne} \text{ (J kg}^{-1}\text{)}$	$1/714 \times 10^5$
	$H_{pe} \text{ (J kg}^{-1}\text{)}$	$1/947 \times 10^5$
	$H_e \text{ (J kg}^{-1}\text{)}$	20×10^5
	$H_{Li} \text{ (J kg}^{-1}\text{)}$	۵۸۵/۳
محتوای ویژه ماده فعال [۲۶-۲۸، ۳۱]	$W_{n,e} \text{ (kg m}^{-3}\text{)}$	۲۲۰
	$W_{p,e} \text{ (kg m}^{-3}\text{)}$	۵۲۰/۷۴
	$W_e \text{ (kg m}^{-3}\text{)}$	۳۳۴/۶۸
پارامترهای پیری تقویمی [۲۷، ۲۸]	$M_{SEI} \text{ (kg mol}^{-1}\text{)}$	۰/۱۶۲
	$\rho_{SEI} \text{ (kg m}^{-3}\text{)}$	۱۶۹۰
	$\varepsilon_{s,n} \text{ (-)}$	۰/۵۸
	$\delta_n \text{ (m)}$	$3/45 \times 10^5$
	$A \text{ (m}^2\text{)}$	۰/۱۸
	$R_{s,n} \text{ (m)}$	5×10^{-6}
	$C_{loss} \text{ (Ah)}$	۰/۲۳
	$F \text{ (C mol}^{-1}\text{)}$	۹۶۴۸۵
	$\delta_{SEI,0} \text{ (m)}$	5×10^{-9}
	$t_{SEI,0} \text{ (-)}$	۰/۰۳۳
	$\delta_{SEI} \text{ (m) (10\%)}$	$1/98 \times 10^{-7}$
	$t_{SEI} \text{ (-) (10\%)}$	۱/۳۱
پارامترهای پیری چرخه‌ای [۲۴، ۲۹، ۳۲، ۳۳]	$C_{Li,0} \text{ (10\%)}$	۰/۱
	k_{Li}	۲۰۰۰
	k_{ele}	۱/۵

ذاتاً زمان وابسته است، مطالعه استقلال از گام زمانی نیز انجام شد. در این بخش، حل عددی با چند گام زمانی مختلف اجرا و پاسخ‌های زمانی سامانه، به‌ویژه تغییرات دما، با یکدیگر مقایسه شد. مطابق شکل ۳، با کاهش گام زمانی نیز، تغییرات پاسخ‌ها کمتر شد و پس از رسیدن به مقدار مشخصی، کاهش بیشتر گام زمانی اثر معناداری بر نتایج نداشت. این نتیجه بیانگر همگرایی زمانی حل برای ثبت دقیق پدیده‌های گذرا و واکنش‌های حرارتی سریع است. در نهایت، گام زمانی ۰/۱ انتخاب شد تا از افزایش غیرضروری هزینه محاسباتی جلوگیری کند.



شکل (۳): بررسی گام زمانی و استقلال شبکه مکانی.

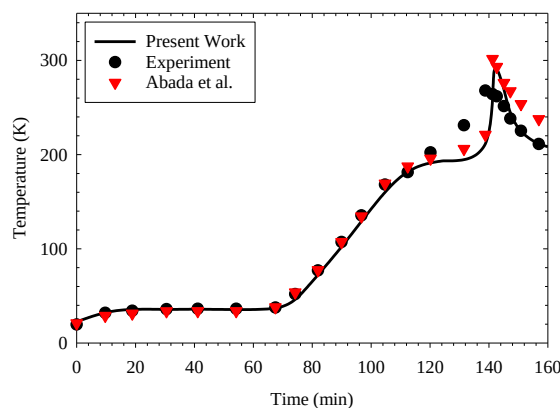
۷. بحث و بررسی نتایج

در این بخش، نتایج حاصل از مدل‌سازی و پیش‌بینی رفتار حرارتی باتری لیتیوم‌یون فرسوده مورد بحث و تحلیل قرار می‌گیرد. در گام نخست، اثر ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی به‌عنوان یکی از مهم‌ترین شرایط مرزی بر رفتار فرار حرارتی، نرخ تولید گرما و تغییرات دمای سطح بیرونی سلول بررسی می‌شود. سپس، تأثیر دمای کوره بر سینتیک واکنش‌های گرمازا و نقش آن در تشدید یا کنترل ناپایداری حرارتی مورد ارزیابی قرار می‌گیرد. در نهایت، عملکرد شبکه عصبی حافظه بلند-کوتاه‌مدت در پیش‌بینی تاریخچه زمانی دمای سطح سلول بررسی می‌شود.

۱.۷. بررسی ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی

با توجه به شکل ۴، سه نمودار به‌ترتیب (الف) تغییرات دمای سلول در حین فرار حرارتی (ب) نرخ افزایش دما (نرخ گرمایش) و (ج) میزان انتشار گرما را برای مقادیر ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی نشان می‌دهند. در شکل ۴(الف) مشاهده می‌شود، ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی تأثیر قابل‌توجهی بر پاسخ دمایی سلول در طی فرآیند فرار حرارتی دارد. با افزایش ضریب انتقال حرارت روند افزایش دما سریع‌تر شده و زمان رسیدن به دمای

[۲۷] مقایسه شد. بیشینه دمای سطح باتری در طی فرایند فرار حرارتی با نتایج آبادا و همکاران [۲۷] در شکل (۲) مورد بررسی قرار گرفت. در مطالعه مذکور، یک مدل سه‌بعدی چندفیزیکی برای بررسی فرار حرارتی در باتری‌های لیتیوم‌یون تازه و فرسوده توسعه داده شده و نتایج شبیه‌سازی با داده‌های آزمایشگاهی حاصل از آزمون گرمایش خارجی اعتبارسنجی شده بود. مقایسه انجام‌شده نشان داد که روند تغییرات دما، زمان آغاز افزایش سریع دما و الگوی کلی پاسخ حرارتی در مدل حاضر، تطابق مناسبی با نتایج مرجع دارد. این همخوانی، بیانگر صحت پیاده‌سازی مدل، درستی حل عددی و قابلیت اعتماد شبیه‌سازی‌های انجام‌شده در پیش‌بینی رفتار حرارتی باتری است.

