



Simulation and performance analysis of a high-energy-density lithium-sulfur battery under cold start and standard european driving cycle conditions in an electric vehicle

Arshia Naseh, Arash Mohammadi^{*}, Karim Maghsoudi Mehrban

Department of Mechanical Engineering, Shahid Rajaei Teacher Training University, Tehran, Iran

ARTICLE INFO

Keywords:

Lithium-Sulfur Battery
High Energy Density
NTGK Model
Cold Start
NEDC

ABSTRACT

Lithium-sulfur batteries have attracted significant attention as a promising option in the energy storage industry, particularly for electric vehicles, due to their high energy density, low weight and low production cost. One of the main challenges faced by batteries used in electric vehicles is their performance during cold start condition which involve low temperatures and high output current simultaneously. Additionally, in order to evaluate battery performance under real driving condition-consisting of repeated cycles of acceleration, braking and constant speed- the use of the New European Driving Cycle (NEDC) can be useful. In this study, a 3.4 Ah lithium-sulfur battery was numerically simulated using the NTGK model within the ANSYS Fluent software. The purpose of the study is to investigate the thermal and electrochemical behavior of the battery simultaneously and to utilize the results for the design of a battery management system. The NTGK model requires fewer input parameters compared to other models and demonstrates acceptable accuracy in predicting battery behavior. Model validation was performed by comparing voltage versus discharge capacity curves at discharge rates of 0.2C, 0.5C, and 1.5C, with maximum deviations of 11.1%, 6.48%, and 3.07%, respectively. The corresponding temperature rises at these rates were 0.4, 2.2, and 8 K. In the cold start test, the maximum instantaneous voltage drop was 0.76 V, and the highest temperature increase was only 0.6 K. Moreover, after applying ten NEDC cycles, the remaining state of charge (SOC) of the battery was 51%, which is significantly higher compared to two other lithium-ion batteries with final SOC's of 13.3% and 28.5%. The minimum instantaneous voltage drop observed in this test for the lithium-sulfur battery was 0.67 V, whereas it was 0.9 V and 1.2 V for the other batteries. These results confirm the stable performance and favorable thermal behavior of the lithium-sulfur battery under realistic operating conditions.



© 2025 Iranian Society of Engine, Tehran, Iran. This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license). (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).

^{*} Corresponding author

E-mail address: amohammadi@sru.ac.ir (A. Mohammadi)

Received 1 June 2025; Accepted 4 November 2025

E-ISSN: 2345-4121/ISSN: 1735-5214

Cite this article: Naseh A, Mohammadi A, Maghsoudi Mehrban K. Simulation and performance analysis of a high-energy-density lithium-sulfur battery under cold start and standard european driving cycle conditions in an electric vehicle. 2025 Nov 22;72(3):24-42. doi: [10.22034/ER.2025.2059766.1092](https://doi.org/10.22034/ER.2025.2059766.1092)

شبیه‌سازی و تحلیل عملکرد انباره لیتیوم گوگرد با چگالی انرژی بالا در شرایط راه‌اندازی سرد و چرخه رانندگی اروپا در خودرو برقی

ارشیا ناصح، آرش محمدی*، کریم مقصودی مهربان

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، تهران، ایران

چکیده	اطلاعات مقاله
<p>انباره‌های لیتیوم‌گوگرد به دلیل چگالی انرژی بالا، وزن کم و هزینه تولید ارزان، به عنوان یکی از گزینه‌های آینده‌دار در صنعت ذخیره‌سازی انرژی بویژه برای خودروهای برقی، مورد توجه قرار گرفته‌اند. از جمله چالش‌هایی که برای انباره‌های مورد استفاده در خودروهای برقی وجود دارد، عملکرد در شرایط راه‌اندازی سرد (دمای محیط پایین و جریان خروجی زیاد بصورت همزمان) است. همچنین به منظور بررسی عملکرد انباره در شرایط رانندگی واقعی که شامل چرخه‌های متناوب شتابگیری، ترمزگیری و سرعت یکنواخت است، استفاده از منحنی استاندارد رانندگی اروپا می‌تواند مفید باشد. در این پژوهش، یک انباره لیتیوم‌گوگرد با ظرفیت ۳٫۴ آمپر ساعت با استفاده از نوع NTGK در محیط نرم‌افزار انسیس فلونت به صورت عددی شبیه‌سازی شده است. هدف از این مطالعه، بررسی همزمان رفتار حرارتی و الکتروشیمیایی انباره و استفاده از نتایج برای طراحی سامانه مدیریت انباره است. نوع NTGK با نیاز به متغیرهای ورودی کمتر، دقت مناسبی در پیش‌بینی رفتار انباره دارد. اعتبارسنجی طرح با مقایسه نمودار ولتاژ برحسب ظرفیت تخلیه‌شده در نرخ‌های 0.2C، 0.5C و 1.5C انجام شد که بیشترین اختلاف آن‌ها بترتیب ۱۱٫۱، ۶٫۴۸، ۳٫۰۷ درصد گزارش شده است. افزایش دمای انباره در این نرخ‌ها بترتیب برابر با ۰٫۴، ۲٫۲ و ۸ کلون بوده است. در آزمایش راه‌اندازی سرد، بیشترین افت ولتاژ لحظه‌ای برابر با ۰٫۷۶ ولت و بیشترین افزایش دما تنها ۰٫۶ کلون ثبت شد. همچنین، با اعمال ده چرخه رانندگی اروپا، سطح تغذیه باقی‌مانده انباره به ۵۱ درصد رسید که در مقایسه با دو انباره لیتیومیون دیگر با تغذیه نهایی ۱۳٫۳ درصد و ۲۸٫۵ درصد، عملکرد بهتری نشان داد. کمترین افت ولتاژ لحظه‌ای در این آزمون برای انباره لیتیوم‌گوگرد برابر با ۰٫۶۷ ولت بود، در حالی که برای انباره‌های دیگر ۰٫۹ و ۱٫۲ ولت ثبت شد. این نتایج، عملکرد پایدار و حرارتی مناسب این نوع انباره را در شرایط واقعی عملیاتی تأیید می‌کنند.</p>	<p>کلیدواژه‌ها: انباره لیتیوم‌گوگرد چگالی انرژی بالا نوع NTGK راه‌اندازی سرد چرخه رانندگی اروپا</p>



© 2025 Iranian Society of Engine, Tehran, Iran. This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution Non-Commercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license). (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).