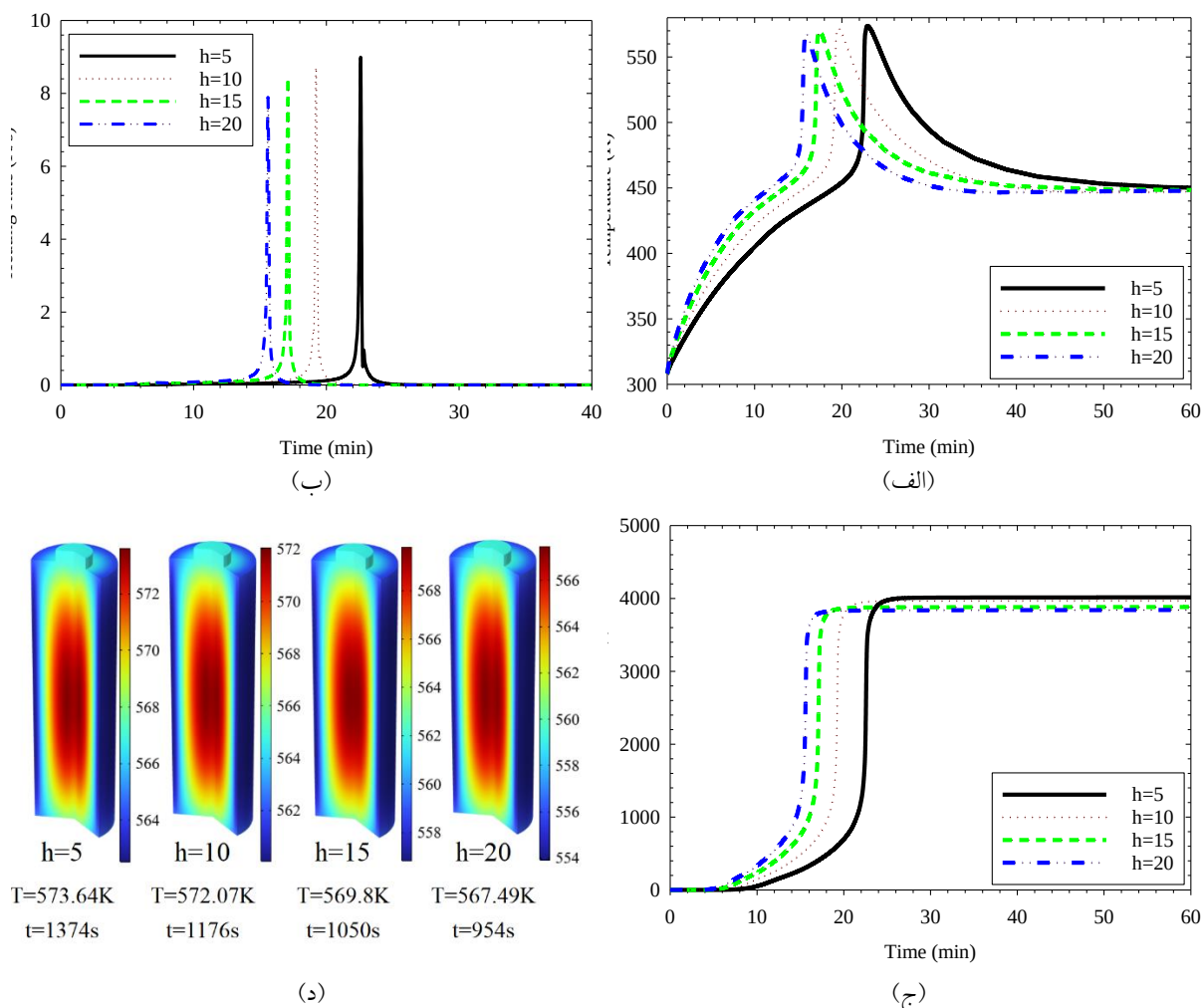


شکل (۲): اعتبارسنجی مدل عددی توسعه‌یافته و مقایسه پروفیل‌های دمای سطح سلول با داده‌های تجربی آبادا و همکاران [۲۷].

۶. بررسی شبکه و گام زمانی

به‌منظور اطمینان از دقت و قابلیت اعتماد نتایج عددی، مطالعات استقلال از شبکه و گام زمانی انجام شد. این بررسی‌ها برای ارزیابی اثر گسسته‌سازی فضایی و زمانی بر پاسخ‌های عددی صورت گرفت تا اطمینان حاصل شود. با توجه به وجود گرادیان‌های شدید دما و رفتار غیرخطی در مسئله فرار حرارتی باتری‌ها، انجام چنین تحلیلی برای تضمین همگرایی عددی و جلوگیری از خطاهای ناشی از گسسته‌سازی ضروری است. در مطالعه استقلال از شبکه، دامنه محاسباتی با شبکه‌های ساختاریافته گسسته‌سازی شد. همان‌گونه که در شکل ۳ دیده می‌شود، پنج شبکه مختلف با تعداد المان‌های متفاوت بررسی و دمای سطح باتری به‌عنوان معیار مقایسه انتخاب گردید. نتایج نشان داد با افزایش تعداد المان‌ها و ریزتر شدن شبکه، تغییرات دمای سطح به‌تدریج کاهش می‌یابد. در شبکه‌های با اندازه المان ریزتر اختلاف نتایج به حد ناچیز رسید؛ از این‌رو شبکه با اندازه المان ۰۰۰۰۸ به‌عنوان شبکه نهایی انتخاب شد. از آنجاکه شبیه‌سازی فرار حرارتی

بحرانی کاهش می‌یابد؛ به طوری که وقوع فرار حرارتی از حدود ۲۳ دقیقه در حالت $h = 5 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ به حدود ۱۶ دقیقه در حالت $h = 20 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ منتقل می‌شود. این موضوع در شکل ۴ (د) نیز دیده می‌شود.



شکل ۴: (الف) اثر ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی ($h = 5-20 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$) بر رفتار حرارتی سلول لیتیوم یون در طی فرار حرارتی. (الف) تغییرات دمای سطح سلول در حین فرار حرارتی (ب) نرخ افزایش دما (نرخ گرمایش) درون سلول (ج) میزان انتشار گرما و (د) کانتور دمای باتری در زمان اوج (ماکزیمم دما) فرایند فرار حرارتی.

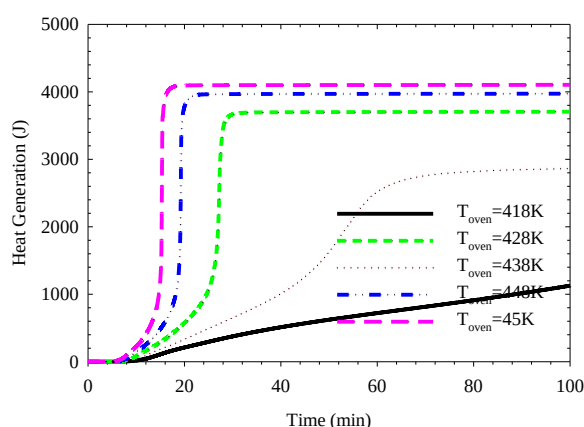
همچنین، با وجود آنکه دمای بیشینه سلول تنها تغییر محدودی را تجربه می‌کند، مرحله سرد شدن پس از وقوع فرار حرارتی در ضرایب بالاتر جابه‌جایی با سرعت بیشتری انجام می‌شود. این رفتار نشان می‌دهد که ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی علاوه بر کنترل نرخ تبادل انرژی میان سلول و محیط، بر زمان آغاز ناپایداری حرارتی نیز اثر مستقیم دارد. رفتار نرخ گرمایش یا نرخ افزایش دما در شکل ۴(ب) نیز همین روند را تأیید می‌کند. تا پیش از آغاز فرار حرارتی، نرخ افزایش دما در تمامی حالات بسیار ناچیز است، اما با فعال شدن واکنش‌های گرمایی داخلی، مقدار نرخ تغییرات دما به صورت ناگهانی افزایش یافته است. با افزایش ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی، این قله به زمان‌های کوتاه‌تر منتقل می‌شود، درحالی که مقدار بیشینه نرخ گرمایش تغییر محسوسی ندارد. این نتیجه نشان می‌دهد که ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی بیشتر بر زمان وقوع واکنش‌های خودشتاب اثرگذار است تا بر شدت ذاتی فرآیندهای گرمایی داخلی. همچنین، شکل ۴ (ج) تغییرات تولید حرارت ناشی از واکنش‌های داخلی را در طول فرایند فرار حرارتی نشان می‌دهد. در تمامی شرایط، تولید حرارت ابتدا به آرامی افزایش یافته و سپس هم‌زمان با آغاز فرار حرارتی، رشد بسیار سریعی را تجربه کرده و به یک مقدار تقریباً ثابت می‌رسد. همان‌طور که در شکل ۴ (د) نیز دیده می‌شود با افزایش ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی، منحنی‌های تولید حرارت و کانتور دما به سمت زمان‌های کوتاه‌تر جابه‌جا می‌شوند، اما مقدار نهایی گرمای آزاد شده تقریباً ثابت باقی می‌ماند. این موضوع بیانگر آن است که ضریب انتقال حرارت

جابه‌جایی عمدتاً سیستیک آزادسازی انرژی را کنترل می‌کند و تأثیر اندکی بر میزان کل انرژی آزادشده از واکنش‌های داخلی دارد.

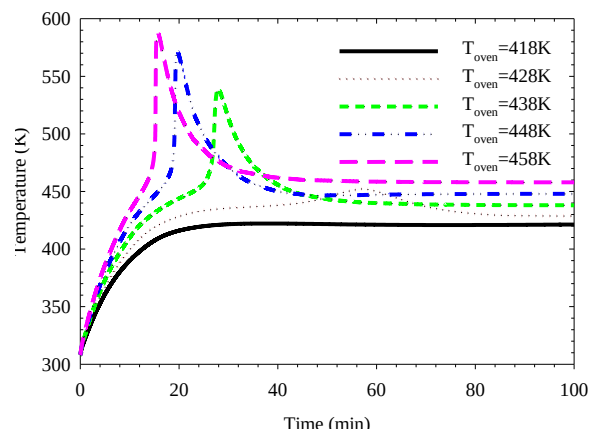
۲.۷. بررسی تأثیر دمای کوره

شکل ۵ اثر دمای کوره بر سه شاخص اصلی فرار حرارتی شامل دمای سلول، نرخ گرمایش و تولید حرارت را نشان می‌دهد. همان‌گونه که در شکل ۵(الف) مشاهده می‌شود، افزایش دمای کوره از ۴۱۸ به ۴۵۸ کلوین تأثیر قابل‌توجهی بر پاسخ دمایی سلول لیتیوم‌یون فرسوده دارد. در دماهای پایین‌تر، افزایش دمای سلول به‌صورت تدریجی انجام شده و سلول برای مدت طولانی‌تری در مرحله انباشت حرارت باقی می‌ماند، درحالی‌که با افزایش دمای کوره، زمان رسیدن به آستانه فرار حرارتی به‌طور محسوسی کاهش یافته و قله دمایی در زمان‌های کوتاه‌تری ظاهر می‌شود. علاوه بر این، دمای بیشینه سلول نیز با افزایش دمای کوره افزایش یافته و در حالت ۴۵۸ کلوین به بیشترین مقدار خود می‌رسد. این رفتار نشان می‌دهد که افزایش دمای محیط، اختلاف دمای میان کوره و سلول را افزایش داده و با تقویت شار حرارتی

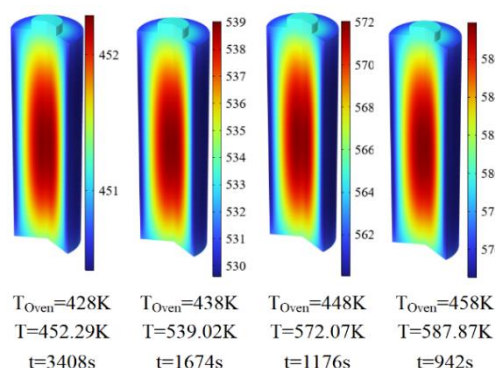
ورودی، انرژی لازم برای آغاز واکنش‌های گرمای داخلی را سریع‌تر فراهم می‌کند. رفتار نرخ گرمایش یا نرخ افزایش دما در شکل ۵(ب) نیز این روند را به‌خوبی تأیید می‌کند. در دماهای ۴۱۸ و ۴۲۸ کلوین، نرخ افزایش دما بسیار محدود بوده و قله مشخصی مشاهده نمی‌شود که بیانگر عدم وقوع یا وقوع بسیار ضعیف فرار حرارتی است. با افزایش دمای کوره به ۴۳۸ کلوین، نخستین قله قابل‌توجه در نرخ گرمایش ظاهر می‌شود که نشان‌دهنده آغاز ناپایداری حرارتی است. در ادامه، با افزایش دمای کوره به ۴۴۸ و ۴۵۸ کلوین، قله‌های نرخ گرمایش به‌طور چشمگیری بزرگ‌تر شده و هم‌زمان به زمان‌های کوتاه‌تر منتقل می‌شوند. این افزایش شدید در نرخ تغییرات دما بیانگر فعال شدن هم‌زمان واکنش‌های گرمای داخلی و ورود سلول به مرحله فرار حرارتی است؛ به‌گونه‌ای که افزایش تنها ۴۰ کلوین در دمای کوره، نرخ گرمایش را چندین برابر افزایش داده و زمان وقوع فرار حرارتی را به‌شدت کاهش می‌دهد.



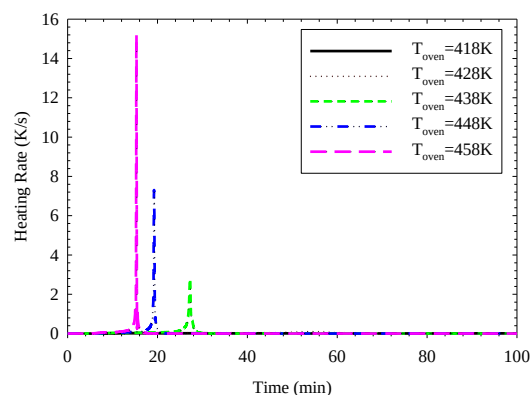
(ب)



(الف)



(د)



(ج)

شکل ۵: (الف) اثر دمای کوره بر رفتار حرارتی سلول لیتیوم‌یون فرسوده در طی فرار حرارتی (الف) تغییرات دمای سطح سلول در حین فرار حرارتی، (ب) نرخ افزایش دما (نرخ گرمایش)، (ج) میزان انتشار گرما و (د) کانتور دمای باتری در زمان اوج (ماکزیمم دما) فرایند فرار حرارتی.

همچنین، شکل ۵ (ج) تغییرات تولید حرارت را در دماهای مختلف کوره نشان می‌دهد. در دمای ۴۱۸ کلوین، گرمای تولیدشده به آرامی افزایش یافته و مقدار نهایی آن نسبتاً پایین باقی می‌ماند که بیانگر محدود بودن واکنش‌های گرمازا است. با افزایش دمای کوره، نرخ تولید حرارت به‌طور قابل توجهی افزایش یافته و منحنی‌ها با شیب بسیار تندتری به مقدار نهایی نزدیک ۴۰۰۰ ژول می‌رسند. علاوه بر این، زمان آزادسازی انرژی نیز به‌طور محسوسی کاهش یافته، به‌گونه‌ای که در ۴۵۸ کلوین تقریباً کل انرژی در مدت زمانی کوتاه آزاد می‌شود. این نتایج نشان می‌دهد که دمای کوره یکی از مهم‌ترین پارامترهای کنترل‌کننده سینتیک فرار حرارتی است و افزایش آن، از طریق تسریع واکنش‌های گرمازا و افزایش نرخ آزادسازی انرژی، احتمال وقوع فرار حرارتی را به شدت افزایش می‌دهد.

در شکل ۵ (د) کانتورهای سه‌بعدی متناظر با شکل ۵ (الف) نشان می‌دهند که افزایش دمای محیط آون از ۴۱۸ به ۴۵۸ کلوین، محرک اصلی گذار سلول از حالت پایدار به رژیم فرار حرارتی کنترل‌نشده است؛ به‌طوری‌که در دمای مرزی ۴۱۸ کلوین هیچ‌گونه اوج حرارتی بحرانی رخ نمی‌دهد، اما با افزایش دما، بیشینه دمای سلول روندی افزایشی یافته و به بیشترین مقدار می‌رسد و هم‌زمان زمان رسیدن به اوج حرارتی به شدت کاهش یافته و به ۹۴۲ ثانیه (معادل ۱۵/۷ دقیقه) فشرده می‌شود. بررسی توزیع کانتورهای برشی حاکی از آن است که به دلیل مقاومت حرارتی هدایتی در راستای شعاعی و محدودیت اتلاف حرارت از سطح، تمرکز حرارتی همواره از مغزی (هسته مرکزی) سلول آغاز شده و یک گرادین شعاعی تند را به سمت جدار بیرونی شکل می‌دهد که با افزایش دمای آون، نرخ سینتیک واکنش‌های گرمازای داخلی بر نرخ دفع حرارت به محیط غلبه کرده و پنجره زمانی مداخله و ایمینی را به‌طور چشمگیری محدود می‌سازد.

شکل ۶، سهم هر یک از واکنش‌های داخلی سلول شامل تجزیه لایه SEI، واکنش الکتروود منفی (NE)، واکنش الکتروود مثبت (PE)، تجزیه الکتروولیت (ELE) و واکنش لیتیوم فلزی (Li) را در دو دمای کوره ۴۱۸ و ۴۵۸ کلوین مقایسه می‌کند. همان‌گونه که در شکل ۶ (الف) و (ب) مشاهده می‌شود، تغییرات غلظت بدون بعد گونه‌های فعال در داخل سلول به شدت تحت تأثیر دمای کوره قرار دارد. در دمای ۴۱۸ کلوین (شکل ۶ (الف))، کاهش غلظت لایه SEI و الکتروود منفی به‌صورت تدریجی انجام شده و هم‌زمان، سهم محصولات ناشی از تجزیه الکتروود مثبت به آرامی

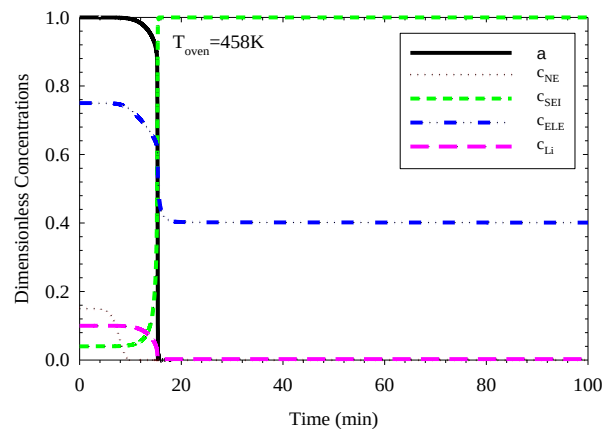
افزایش می‌یابد. این رفتار نشان‌دهنده آن است که واکنش‌های داخلی به‌صورت مرحله‌ای پیشرفت کرده و سلول برای مدت نسبتاً طولانی در وضعیت شبه‌پایدار باقی می‌ماند. در مقابل، در دمای ۴۵۸ کلوین (شکل ۶ (ب))، تقریباً تمامی گونه‌های واکنش‌دهنده در بازه زمانی کوتاهی، حدود ۱۵ دقیقه، به سرعت مصرف شده و غلظت آن‌ها به نزدیک صفر می‌رسد. این تغییر ناگهانی بیانگر فعال شدن هم‌زمان واکنش‌های گرمازا و از بین رفتن سریع پایداری الکتروشیمیایی سلول است که مشخصه ورود به مرحله فرار حرارتی محسوب می‌شود.