* نویسنده مسئول

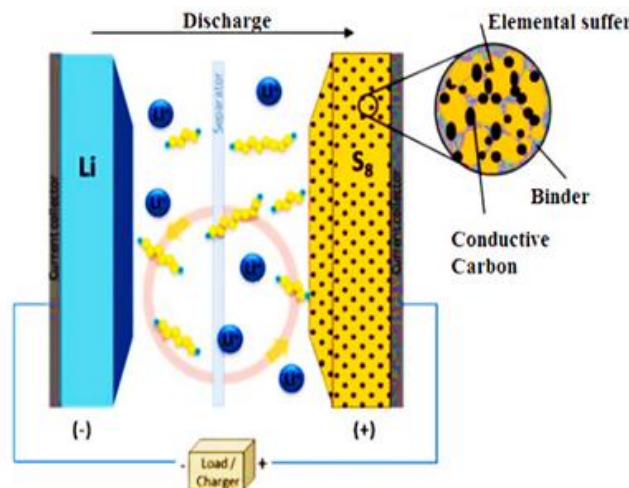
پست الکترونیکی: amohammadi@sru.ac.ir (آرش محمدی)

دریافت ۱۱ خرداد ۱۴۰۴؛ پذیرش ۱۳ آبان ۱۴۰۴

شاپای الکترونیکی: ۴۱۲۱-۲۳۴۵ / شاپای چاپی: ۵۲۱۴-۱۷۳۵

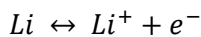
۱- مقدمه

در بخش حمل و نقل، گذر از خودروهای دورگه به خودروهای تمام برقی نیازمند توسعه سامانه‌های ذخیره‌سازی انرژی برق با منابعی است که دارای چگالی انرژی بالاتر، چگالی قدرت بیشتر، دوام طولانی‌تر و هزینه کمتر هستند [۱]. در میان منابع انرژی مختلف، انباره‌های لیتیومیون از بهترین راه‌حل‌های موجود هستند. اما این انباره‌ها قادر به تأمین نیازهای انرژی آینده برای سامانه‌های پیشرفته حمل و نقل نخواهند بود [۲]. انباره‌های لیتیوم‌گوگرد با ظرفیت اسمی 300 mAh/g و چگالی انرژی 2600 Wh/kg می‌توانند جایگزین آینده انباره‌های لیتیومیونی با حداکثر ظرفیت اسمی 1672 mAh/g و چگالی انرژی حدود 250 Wh/kg باشند [۳، ۴]. بعلاوه، گوگرد نسبت به سایر عناصر مورد استفاده در انباره‌های لیتیومیون، در پوسته زمین فراوان‌تر است. برای مثال مقدار فراوانی گوگرد و کبالت در پوسته زمین بترتیب، 0.042% درصد و 0.003% درصد است. همچنین، گوگرد نسبت به فلزات سنگین مورد استفاده در انباره‌های لیتیومیون، اثرات زیست محیطی کمتری دارد. از طرفی، این انباره‌ها دارای امنیت بیشتری نسبت به انباره‌های لیتیومیونی هستند [۴]. به طور کلی ساختار این انباره‌ها متشکل از فلز لیتیوم به عنوان قطب منفی^۱، جداکننده پلیمری متخلخل، محلول رسانا^۲ مایع شامل نمک‌های لیتیومی و ترکیبی از گوگرد به عنوان قطب مثبت^۳ است. در شکل ۱ نمونه‌ای از این ساختار قابل مشاهده است.



شکل ۱ طرح ساختار انباره لیتیوم‌گوگرد

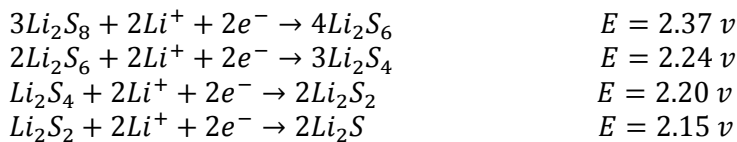
در حین تخلیه، واکنش اکسایش زیر در سمت قطب منفی رخ می‌دهد.



الکترون آزاد شده در این واکنش، از طریق مدار خارجی به مقاومت بار وارد می‌شود و به سمت کاتد می‌رود. لیتیوم با بار مثبت نیز در سمت قطب منفی، بصورت محلول وارد الکترولیت می‌شود. با ورود الکترون به قطب مثبت، واکنش کاهش در آن رخ می‌دهد و در طی چند مرحله کاهش، گوگرد (S_8) به چندسولفیدهای^۴ (Li_2S) تبدیل می‌شود. محلول الکترولیت نیز دارای یون‌های لیتیوم با بار مثبت است که بتواند به جریان یونی کمک کند و منجر به ادامه واکنش‌های اکسایش-کاهش در سمت الکترودها شود [۵]. واکنش‌های انجام شده بترتیب بدین صورت اند:



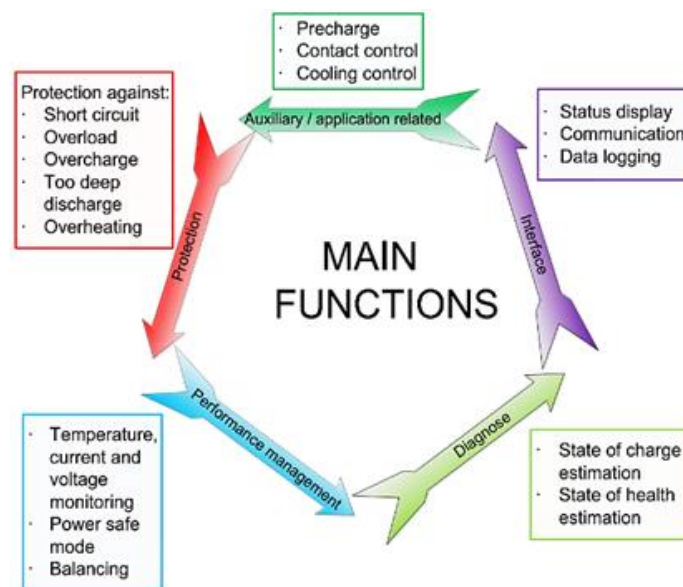
1 Anode
2 Electrolyte
3 Cathode
4 Polysulfide



بطور کلی، قیمت پایین، فراوانی گوگرد، امنیت بالا، گسترده بودن بازه دمای کاری و چگالی انرژی و توان بالا را می‌توان از اصلی‌ترین مزایای این انبارةها برشمرد [۶].

از طرفی، خاصیت ذاتی عایق بودن گوگرد، انحلال‌پذیری آسان محصولات واکنش‌های میانی، تغییر حجم گوگرد در کاتد و رشد شاخه‌های^۱ لیتیوم بر سطح قطب منفی از مشکلاتی است که محققین زیادی در تلاش برای رفع آن‌ها هستند [۷].

سامانه مدیریت انبارةها در خودروهای برقی بصورت کلی، وظیفه نگهداری و کنترل به منظور عملکرد ایمن آن‌ها در جریان و ولتاژ بالا را بر عهده دارد [۸]. عملکرد این سامانه در شکل ۲ نشان داده شده است. سه مشخصه بصورت مستقیم اندازه‌گیری می‌شوند؛ ولتاژ، جریان و دما. این سامانه باید توزیع دما را در کل مجموعه انبارة یکنواخت نگه‌دارد زیرا انبارةهای داغ‌تر، افت ظرفیت بیشتری خواهند داشت. از طرفی، به منظور یکسان بودن تعداد چرخه‌های عمر انبارةها و جلوگیری از عدم تعادل در مجموعه، مقدار سطح تغذیه در تمامی انبارةها باید یکسان باشد [۹].