رفتار سینتیکی واکنش‌های داخلی در شکل ۶ (ج) و (د) با نمایش نرخ تولید گرما برای هر واکنش به‌خوبی قابل مشاهده است. در دمای ۴۱۸ کلوین (شکل ۶ (ج))، واکنش‌های مختلف در زمان‌های متفاوت فعال شده و هر یک سهم مشخصی در تولید گرما دارند؛ به‌گونه‌ای که ابتدا تجزیه لایه SEI آغاز شده، سپس واکنش الکتروولیت غالب می‌شود و در ادامه سهم الکتروود مثبت به تدریج افزایش می‌یابد. این توالی نشان‌دهنده یک فرآیند گرمایش تدریجی و قابل کنترل است. در مقابل، در دمای ۴۵۸ کلوین (شکل ۶ (د))، تمامی نرخ‌های تولید گرما تقریباً به‌طور هم‌زمان به یک قله بسیار بزرگ و باریک می‌رسند که بیانگر هم‌پوشانی واکنش‌های گرمازا و آزادسازی ناگهانی انرژی است. چنین رفتاری نشان می‌دهد که افزایش دمای محیط، انرژی فعال‌سازی واکنش‌ها را به‌طور هم‌زمان تأمین کرده و باعث ایجاد یک حلقه بازخورد مثبت حرارتی می‌شود؛ به‌طوری‌که افزایش دما موجب تسریع واکنش‌ها شده و واکنش‌ها نیز گرمای بیشتری تولید می‌کنند.

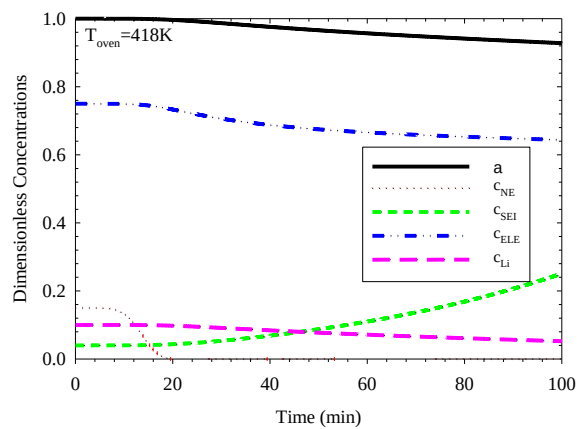
نتایج تجمعی تولید حرارت در شکل ۶ (ه) و (و) نیز همین روند را تأیید می‌کند. در دمای ۴۱۸ کلوین (شکل ۶ (ه))، گرمای آزادشده از هر واکنش به تدریج افزایش یافته و سهم واکنش‌های الکتروود منفی و الکتروود مثبت در تولید انرژی نسبت به سایر واکنش‌ها بیشتر است. در مقابل، در دمای ۴۵۸ کلوین (شکل ۶ (و))، تولید گرمای کل در مدت زمان بسیار کوتاهی به حدود ۴۰۰۰ ژول می‌رسد که نشان‌دهنده آزاد شدن تقریباً هم‌زمان انرژی ذخیره‌شده در سلول است. همچنین سهم واکنش‌های الکتروود مثبت و الکتروولیت در این مرحله غالب بوده و بیشترین نقش را در تشدید فرار حرارتی ایفا می‌کنند، درحالی‌که سهم تجزیه SEI و لیتیوم فلزی نسبتاً محدود باقی می‌ماند. در مجموع، شکل ۶ نشان می‌دهد که افزایش دمای محیط نه تنها زمان آغاز واکنش‌های

LSTM نشان می‌دهد، زیرا تغییر در این پارامتر مستقیماً مسیر سینتیکی واکنش‌ها، نرخ تولید گرما و در نهایت دمای فرار حرارتی سلول را کنترل می‌کند.

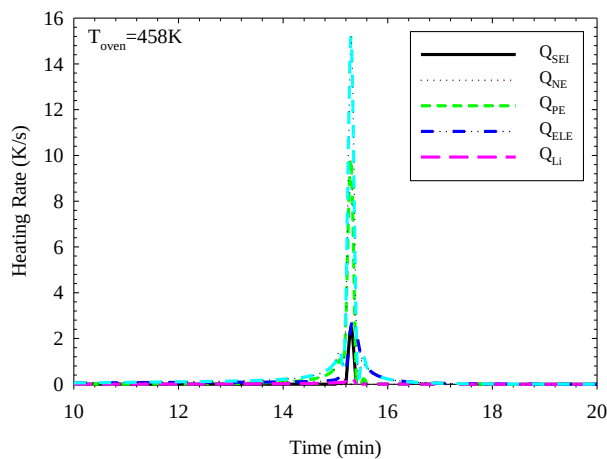
گرمازا را کاهش می‌دهد، بلکه موجب هم‌زمان شدن آن‌ها و افزایش نرخ آزادسازی انرژی نیز می‌شود. این نتایج اهمیت دمای کوره را به‌عنوان یکی از مهم‌ترین پارامترهای ورودی مدل



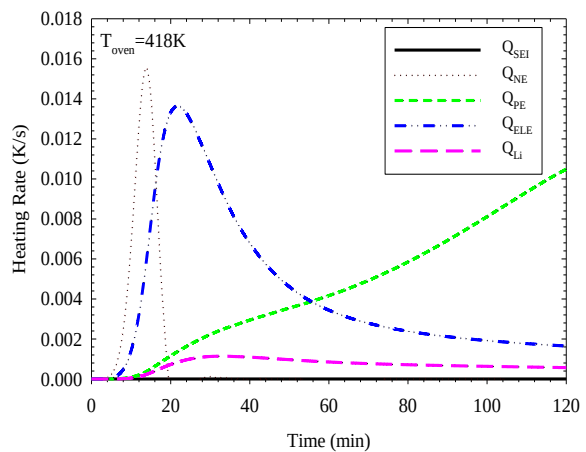
(ب)



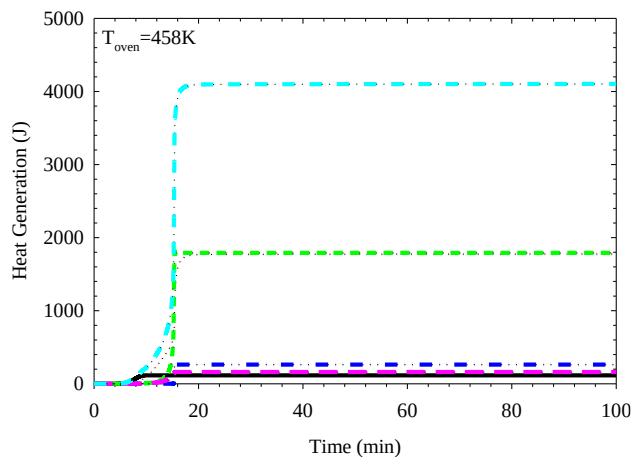
(الف)



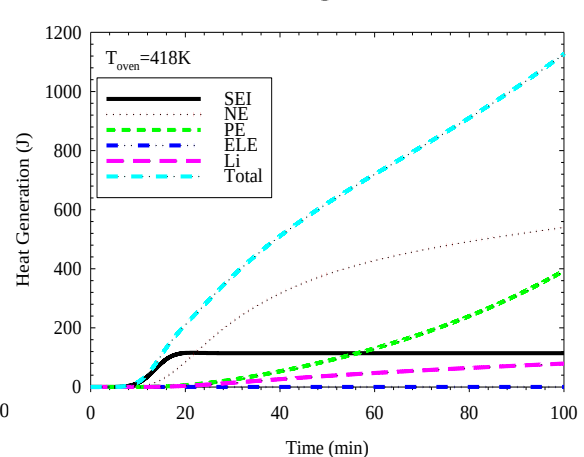
(د)



(ج)



(و)



(ه)

شکل (۶): اثر دمای کوره بر تکامل سینتیکی فرار حرارتی باتری لیتیوم‌یون فرسوده. (الف، ب) تغییرات غلظت گونه‌های فعال، (ج، د) نرخ افزایش دما (نرخ گرمایش) و (ه، و) میزان تولید گرما و واکنش‌های داخلی در دماهای ۴۱۸ تا ۴۵۸ کلوین.

۸. یادگیری ماشین

دقت بسیار بالا و توانایی تعمیم‌دهی مطلوب شبکه LSTM در پیش‌بینی سری‌های زمانی دما است. همان‌طور که در مقادیر خطا مشاهده می‌شود، مدل در تمامی سناریوها به خطای میانگین مطلق (MAE) و ریشه میانگین مربع خطای (RMSE) بسیار ناچیزی دست یافته است که در بهترین حالت برای مجموعه داده ۴۵۸ به ترتیب برابر با ۰/۰۰۰۱ و ۰/۰۰۰۸ می‌باشد. همچنین، مقادیر ضریب تبیین (R^2) و کارایی ناش-ساکتلف (NSE) در تمامی موارد بالاتر از ۰/۹۵ بوده و در مجموعه‌های ۴۱۸ و ۴۲۸ به بیش از ۰/۹۹ رسیده است که این موضوع تأییدکننده انطباق تقریباً کامل مقادیر پیش‌بینی شده با داده‌های واقعی و توانایی مدل در استخراج دقیق الگوهای پیچیده و دینامیک‌های حرارتی سیستم است.

جدول (۲): شاخص‌های ارزیابی عملکرد مدل LSTM در

پیش‌بینی دمای فرار حرارتی باتری لیتیوم یون فرسوده تحت

دماهای مختلف کوره.

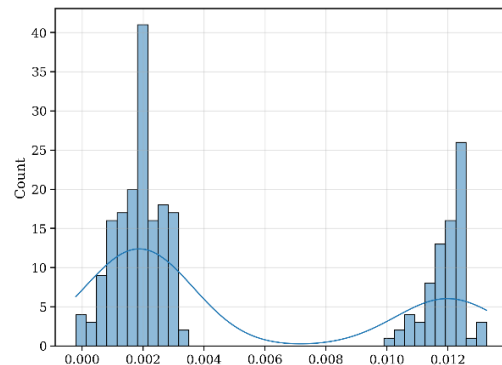
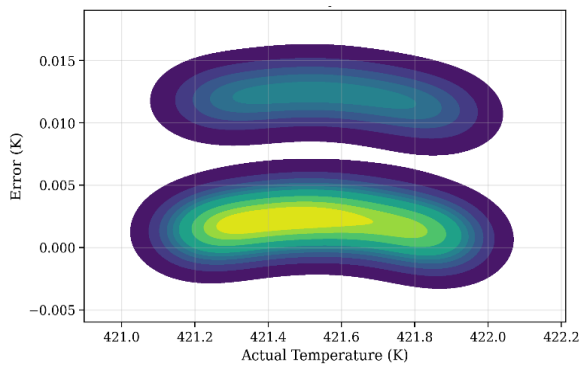
T_{oven}	MAE	RMSE	R^2	NSE
۴۵۸K	۰/۰۰۰۱	۰/۰۰۰۸	۰/۹۷۴۴	۰/۹۷۴۴
۴۴۸K	۰/۰۰۰۶	۰/۰۰۱۲	۰/۹۷۷۱	۰/۹۷۷۱
۴۳۸K	۰/۰۰۴۱	۰/۰۰۴۵	۰/۹۵۶۶	۰/۹۵۶۶
۴۲۸K	۰/۰۰۵۵	۰/۰۰۶۹	۰/۹۹۴۹	۰/۹۹۴۹
۴۱۸K	۰/۰۰۵۵	۰/۰۰۷۰	۰/۹۹۹۰	۰/۹۹۹۰

همان‌گونه که در شکل ۷ مشاهده می‌شود، توزیع خطاهای مدل LSTM برای سه سناریوی دمای کوره ۴۱۸، ۴۳۸ و ۴۵۸ کلون به کمک نمودارهای چگالی دوبعدی و هیستوگرام مورد بررسی قرار گرفته است. نمودارهای سمت چپ، پراکندگی خطا را بر حسب دمای واقعی نشان می‌دهند، درحالی‌که نمودارهای سمت راست، توزیع فراوانی خطاهای پیش‌بینی را نمایش می‌دهند. در تمامی سناریوها، بیشترین چگالی داده‌ها در نزدیکی مقدار صفر متمرکز است که بیانگر انطباق مناسب مقادیر پیش‌بینی شده با داده‌های واقعی و نبود خطاهای بزرگ در فرآیند پیش‌بینی است. علاوه بر این، محدود بودن دامنه پراکندگی خطاها نشان می‌دهد که مدل از پایداری مناسبی در بازسازی رفتار زمانی دمای سلول برخوردار بوده و تغییرات غیرخطی فرار حرارتی را با دقت مطلوبی دنبال کرده است. نتایج شکل ۷ نشان می‌دهد که مدل LSTM نه تنها از نظر شاخص‌های عملکرد مطلوبی دارد، بلکه از دیدگاه توزیع خطا نیز دارای پایداری و قابلیت تعمیم مناسبی است. تمرکز اکثر خطاها در نزدیکی صفر، نبود داده‌های پرت و کاهش تدریجی پراکندگی خطا با افزایش دمای کوره نشان می‌دهد که مدل توانسته است وابستگی‌های زمانی پیچیده فرآیند فرار حرارتی را به‌خوبی استخراج کند. این ویژگی برای توسعه