شکل ۲ وظایف و عملکرد سامانه مدیریت انبارة [۱۰]

۲- پیشینه تحقیق

در سال ۲۰۰۶، کرمی و همکاران آزمون راه‌اندازی سرد را بر روی ۱۷ انبارة سرب اسیدی با صفحات سرب-کلسیم در دمای ۱۸- درجه سانتی‌گراد انجام دادند. در این پژوهش، ولتاژ خروجی انبارة در مدت ۱۰ ثانیه تخلیه، ولتاژ در زمان‌های ۳۰، ۶۰ و ۹۰ ثانیه و همچنین مدت زمان رسیدن به ولتاژ ۶ ولت، به عنوان نقاط بحرانی بررسی شد. برای شبیه‌سازی رفتار ولتاژ نسب به زمان از شبکه عصبی مصنوعی در محیط نرم‌افزار متلب^۲ استفاده شد. حداکثر خطای مدل کمتر از ۳٫۵ درصد بود که نشان از دقت بالای آن در پیش‌بینی رفتار راه‌اندازی سرد انبارة است [۱۱].

در سال ۲۰۱۴، بروکنر و همکاران به بررسی اثر نرخ تخلیه و درصد وزنی گوگرد و الکترولیت بر عملکرد چرخه‌ای

¹ Dendrites

² MATLAB

انباره‌های لیتیوم‌گوگرد پرداختند. در این مقاله، نشان داده شد که چگونه مقدار محلول رسانا و گوگرد، مقدار زیاد لیتیوم و نرخ تخلیه بر پایداری چرخه و مقدار مصرف گوگرد تأثیر می‌گذارد. درصد وزنی گوگرد قطب مثبت از ۲۰ تا ۸۰ درصد وزنی متغیر بود. همچنین از ساختارهای نانولوله‌های کربنی قرار گرفته بصورت عمودی به عنوان ساختار میزبان در قطب مثبت استفاده شد. نتایج نشان داد که عملکرد چرخه‌ای در نرخ‌های تخلیه بالا (مثل ۲/۵ C) و درصد وزنی گوگرد پایین (مانند ۲۰ درصد) بسیار پایدارتر است و ظرفیت ۱۱۹۰ mAh به ازای هر گرم گوگرد تا حدود ۲۰۰ چرخه حفظ شد. همچنین مشخص شد که ظرفیت تخلیه نمونه‌های با ۸۰ درصد گوگرد تقریباً صفر است [۱۲].

در سال ۲۰۱۷، پراپ و همکاران به منظور تخمین سطح تغذیه انباره‌های لیتیوم‌گوگرد از سه روش صافی کالمن توسعه یافته، صافی کالمن خنثی و صافی ذرات استفاده کردند. برای برآورد عملکرد سه روش، نتایج تجربی شامل آزمایش تخلیه پالس و آزمایشی بر اساس چرخه راندگی اروپا انجام شد. سه سطح تغذیه اولیه ۱۰۰، ۷۰ و ۶۰ درصد در نظر گرفته شد. در سطح تغذیه اولیه ۶۰ درصد، روش صافی کالمن خنثی بهترین عملکرد را از خود نشان داد. زمان شبیه‌سازی برای الگوهای صافی کالمن توسعه یافته، صافی کالمن خنثی و صافی ذرات برای آزمایش تخلیه پالس بترتیب برابر ۷،۹۷، ۲۱،۵۴ و ثانیه بود. با وجود زمان بیشتر شبیه‌سازی برای روش صافی ذرات، نتایج آن از دقت پایینی برخوردار بودند. در نهایت، بهترین روش معرفی شده توسط نویسندگان، صافی کالمن خنثی بود [۱۳].

در سال ۲۰۱۸، مستعلی و همکاران به شبیه‌سازی الکتروشیمیایی- حرارتی انبارة لیتیوم آهن فسفات پرداختند. ظرفیت این انبارة ۲۰ آمپر ساعت و دارای ۴۸ لایه الکتروود بود. انبارة تحت چرخه‌های تغذیه و تخلیه جریان ثابت به اندازه 1C تا 5C در دمای اتاق، قرار گرفت. نتایج شبیه‌سازی تطابق خوبی با نتایج تجربی نشان داد. نشان داده شد که تغییرات دما بین سطح سلول تا لایه‌های مرکزی سلول قابل توجه نیست و به اندازه ۱،۷ درجه سانتی‌گراد در نرخ تخلیه 5C است [۱۴].

در سال ۲۰۲۱، زنگ و همکاران یک رویکرد مدل‌سازی حلقه بسته برای ارزیابی عملکرد انبارة لیتیوم‌گوگرد با بهره‌گیری از تحقیقات آزمایشگاه و به منظور افزایش مقیاس و استفاده در خودروهای برقی بوجود آوردند. همچنین به منظور اعتبارسنجی مدل، مقایسه‌ای با انباره‌های لیتیوم‌یون مورد استفاده در خودروهای برقی انجام شد. یکی از نتایج مهم مربوط به آزمایش تغذیه سریع از سطح تغذیه ۲۰ الی ۸۰ درصد بود. برای مجموعه انبارة لیتیوم‌یون، این افزایش سطح تغذیه، ۲۶۸۱ ثانیه و برای انبارة لیتیوم‌گوگرد ۵۰۸ ثانیه طول کشید [۱۵].

در سال ۲۰۲۳، باکنج و همکاران عملکرد شش انبارة شامل دو نمونه انبارة سرب اسیدی و چهار نمونه انبارة لیتیوم آهن فسفات را در دماهای ۲۵ تا ۳۰- درجه سانتی‌گراد بررسی کردند. نتایج آزمون ظرفیت نشان داد که انباره‌های لیتیوم آهن فسفات در دمای ۱۸- درجه سانتی‌گراد فقط ۹ الی ۱۸ درصد افت ظرفیت داشتند. اما، انباره‌های سرب اسیدی افت ظرفیت بیشتری در حدود ۴۹ الی ۵۹ درصد را تجربه کردند. در آزمون راه‌اندازی سرد، طبق استاندارد اروپا، انباره‌های سرب اسیدی تا دمای ۱۸- درجه سانتی‌گراد عملکرد قابل قبولی داشتند. انباره‌های لیتیوم آهن فسفات، فقط تا دمای ۱۰- درجه سانتی‌گراد قادر به تأمین جریان مورد نیاز بودند. فقط دو نمونه از این انباره‌ها توانستند در دمای ۱۸- درجه سانتی‌گراد آزمون راه‌اندازی سرد را با موفقیت بگذرانند. پیشنهاد می‌شود که برای مقایسه دقیق‌تر، آزمون راه‌اندازی سرد به جای جریان خروجی بر اساس توان یا انرژی تعریف شود [۱۶].