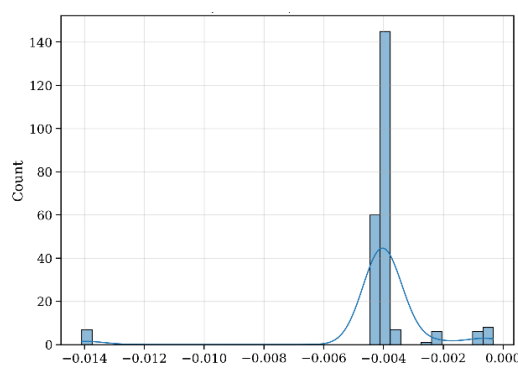
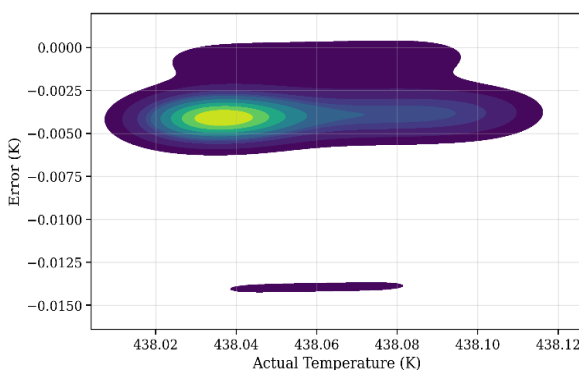
پس از تحلیل رفتار حرارتی سلول لیتیوم یون فرسوده تحت شرایط مختلف دمای کوره و ضرایب انتقال حرارت جابه‌جایی، در گام بعدی قابلیت یک شبکه عصبی بازگشتی از نوع حافظه بلند-کوتاه مدت برای پیش‌بینی روند زمانی دمای سطح سلول ارزیابی شد. با توجه به اینکه تحول دما در فرایند فرار حرارتی ماهیت به شدت غیرخطی داشته و به‌طور معناداری به تاریخچه زمانی سامانه وابسته است، به‌کارگیری مدل‌های دارای حافظه زمانی امکان مدل‌سازی وابستگی‌های دینامیکی و استخراج الگوهای نهفته در پاسخ حرارتی را فراهم می‌کند. در این چارچوب، داده‌های ورودی شبکه مستقیماً از پروفایل‌های گذرای دمای سطح استخراج شده از مدل عددی تولید شدند؛ به این معنا که ابتدا پارامترهای مرتبط با پیری در مدل فیزیکی تغییر داده شده و سپس تاریخچه دمای سطح متناظر با هر سناریو به‌عنوان داده سری زمانی مورد استفاده قرار گرفته است، بدون آنکه شاخص‌های پیری نظیر SOH یا پارامتر $CL_{i,0}$ به‌صورت صریح به شبکه تزریق شوند. برای تشکیل نمونه‌های آموزشی، از روش پنجره لغزان با طول $L=5$ استفاده شد؛ به‌طوری‌که در هر نمونه، شبکه یک توالی شامل پنج مقدار متوالی دما را دریافت کرده و مقدار دما در گام بعدی $T(k+5)$ را پیش‌بینی می‌کند. بدین ترتیب ورودی مدل به‌صورت تانسوری با ابعاد $R^{N \times 5 \times 1}$ تعریف می‌شود (طول توالی ۵ و یک ویژگی در هر گام زمانی). برای بهبود پایداری آموزش، داده‌ها با استانداردسازی نرمال‌سازی شده و معماری شبکه شامل یک لایه LSTM تک لایه با ۲۰۰ نرون پنهان و یک لایه تمام متصل برای نگاشت خروجی به مقدار دمای پیش‌بینی شده است؛ علاوه بر این، از یک اتصال باقیمانده استفاده شده است تا خروجی نهایی به‌صورت «اصلاح شده نسبت به آخرین مقدار مشاهده شده» تولید گردد. آموزش مدل با تابع هزینه میانگین قدر مطلق خط، بهینه‌ساز با منظم‌سازی و راهبرد کاهش نرخ یادگیری انجام شد و داده‌ها با اندازه دسته ۱۶ طی ۸۰۰ دوره آموزش داده شدند. این تنظیمات، ضمن حفظ ماهیت توالی محور مسئله، امکان ارزیابی دقیق توان مدل LSTM در بازتولید دینامیک دمای سطح سلول و استنباط ضمنی اثرات پیری از روی پاسخ حرارتی را فراهم می‌سازد. در این پژوهش، عملکرد مدل با استفاده از شاخص‌های آماری در پنج سناریوی مختلف دمای کوره ارزیابی شد. نتایج حاصل از ارزیابی مدل در جدول ۲ بر روی پنج مجموعه داده مختلف نشان‌دهنده

دمای سلول را با اطمینان بالا پیش‌بینی کرده و از بروز هشدارهای کاذب یا تأخیر در تشخیص فرار حرارتی جلوگیری کند.

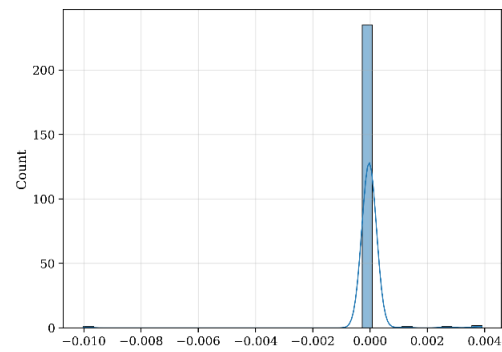
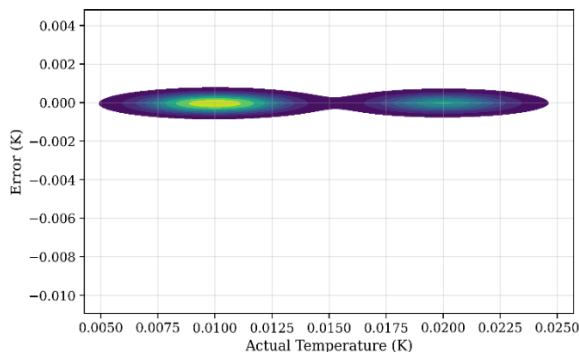
سامانه‌های هشدار زودهنگام از اهمیت بالایی برخوردار است، زیرا بیانگر آن است که مدل می‌تواند حتی در شرایط بحرانی نیز



$T_{Oven} = 418K$



$T_{Oven} = 438K$



$T_{Oven} = 458K$

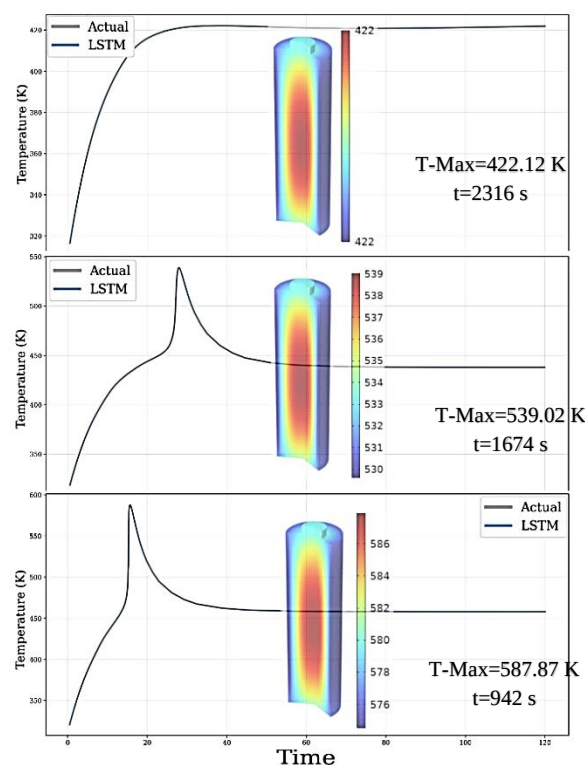
شکل (۷): تحلیل توزیع خطاهای مدل LSTM در پیش‌بینی دمای فرار حرارتی باتری لیتیوم‌یون فرسوده برای دماهای کوره ۴۱۸، ۴۳۸ و ۴۵۸ کلین. ستون سمت چپ، نمودارهای چگالی دوبعدی خطا بر حسب دمای واقعی و ستون سمت راست، هیستوگرام توزیع خطاهای پیش‌بینی.

دمای سلول به مقدار بیشینه ۴۲۲/۱۲ کلین در زمان ۲۳۱۶ ثانیه رسیده و بدون ورود به فرار حرارتی در حالت پایدار قرار می‌گیرد، درحالی‌که در دو سناریوی بعدی، وقوع فرار حرارتی موجب افزایش دمای بیشینه به ۵۳۹/۰۲ و ۵۸۷/۸۷ کلین و کاهش زمان رسیدن به این دما به ۱۶۷۴ و ۹۴۲ ثانیه شده است. این نتایج نشان می‌دهد که با تشدید شرایط حرارتی، زمان رسیدن به دمای بحرانی به‌ترتیب حدود ۲۸٪ و ۵۹٪ کاهش یافته،

همان‌گونه که در شکل ۸ مشاهده می‌شود، مدل LSTM توانسته است تاریخچه زمانی دمای سلول را در سه سناریوی مختلف با دقت بسیار بالا پیش‌بینی کند، به‌طوری‌که منحنی‌های پیش‌بینی‌شده تقریباً به‌طور کامل بر نتایج مرجع منطبق هستند. این تطابق نه‌تنها در مرحله گرمایش اولیه، بلکه در ناحیه کاملاً غیرخطی فرار حرارتی و مرحله کاهش دما پس از وقوع واکنش‌های گرمازا نیز حفظ شده است. در سناریوی نخست،