در سال ۲۰۲۴، بای و همکاران به بررسی سه‌بعدی حرارتی-آهنربایی-الکتروشیمیایی وابسته شده انبارة لیتیوم یونی و کاربرد آنها در نظارت بر سلامت انبارة و شناسایی عیوب آن به هنگام کارکرد پرداختند. مجموعه انبارة ۱۸۶۵۰ برای این کار در نظر گرفته شد. نتایج نشان داد که در شرایط اتصال کوتاه داخلی، افزایش غیر طبیعی به اندازه ۵ μT در میدان آهنربایی در نزدیکی محل اتصال کوتاه رخ می‌دهد. در حالت وجود شکستگی یا ترک، میدان آهنربایی در انتهای دو سر ترک بطور غیر طبیعی بیشتر است [۱۷].

در سال ۲۰۲۵، هیو و همکاران، در مقاله‌ای مروری راهبردهایی برای بهبود عملکرد انرژی و توان انباره‌های لیتیوم-

گوگرد را بررسی کردند که شامل افزایش درصد وزنی گوگرد تا ۷۰ درصد و حفظ چگالی توان در نرخ‌های تخلیه بالاتر از ۵C بود. انباره‌های لیتیوم‌گوگرد علی‌رغم داشتن چگالی انرژی بسیار بالا تا ۲۶۰۰ Wh/kg و مزایایی مثل سازگاری با محیط زیست و هزینه ارزان، به علت مشکلاتی نظیر اثر شاتل پلی‌سولفیدها و رشد شاخه‌ای لیتیوم بصورت گسترده تجاری‌سازی نشده‌اند. در این مطالعه، طراحی بهینه ساختار الکتروود، به‌کارگیری مواد رسانای مناسب، کاهش نسبت الکتروولیت به گوگرد و استفاده از الکتروولیت‌های چندمنظوره از استراتژی‌های بهبود عملکرد انباره‌های لیتیوم‌گوگرد شناخته شد [۱۸].

انباره‌های لیتیوم‌گوگرد با داشتن چگالی انرژی بالا، گزینه‌ای بسیار مناسب برای کاربردهای حمل و نقل خصوصاً خودروهای برقی، محسوب می‌شوند. این ویژگی، انگیزه مضاعفی برای توسعه و شبیه‌سازی آن‌ها بوجود می‌آورد. باتوجه به اینکه انباره‌های لیتیوم‌گوگرد هنوز بصورت گسترده تجاری‌سازی نشده‌اند و در مرحله تحقیق و توسعه قرار دارند؛ در این مطالعه، یک انباره لیتیوم‌گوگرد با ظرفیت ۳،۴ آمپر ساعت بصورت عددی در نرم‌افزار فلوئنت^۱ و به کمک نوع NTGK شبیه‌سازی شده است. نوآوری این تحقیق در محاسبه متغیرهای لازم برای نوع NTGK و شبیه‌سازی رفتار الکتروشیمیایی-حرارتی انباره لیتیوم‌گوگرد بصورت همزمان است. نوع NTGK، نسبت به سایر روش‌ها نیاز به اطلاعات ورودی کمتری داشته و نتایجی کاربردی در خروجی ارائه می‌دهد. اعتبارسنجی به کمک متغیر ولتاژ برحسب ظرفیت مصرف‌شده انجام شد. در نهایت، انباره تحت شرایط چرخه رانندگی اروپا^۲ و راه‌اندازی سرد برای کاربرد خودروی برقی قرار گرفت.

۳- معادلات حاکم

معادلات بقای جریان بر سطح الکتروودها با فرض کوچک بودن فاصله بین آن‌ها بصورت:

$$\nabla \cdot (\sigma_+ \nabla \phi_+) = -(J_{Ech} - J_{short}) \quad (1)$$

$$\nabla \cdot (\sigma_- \nabla \phi_-) = (J_{Ech} - J_{short}) \quad (2)$$

معادله انرژی برای انباره بصورت:

$$\frac{\partial \rho C_p T}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla T) = \sigma_+ |\phi_+|^2 + \sigma_- |\phi_-|^2 + \dot{q}_{Ech} + \dot{q}_{abuse} + \dot{q}_{short} \quad (3)$$

که ρ چگالی سیال احاطه‌کننده انباره، C_p ظرفیت حرارتی ویژه، T دمای انباره، k ضریب هدایت حرارتی، σ_+ هدایت برقی الکتروود مثبت، σ_- هدایت برقی الکتروود منفی، ϕ_+ ظرفیت الکتروود مثبت، ϕ_- ظرفیت الکتروود منفی، \dot{q}_{Ech} حرارت تولید شده ناشی از واکنش‌های شیمیایی، \dot{q}_{abuse} حرارت تولیدی ناشی از فرار حرارتی^۳ (در صورت وقوع)، \dot{q}_{short} حرارت تولیدی ناشی از اتصال کوتاه داخلی انباره (در صورت وقوع)، J_{Ech} نرخ انتقال جریان حجمی در انباره و J_{short} نرخ انتقال جریان حجمی ناشی از اتصال کوتاه داخلی انباره هستند.

همانطور که ذکر شد، برای شبیه‌سازی، از الگویی نیمه تجربی به نام NTGK در نرم‌افزار فلوئنت استفاده شد. این الگو توسط آقای کوان^۴ توسعه داده شده است. معادلات ۴ الی ۷ مربوط به این الگو است. در این الگو، شدت انتقال جریان حجمی، وابسته به میدان ظرفیت است.

$$J_{Ech} = \alpha Y [U - (\phi_+ - \phi_-)] \quad (4)$$

$$Y = \sum_5^{n=0} a_n (Dod)^n \exp \left[-C_1 \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right) \right] \quad (5)$$

¹ Fluent

² New European Driving Cycle (NEDC)

³ Thermal Runaway

⁴ Kwon

$$U = \sum_{n=0}^{n=3} b_n (Dod)^n - C_2 (T - T_{ref}) \quad (6)$$

$$Dod = \frac{vol}{3600 Q_{Ah}} \int_0^t J dt \quad (7)$$

که a مساحت الکتروود، U و Y متغیرهای استخراج شده از نتایج تجربی، Dod مقدار تغذیه مصرف‌شده انباره، T_{ref} دمای محیطی که آزمایش‌های تجربی در آن انجام شده است، C_1 و C_2 ثابت‌های NTGK، vol حجم انباره و Q_{Ah} ظرفیت انباره استفاده شده برای آزمایش‌های تجربی هستند. حرارت تولیدی ناشی از واکنش‌های الکتروشیمیایی از معادله ۸ محاسبه می‌شود [۱۹، ۲۰].

$$\dot{q}_{Ech} = J_{Ech} (U - (\phi_+ - \phi_-) - T \frac{dU}{dt}) \quad (8)$$

متغیرهای U و Y با توجه به نمودارهای تجربی ولتاژ برحسب زمان در نرخ‌های تخلیه ثابت، برای انباره لیتیوم‌گوگرد موردنظر استخراج شدند. روش استخراج متغیرها نیز با توجه به مراجع [۲۱، ۲۲] اتخاذ شده است.

در ابتدا تعدادی نقطه عمق تخلیه از نتایج آزمایش‌های تجربی موجود در دفترچه انباره [۲۳] بگونه‌ای که تمامی تغییرات ولتاژ را پوشش دهد، انتخاب شد. تعداد این نقاط به محدودیت نرم‌افزار فلوئنت و نحوه تغییرات ولتاژ انباره نسبت به زمان بستگی دارد. بیشترین تعداد نقاط قابل وارد شدن در نرم‌افزار، ۵۰ عدد است. همچنین تغییرات ولتاژ این انباره نسبت به زمان بگونه‌ای بود که با انتخاب ۴۰ نقطه، تمامی تغییرات لحاظ می‌گردید.

لذا، ۴۰ عمق تخلیه بار انتخاب شد. سپس مقادیر ولتاژ متناظر با هر یک از نقاط عمق تخلیه بار در نرخ‌های تخلیه بار مختلف، از نتایج تجربی موجود در مرجع استخراج شد. نکته حائز اهمیت دیگر در استخراج مقادیر ولتاژ در نرخ‌های تخلیه بار مختلف آن است که هر چه تعداد منحنی‌های ولتاژ بر حسب زمان در نرخ‌های تخلیه بار مختلف، بیشتر باشد، دقت بدست آوردن متغیرهای U و Y بیشتر خواهد بود.

بنابراین، برای افزایش دقت، از تمام نتایج تجربی ارائه شده در دفترچه انباره که شامل منحنی ولتاژ برحسب زمان در نرخ‌های $0.2C, 0.3C, 0.5C, 1C, 1.5C$ و $2C$ بود، استفاده شد. در نهایت، پس از استخراج مقادیر ولتاژ، باید در هر عمق تخلیه بار، ۶ مقدار ولتاژ با توجه به تعداد نرخ‌های تخلیه بار داشته باشیم. سپس، در هر عمق تخلیه بار نمودار ولتاژ برحسب جریان رسم می‌شود. بعد از اینکار، خط روند مرتبه اولی برای هر کدام از منحنی‌ها تعیین می‌شود. عرض از مبدا این خط روند برابر متغیر U و قرینه معکوس شیب آن برابر متغیر Y در آن عمق تخلیه بار است. این کار برای تمام نقاط انتخابی انجام می‌شود. بنابراین، برای ۴۰ نقطه، ۴۰ متغیر U و Y خواهیم داشت. این مقادیر در نرم‌افزار بصورت یک جدول مرجع وارد شد. مقادیر این متغیرها برای هفت نمونه ذکر شده در جدول ۱ نشان داده شده است.

جدول ۱ چند مورد از متغیرهای محاسبه‌شده برای شبیه‌سازی

متغیر Y (S)	متغیر U (V)	عمق تخلیه
۳۵,۴۱۹	۲,۴۳۶۴	۰,۰۱۸۴۵
۲۷,۵۴۱	۲,۳۵	۰,۱۴۳۶
۱۷,۱۸۲۱	۲,۰۸۵۱	۰,۴۲۰۷
۴۵,۸۷۶۸	۲,۲۷	۰,۵۲۵۹
۵۰,۴۲۳۷	۲,۴۱۱	۰,۷۸۲۹
۴۰,۰۱۶۸	۲,۲۱	۰,۸۰۳۲

۴- مشخصه‌های انباره

برای شبیه‌سازی، از انباره لیتیوم‌گوگرد ساخته‌شده توسط شرکت اکسیس انرژی^۱ استفاده شد. شماره این نوع انباره MLS62120-20S و ظرفیت آن ۳,۴ آمپر ساعت است. قطب مثبت آن از ترکیب گوگرد و کربن، الکتروود منفی آن از جنس لیتیوم، محلول رسانای آن ترکیبی از تتراهیدروفوران^۲، دی‌آکسولان^۳، دی‌متوکسی‌اتان^۴ و تتراادی‌متیل‌اتر^۵ است. در جدول ۲ برخی ویژگی‌های انباره نشان داده شده است. خواص بخش‌های مختلف انباره نیز در جدول ۳ نشان داده شده است.

جدول ۲ مشخصات انباره [۲۳]

ویژگی	مقدار
ضخامت (میلی‌متر)	۵,۶
عرض (میلی‌متر)	۷۸
ارتفاع (میلی‌متر)	۱۴۵
وزن (گرم)	۵۰,۷
ولتاژ اسمی (ولت)	۲,۰۵
ظرفیت اسمی (آمپر ساعت)	۳,۴
تعداد چرخه‌های عمر	>۹۵
طول پایانه‌ها (میلی‌متر)	۲۵
عرض پایانه‌ها (میلی‌متر)	۲۰
حد ولتاژ بالا برای تغذیه (ولت)	۲,۵
حد ولتاژ پایین برای تخلیه (ولت)	۱,۵

جدول ۳ خواص انباره [۲۴]

ناحیه	چگالی (kg/m ³)	ظرفیت حرارتی (j/(kg.k))	هدایت حرارتی (w/m.k)	هدایت برقی (S/m)
پایانه مثبت	۲۷۰۰	۹۰۰	۲۰۵	۷e۳,۵
پایانه منفی	۸۹۶۰	۳۹۰	۴۰۱	۷e۵,۹۶
ناحیه فعال در انباره	۱۸۳۳,۶۵	۲۵۶۳,۷	۸۵,۵۱۸	$\sigma_- = 9368293$ $\sigma_+ = 2134146$

۵- دامنه حل و شبکه‌بندی

در شکل ۳ هندسه طراحی‌شده در نرم‌افزار و شبکه‌بندی انجام‌شده بر روی انباره نشان داده شده است. این شبکه‌بندی بصورت سه‌بعدی مستطیلی و ساختاریافته در نرم‌افزار انسیس مشینگ^۶ ایجاد شده است. برای بررسی استقلال استقلال شبکه محاسباتی، شبیه‌سازی تخلیه انباره با شبکه‌بندی‌های مختلف انجام شد و ولتاژ انباره در لحظه‌ای که حدود