نتایج مدل فیزیکی نشان داد که دمای کوره و ضریب انتقال حرارت جابه جایی دو پارامتر کلیدی در کنترل فرار حرارتی هستند. افزایش دمای کوره از ۴۱۸ به ۴۵۸ کلین موجب افزایش دمای بیشینه سلول از ۴۲۲/۱۲ به ۵۸۷/۸۷ کلین (حدود ۳۹٪) و کاهش زمان رسیدن به دمای بیشینه از ۲۳۱۶ به ۹۴۲ ثانیه (حدود ۵۹٪) شد. همچنین، تحلیل سینتیکی نشان داد که در دماهای بالاتر، هم زمان شدن واکنش های گرمازا باعث افزایش نرخ آزادسازی انرژی و تشدید ناپایداری حرارتی سلول می شود. از سوی دیگر، نتایج نشان داد که شرایط انتقال حرارت محیطی نقش مهمی در تکامل فرار حرارتی دارد؛ به طوری که تغییر ضریب انتقال حرارت جابه جایی، زمان وقوع فرار حرارتی، نرخ گرمایش و روند تولید حرارت را به طور مستقیم تغییر می دهد. این نتایج اهمیت طراحی مناسب سامانه های مدیریت حرارتی و کنترل شرایط محیطی را برای کاهش احتمال وقوع فرار حرارتی و افزایش ایمنی باتری های لیتیوم یون فرسوده نشان می دهد. در بخش یادگیری ماشین، مدل LSTM با دقت بسیار بالایی توانست رفتار زمانی دمای سلول را پیش بینی کند. مقادیر MAE و RMSE به ترتیب تا ۰/۰۰۰۱ و ۰/۰۰۰۸ کاهش یافت و مقادیر R^2 و NSE در تمامی سناریوها بیش از ۰/۹۵ و حداکثر ۰/۹۹۹۰ به دست آمد. همچنین، هم پوشانی کامل منحنی های پیش بینی و مرجع و تمرکز خطاها در اطراف صفر، بیانگر قابلیت بالای مدل در یادگیری رفتارهای غیرخطی فرار حرارتی است. در مجموع، چارچوب پیشنهادی می تواند به عنوان ابزاری قابل اعتماد برای پیش بینی فرار حرارتی، توسعه سامانه های هشدار زودهنگام و بهبود مدیریت حرارتی باتری های لیتیوم یون فرسوده مورد استفاده قرار گیرد.

در حالی که دمای بیشینه سلول به ترتیب حدود ۲۸٪ و ۳۹٪ افزایش یافته است. علاوه بر انطباق کامل منحنی های دما، کانتورهای حرارتی نیز نشان می دهند که با افزایش شدت فرار حرارتی، ناحیه دمای بالا و گرادیان حرارتی داخل سلول به طور محسوسی گسترش می یابد که بیانگر افزایش نرخ آزادسازی انرژی ناشی از واکنش های گرمازا داخلی است. توانایی مدل LSTM در پیش بینی هم زمان روند زمانی دما، دمای بیشینه و زمان وقوع آن، بیانگر قابلیت بالای این مدل در یادگیری رفتارهای غیرخطی و وابستگی های زمانی فرآیند فرار حرارتی است. از این رو، مدل توسعه یافته می تواند به عنوان ابزاری قابل اعتماد برای پیش بینی رفتار حرارتی باتری های لیتیوم یون فرسوده و توسعه سامانه های مدیریت باتری و هشدار زودهنگام فرار حرارتی مورد استفاده قرار گیرد.



شکل (۸): مقایسه دمای (سطح سلول) پیش بینی شده توسط مدل LSTM با نتایج عددی برای سه سناریوی تغییرات دمای کوره مختلف در فرآیند فرار حرارتی باتری لیتیوم یون فرسوده.

۹. نتیجه

در این پژوهش، یک چارچوب یکپارچه مبتنی بر مدل سازی چندفیزیکی و شبکه عصبی LSTM برای تحلیل و پیش بینی رفتار فرار حرارتی باتری لیتیوم یون فرسوده ۱۴۵۰۰ توسعه داده شد.

مراجع

[1] Guo, Q., Zhang, J., Zho, C., Huang, Z., Han, D., "Thermal runaway behaviors and kinetics of NCM Lithium-ion batteries at different heat dissipation conditions," Journal of The Electrochemical Society, Vol. 170, N. 8, p. 080507. 2023, <https://doi.org/10.1149/1945-7111/aceb35>.

[2] Mrozik, W., McDonald, J., Shuttleworth, E., Ankowski, A., "Comparative safety analysis of current and next-generation battery technologies," Journal of Power Sources, Vol. 670. p. 239428. 2026, <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2026.239428>.

[3] Lai, M., Lu, J., Ge, X., "Analytical study on highway thermal runaway propagation and inter-electrode dynamics in lithium-ion battery applications: Insights into battery safety," Process Safety and Environmental Protection, Vol. 190. pp. 688-707. 2024, <https://doi.org/10.1016/j.psep.2024.08.024>.

[4] Swamy, D., Sarkar, S., Amin, M. T., Vaddiraju, S., Khan, F., "Analysis of Lithium-Ion Battery Thermal Runaway Models to Design Battery Safety Management Systems," Computers & Chemical Engineering. p. 109590. 2026, <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2026.109590>.

[5] Wang, P., Xu, C., Xu, H., Jin, S., Jiang, F., Feng, X., "Thermal safety optimization in 628 Ah LiFePO4 batteries: Experimental and modeling study on thermal runaway propagation inhibition via size effects and internal barrier design," Journal of Energy Storage, Vol. 141. p. 119376. 2026, <https://doi.org/10.1016/j.est.2025.119376>.

[6] Wang, J., Wang, C., Sun, R., Han, C., Li, K., Zhang, L., Zhang, Y., Guo, D., Li, S., Wang, Z., "Thermal runaway and jet flame features of 314 Ah lithium iron phosphate battery: Mechanism exploration and safety assessment," Applied Thermal Engineering, Vol. 272. p. 126371. 2025, <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2025.126371>.

ضمائم

جدول علائم و نشانه‌ها	
نماد	عنوان
A_i	ضریب پیش‌نمایی یا ضریب فرکانس واکنش‌ها (s^{-1})
$E_{a,i}$	انرژی فعال‌سازی واکنش ($J mol^{-1}$)
R_i	نرخ واکنش (s^{-1})
c	غلظت بدون بُعد گونه‌های واکنش‌پذیر (-)
C_{loss}	افت ظرفیت سلول (Ah)
C_{ini}	ظرفیت اولیه سلول (Ah)
H_i	گرمای ویژه آزادشده از واکنش / آنتالپی ویژه واکنش ($J kg^{-1}$)
W_i	محتوای حجمی ماده فعال در سلول ($kg m^{-3}$)
$\dot{Q}_i$	نرخ تولید گرمای حجمی ناشی از واکنش‌های تجزیه ($W m^{-3}$)
m	مرتبه واکنش (-)
T	دما (K)
δ	ضخامت فیزیکی (m)
k	ضریب هدایت حرارتی مؤثر ($W m^{-1} K^{-1}$)
h	ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی ($W m^{-2} K^{-1}$)
C_p	گرمای ویژه میانگین سلول ($J kg^{-1} K^{-1}$)
علائم یونانی	
α	درجه تبدیل یا پیشرفت واکنش ماده فعال الکتروود مثبت (-)
ρ	چگالی مؤثر ($kg m^{-3}$)
ε	گسیلندگی سطح سلول (-)
σ	ثابت استفان-بولتزمن ($W m^{-2} K^{-4}$)
نماد	عنوان
زیرنویس	
SEI	لایه فصل مشترک الکترولیت جامد
pe	الکتروود مثبت
ne	الکتروود منفی
e	الکترولیت
Li	لیتیوم رسوب‌کرده
0	مقدار اولیه / مرجع
TR	فرار حرارتی
surf	سطح سلول
amb	محیط اطراف