¹ OxisEnergy

² Tetrahydrofuran

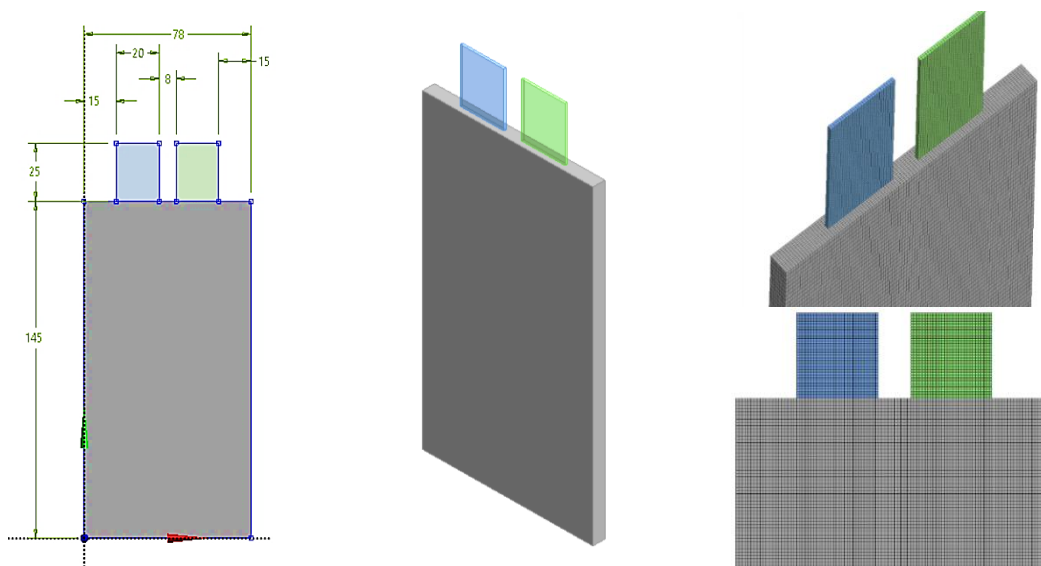
³ Dioxolane

⁴ Dimethoxy Ethane

⁵ Tetra(Ethylene Glycol) Dimethyl Ether

⁶ Ansys Meshing

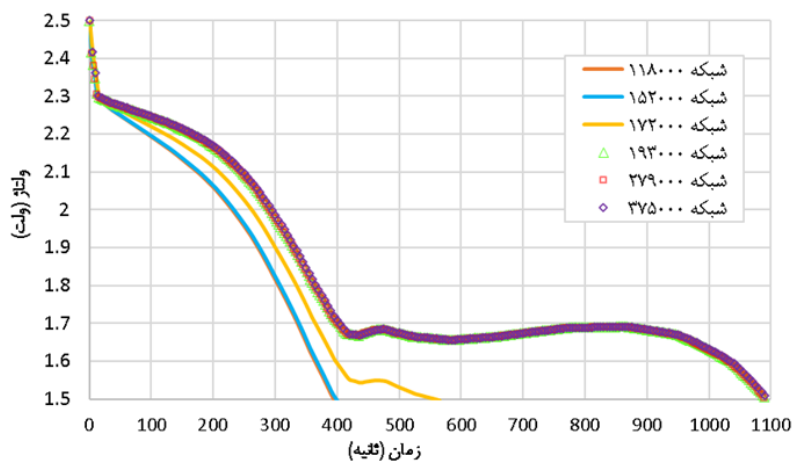
1000 mAh از ظرفیت آن مصرف شده بود، مقایسه گردید. نتایج نشان داد که پس از استفاده از شبکه با تعداد بیش از 193000، تغییر قابل توجهی در ولتاژ مشاهده نشد و بنابراین، این تعداد شبکه برای تحلیل‌ها کافی بود. در جدول 4، این نتایج نشان داده شده است. همچنین به منظور درک بهتر اثر شبکه‌بندی بر متغیر ولتاژ، نمودار شکل 4 نشان داده شده است.



شکل 3 هندسه طراحی شده و شبکه‌بندی انجام شده بر انباره

جدول 4 استقلال شبکه بندی در ظرفیت حدود 1000 mAh برای نرخ تخلیه 2C

ولتاژ	تعداد شبکه‌بندی
1,5043	174000
1,5121	185500
1,664	193000
1,6641	279000
1,6641	375000



شکل 4 اثر شبکه‌بندی بر متغیر ولتاژ برحسب زمان انباره در نرخ تخلیه ثابت 2C

۶- شرایط مرزی و اولیه

شرط مرزی حرارتی برای دیواره‌های انباره، جابجایی طبیعی با ضریب انتقال حرارت جابجایی ثابت $5 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}$ و دمای محیط 30°C در نظر گرفته شده است. دیواره‌های انباره عایق برق هستند و فقط ناحیه بالایی پایانه‌ها تحت بارگذاری برقی جریان ثابت یا متغیر (بسته به نوع شبیه‌سازی) قرار می‌گیرد. همچنین، در حالت اولیه و شروع شبیه‌سازی، سطح تغذیه اولیه انباره 100% درصد و ولتاژ آن برابر با 2.5 ولت است. دمای اولیه انباره نیز، 30°C درجه سانتی‌گراد تعیین شده است. معیار توقف شبیه‌سازی نیز، ولتاژ قطع 1.5 ولت (با توجه به مقدار توصیه‌شده شرکت سازنده) تعیین شد.

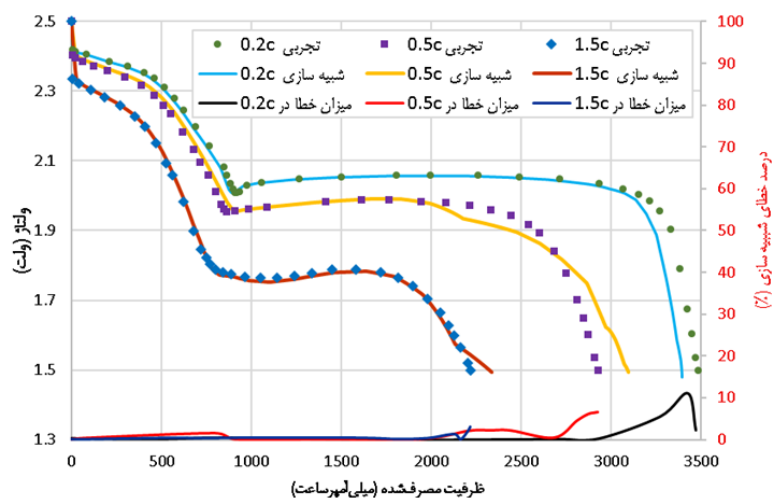
۷- اعتبارسنجی نتایج

برای اعتبارسنجی نتایج، نمودار ولتاژ بر حسب ظرفیت تخلیه شده در نرخ‌های تخلیه 0.2C ، 0.5C ، 1.5C ، در حالات تجربی [۲۵] و شبیه‌سازی نرم‌افزاری با هم مقایسه شدند. این نتایج در شکل ۵ نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که در اکثر چرخه تخلیه، تطابق خوبی با نتایج تجربی وجود دارد. بیشترین اختلاف برای انتهای چرخه است که در آن افت ولت‌ها بیشتر ناشی از کاهش غلظت یون‌ها است. در مورد علل وقوع خطا، باید اشاره شود که بیشتر خطا ناشی از دو عامل است:

۱- محدودیت‌های ذاتی نوع NTGK در پیش‌بینی دقیق ولتاژ در انتهای چرخه.

۲- عدم وجود داده‌های دمایی در مرجع اعتبارسنجی برای تنظیم دقیق متغیرهای شبیه‌سازی.