- [7] Wang, Y., Nie, Z., Xiao, C., Li, W., Liu, Z., "Multi-scale quantitative characterization of thermal runaway in high-nickel prismatic lithium-ion batteries and an integrated safety mitigation strategy," *Journal of Power Sources*, Vol. 689. p. 240737. 2026, <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2026.240737>.
- [8] Yang, W., Luo, Z., Deng, J., Zhang, Y., Ji, X., Yu, Y., Zhao, J., "Solvent selection for high-safety lithium-ion batteries: Unravelling the divergent mechanisms of EC/EMC and EC/DMC governing thermal runaway hazard severity," *Chemical Engineering Journal*. p. 174897. 2026, <https://doi.org/10.1016/j.cej.2026.174897>.
- [9] Qin, Y., Liu, Z., Sun, Y., Ye, H., Zhou, Q., Qinzhen, W., Feng, X., Wang, H., "Dynamic ejection phenomenon and modeling of velocity driven by internal pressure in thermal runaway of high-capacity NCM523 lithium-ion batteries: Advancing safety design and fire accident investigation," *Applications in Energy and Combustion Science*. p. 100467. 2026, <https://doi.org/10.1016/j.jaecs.2026.100467>.
- [10] Jia, Z., Min, Y., Qin, P., Mei, W., Meng, X., Jin, K., Sun, J., Wang, Q., "Effect of safety valve types on the gas venting behavior and thermal runaway hazard severity of large-format prismatic lithium iron phosphate batteries," *Journal of Energy Chemistry*, Vol. 89. pp. 195-207. 2024, <https://doi.org/10.1016/j.jechem.2023.09.052>.
- [11] Liu, C., Liu, Y., Cheng, Z., Li, Y., Liu, P., Liu, L., Min, Y., Duan, Q., Mei, W., Wang, Q., "Experimental study on the impact of safety valve venting pressure on thermal runaway in large-format lithium iron phosphate battery," *Process Safety and Environmental Protection*. p. 107563. 2025, <https://doi.org/10.1016/j.psep.2025.107563>.
- [12] Xu, Y., Wang, Y., Chen, X., Pang, K., Deng, B., Han, Z., Shao, J., Qian, K., Chen, D., "Thermal runaway and soot production of lithium-ion batteries: Implications for safety and environmental concerns," *Applied Thermal Engineering*, Vol. 248. p. 123193. 2024, <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2024.123193>.
- [13] Yuan, W., Liang, D., Chu, Y., Wang, Q., "Aging effect delays overcharge-induced thermal runaway of lithium-ion batteries," *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, Vol. 79. p. 104830. 2022, <https://doi.org/10.1016/j.jlp.2022.104830>.
- [14] Liu, J., Wang, Z., Bai, J., Gao, T., Mao, N., "Heat generation and thermal runaway mechanisms induced by overcharging of aged lithium-ion battery," *Applied Thermal Engineering*, Vol. 212. p. 118565. 2022, <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2022.118565>.
- [15] Zhang, L., Liu, L., Terekhov, A., Warnberg, D., Zhao, P., "Thermal runaway of Li-ion battery with different aging histories," *Process Safety and Environmental Protection*, Vol. 185. pp. 910-917. 2024, <https://doi.org/10.1016/j.psep.2024.03.077>.
- [16] Sun, S., Brown, W., Tan, X., Rui, B., Xiong, G., Wang, Y., Zeng, D., Xu, J., "Aging matters: How degradation pathways govern thermal runaway in lithium-ion batteries," *Journal of Energy Chemistry*. 2025, <https://doi.org/10.1016/j.jechem.2025.09.093>.
- [17] Zhang, J., Li, Y., Ma, L., "Study on the effect of aging on thermal runaway behavior of lithium-ion batteries under different heating positions," *Applied Thermal Engineering*. p. 127793. 2025, <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2025.127793>.
- [18] Nie, B., Dong, Y., Chang, L., Zeng, L., "Experimental investigation of cycling aging effects on degradation and thermal runaway characteristics of 18650 lithium-ion batteries," *Journal of Energy Storage*, Vol. 134. p. 118171. 2025, <https://doi.org/10.1016/j.est.2025.118171>.
- [19] Goswami, B. R. D., Abdissobbouhi, Y., Du, H., Mashayek, F., Kingston, T. A., Yurkiv, V., "Advancing battery safety: Integrating multiphysics and machine learning for thermal runaway prediction in lithium-ion battery module," *Journal of Power Sources*, Vol. 614. p. 235015. 2024, <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2024.235015>.
- [20] Tian, Y., Lin, C., Li, H., Du, J., Xiong, R., "Deep neural network-driven in-situ detection and quantification of lithium plating on anodes in commercial lithium-ion batteries," *EcoMat*, Vol. 5, N. 1, p. e12280. 2022, <https://doi.org/10.1002/eom2.12280>.

- [21] Hong, J., Wang, Z., Liu, P., "Big-Data-Based Thermal Runaway Prognosis of Battery Systems for Electric Vehicles," *Energies*, Vol. 10, N. 7, p. 919. 2017, <https://doi.org/10.3390/en10070919>.
- [22] S.W. Kim, E. Kwak, J.-H. Kim, K.-Y. Oh, S. Lee, "Modeling and prediction of lithium-ion battery thermal runaway via multiphysics-informed neural network," *Journal of Energy Storage*, Vol. 60. p. 106654. 2023, <https://doi.org/10.1016/j.est.2023.106654>.
- [23] Nazari, A., Kavian, S., and Nazari, A., "Lithium-ion batteries' energy efficiency prediction using physics-based and state-of-the-art artificial neural network-based models," *Journal of Energy Resources Technology*, Vol. 142, N. 10, p. 102001. 2020, <https://doi.org/10.1115/1.4047313>.
- [24] Zhao, L., Zheng, M., Zhang, J., Liu, H., Li, W., Chen, M., "Numerical modeling of thermal runaway for low temperature cycling lithium-ion batteries," *Journal of Energy Storage*, Vol. 63. p. 107053. 2023, <https://doi.org/10.1016/j.est.2023.107053>.
- [25] Hatchard, T. D., MacNeil, D. D., Basu, A., Dahn, J. R., "Thermal Model of Cylindrical and Prismatic Lithium-Ion Cells," *Journal of The Electrochemical Society*, Vol. 148, N. 7, p. A755. 2001, <https://doi.org/10.1149/1.1377592>.
- [26] Kim, G.-H., Pesaran, A., Spotnitz, R., "A three-dimensional thermal abuse model for lithium-ion cells," *Journal of Power Sources*, Vol. 170, N. 2, pp. 476-489. 2007, <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2007.04.018>.
- [27] Abada, S., Petit, M., Lecocq, A., Marlair, G., Sauvart-Moynot, V., Huet, F., "Combined experimental and modeling approaches of the thermal runaway of fresh and aged lithium-ion batteries," *Journal of Power Sources*, Vol. 399. pp. 264-273. 2018, <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2018.07.094>.
- [28] Abada, S., "Compréhension et modélisation de l'emballage thermique de batteries Li-ion neuves et vieilles," Université Pierre et Marie Curie (Paris VI), 2016. <https://theses.hal.science/tel-01596035>.
- [29] Spotnitz, R., Franklin, J., "Abuse behavior of high-power, lithium-ion cells," *Journal of Power Sources*, Vol. 113, N. 1, pp. 81-100. 2003, [https://doi.org/10.1016/s0378-7753\(02\)00488-3](https://doi.org/10.1016/s0378-7753(02)00488-3).
- [30] Peng, P., Jiang, F., "Thermal safety of lithium-ion batteries with various cathode materials: A numerical study," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 103. pp. 1008-1016. 2016, <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.07.088>.
- [31] Delaille, A., Grolleau, S., Duclaud, F., Bernard, J., Revel, R., Pelissier, S., Redondo-Iglesias, E., Vinassa, J.-M., Eddahech, A., Forgez, C., Published, "SIMCAL Project: calendar aging results obtained on a panel of 6 commercial Li-ion cells," *ECS Meeting Abstracts*, Vol. MA2013-02, N. 14, p. 1191, 2013. <https://doi.org/10.1149/MA2013-02/14/1191>.
- [32] Li, Y., Gao, X., Feng, X., Ren, D., Li, Y., Hou, J., Wu, Y., Du, J., Lu, L., Ouyang, M., "Battery eruption triggered by plated lithium on an anode during thermal runaway after fast charging," *Energy*, Vol. 239. p. 122097. 2022, <https://doi.org/10.1016/j.energy.2021.122097>.
- [33] Ren, D., Feng, X., Lu, L., Ouyang, M., Zheng, S., Li, J., He, X., "An electrochemical-thermal coupled overcharge-to-thermal-runaway model for lithium ion battery," *Journal of Power Sources*, Vol. 364. pp. 328-340. 2017, <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2017.08.035>.
- [34] Örs, E. F., Javani, N., "Early detection of thermal runaway in lithium-ion batteries under extreme conditions using phase change materials," *Thermal Science and Engineering Progress*, Vol. 70. p. 104502. 2026 <https://doi.org/10.1016/j.tsep.2026.104502>.
- [35] Armstrong, J. S., Collopy, F., "Error measures for generalizing about forecasting methods: Empirical comparisons," *International journal of forecasting*, Vol. 8, N. 1, pp. 69-80. 1992, [https://doi.org/10.1016/0169-2070\(92\)90008-W](https://doi.org/10.1016/0169-2070(92)90008-W).