NTGK به عنوان یک روش نیمه تجربی، بر پایه متغیرهای U (ولتاژ مدار باز) و Y (مقاومت قطبش) عمل می‌کند اما در عمق تخلیه بالا، پدیده‌های پیچیده‌ای مثل افت ولتاژ ناشی از کاهش غلظت مواد فعال و اثرات انتقال جرم را بطور کامل پیش‌بینی نمی‌کند. لذا بیشترین اختلاف بین نتایج تجربی و شبیه‌سازی در ناحیه انتهایی چرخه تخلیه رخ می‌دهد. همچنین، قابل مشاهده است که با افزایش نرخ تخلیه، مقدار خطا کاهش یافته است. این مسئله تا حد زیادی به خواص الکتروشیمیایی انباره لیتیوم‌گوگرد وابسته است. در نرخ‌های کم، زمان تخلیه طولانی‌تر است. لذا، زمان بیشتری برای وقوع واکنش‌ها داشته و سهم پدیده‌های انتقال جرم، نفوذ یون‌ها و اثرات کاهش غلظت در افت ولتاژ بیشتر است. اما در نرخ‌های بالاتر، افت ولتاژ اهمی غالب‌تر است و با توجه به ویژگی نوع NTGK و تطبیق متغیرهای الگوی آن بر اساس ولتاژ و جریان انباره، مقدار خطا کمتر است. حداکثر درصد اختلاف بین نتایج تجربی و شبیه‌سازی برای نرخ‌های 0.2C و 1.5C و 0.5C بترتیب، 11.1% ، 6.48% درصد و 3.07% درصد است.

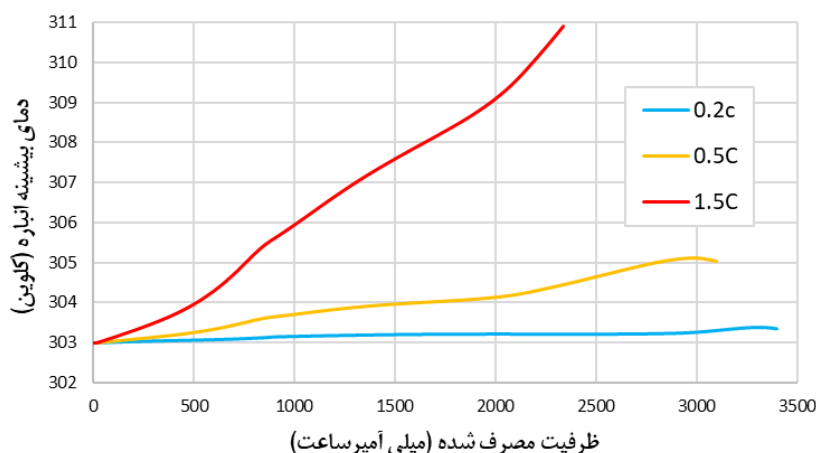


شکل ۵ نمودار ولتاژ انباره بر حسب ظرفیت مصرف شده در نرخ‌های تخلیه مختلف [۲۵]

۸- نتایج و بحث

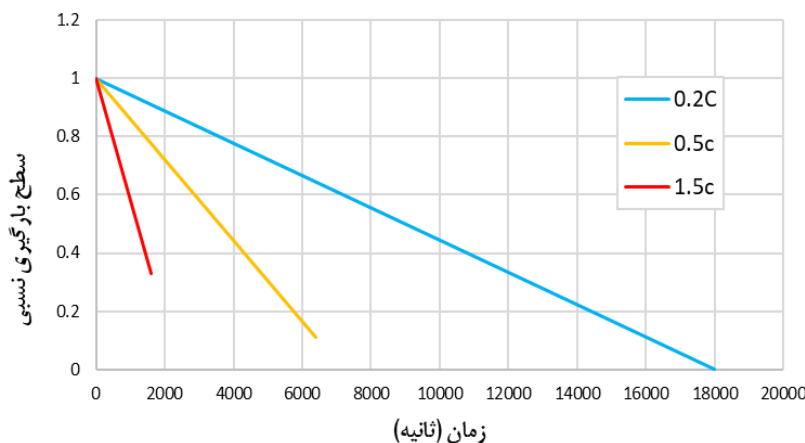
۸-۱- تخلیه با نرخ ثابت

پس از اعتبارسنجی، ابتدا نتایج حاصل از شبیه‌سازی در نرخ‌های تخلیه ثابت مورد بررسی قرار می‌گیرد. در شکل ۶ نمودار دمای بیشینه انباره برحسب ظرفیت مصرف شده در نرخ‌های تخلیه مختلف قابل مشاهده است. با افزایش نرخ تخلیه، مقدار بیشینه دمای انباره افزایش یافته و همچنین نرخ افزایش آن بیشتر می‌شود. این موضوع با در نظر گرفتن تشدید واکنش‌های الکتروشیمیایی داخل انباره، قابل توجیه است. همچنین، با توجه به اینکه شرط مرزی حرارتی انباره در تمام حالات یکسان است، علت دیگر این افزایش دما مربوط به زمان کمتر برای دفع حرارت به محیط اطراف در نرخ‌های تخلیه بالا است.



شکل ۶ نمودار دمای بیشینه انباره برحسب ظرفیت مصرف شده در نرخ‌های تخلیه مختلف

در شکل ۷، نتایج متغیر مقدار سطح تغذیه انباره برحسب زمان در نرخ‌های تخلیه مختلف نشان داده شده است. نکته قابل توجه آن است که با افزایش نرخ تخلیه، تمام ظرفیت انباره تخلیه نمی‌شود و بخشی از ظرفیت آن بصورت مصرف نشده باقی می‌ماند. در نرخ‌های تخلیه بالا، افت ولتاژ سریع‌تر است و ولتاژ انباره زودتر به ولتاژ قطع ۱٫۵ ولت می‌رسد. لذا، زمان کافی برای مصرف شدن تمام ظرفیت انباره وجود ندارد. ادامه تخلیه در این حالت، سبب آسیب رسیدن به انباره می‌شود.



شکل ۷ نمودار سطح تغذیه انباره برحسب زمان در نرخ‌های تخلیه مختلف

۸-۲- راه‌اندازی سرد

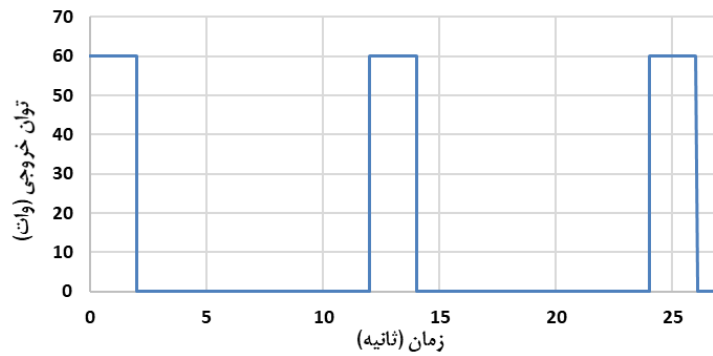
آزمایش راه‌اندازی سرد به عنوان یکی از آزمون‌های حیاتی در ارزیابی عملکرد انباره‌ها، بویژه در خودروهای دورگه و برقی، اهمیت ویژه‌ای دارد. این آزمایش توانایی انباره در تأمین جریان بالا در دماهای پایین را می‌سنجد، که برای راه‌اندازی زدن موتورهای احتراقی در شرایط سرد بسیار حیاتی است. این ارزیابی بویژه برای انباره‌های کمکی که در خودروهای دورگه و اتصال برقی دورگه استفاده می‌شوند، از اهمیت بیشتری برخوردار است، زیرا این انباره‌ها وظیفه تأمین جریان اولیه برای راه‌اندازی موتورهای احتراقی را دارند و هرگونه ناتوانی در این زمینه می‌تواند منجر به نقص عملکرد خودرو شود.

برای شبیه‌سازی از استاندارد FCVT و نمودار ارائه‌شده در آن استفاده شد. طبق این استاندارد، مجموعه انباره در دمای -30°C درجه سانتی‌گراد قرار گرفته و سه پالس با توان ۵ الی ۷ کیلووات در مدت زمان ۲ ثانیه به آن وارد می‌شود. بین هر پالس، ۱۰ ثانیه استراحت (حالت بی‌باری) به انباره داده می‌شود. در صورت آزمایش بر روی یک انباره، مقدار توان پالس (۵ تا ۷ کیلووات) بر تعداد انباره‌های موجود در مجموعه انباره تقسیم می‌شود. اما در صورتی که سازنده انباره یک عدد حداقل ولتاژ تعریف کرده باشد، مقدار توان خروجی باید با توجه به آن تغییر کند [۲۶]. اعداد ذکرشده در نمودار شکل ۸، با توجه به دفترچه انباره و مقدار بیشینه توان ذکرشده در آن بدون رسیدن به ولتاژ قطع، انتخاب شده است. نمودار شکل ۸ به عنوان ورودی به نرم‌افزار داده شد. سطح تغذیه اولیه انباره نیز ۱۰۰ درصد در نظر گرفته شده است.

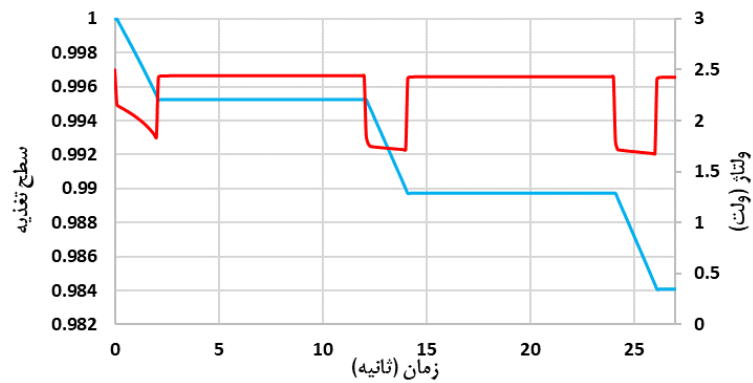
در شکل ۹، نمودار ولتاژ و سطح تغذیه بر حسب زمان انباره نشان داده شده است. با اعمال هر پالس، ولتاژ دچار افت شدیدی شده و پس از حذف بار و صفر شدن جریان، بخشی از ولتاژ بازیابی می‌شود. اما به علت مصرف بخشی از ظرفیت، به ولتاژ اولیه باز نمی‌گردد. همین امر سبب می‌شود که با هر بار اعمال پالس، افت ولتاژ بیشتری رخ بدهد. این افت ولتاژ بیشتر ناشی از مقاومت درونی انباره است. زیرا، در زمان پالس (۲ ثانیه) فرصت کمی برای وقوع واکنش‌های الکتروشیمیایی وجود دارد. نکته قابل توجه دیگر، نوع تغییر ولتاژ در هر پالس است. این تغییرات، بیشتر به مقاومت درونی انباره و تغییرات آن نسبت به سطح تغذیه وابسته است.

تغییرات دمای بیشینه انباره بر حسب زمان نیز در شکل ۱۰، نشان داده شده است. قابل مشاهده است که با اعمال هر پالس دمای بیشینه افزایش می‌یابد. در زمان بی‌باری یا استراحت، دما ثابت است. دمای محیط در این حالت ثابت و -30°C درجه سانتی‌گراد است. ضریب انتقال حرارت جابجایی نیز مانند حالات قبل، $5 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}$ در نظر گرفته شده است. در پالس‌های دوم و سوم، با توجه به اینکه بیشتر افت ولتاژ در زمان اعمال پالس ناشی از اتلافات اهمی است و تغییرات آن تقریباً خطی است، تولید حرارت نیز با توجه به رابطه $(q_{\text{ohmic}} = R \times i^2)$ خطی است. بنابراین، طبق رابطه جابجایی $(q = hA\Delta T)$ و با ثابت بودن مقدار h و A ، تغییرات دما نیز خطی است. همچنین، تغییرات دمای بیشینه انباره بعد از سه پالس به اندازه تقریباً 0.6°C کلین است.

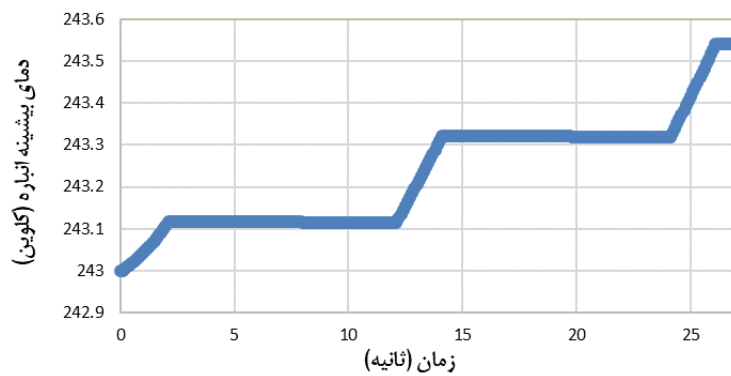
در شکل ۱۱، خط ترازهای توزیع دمای انباره پس از پالس اول و پس از پالس سوم، نشان داده شده است. همانطور که مشخص است؛ بیشینه دمای انباره در ناحیه فعال انباره واقع شده است. علت آن مربوط به رخ دادن واکنش‌های الکتروشیمیایی و حرارت تولیدی ناشی از آن‌ها است. دمای سردتر پایانه‌ها به دلیل آن است که این بخش‌ها نواحی غیرفعال از نظر الکتروشیمیایی محسوب می‌شوند و واکنش الکتروشیمیایی در آن‌ها رخ نمی‌دهد. بیشتر حرارت تولیدی در پایانه‌ها ناشی از مقاومت درونی آن‌ها در مقابل عبور جریان برقی است که در مقایسه با حرارت تولیدی در واکنش‌های الکتروشیمیایی، مقدار کمتری دارد. همچنین، به علت اینکه جنس پایانه منفی از مس و جنس پایانه مثبت از آلومینیوم بوده و هدایت حرارتی مس از آلومینیوم بیشتر است، حرارت اهمی تولیدشده در پایانه مثبت بیشتر بوده و در نتیجه دمای داغتر در پایانه مثبت مشاهده می‌شود. علاوه بر آن، بیشترین تغییرات دما در انباره نیز بعد از پالس سوم کمتر از ۱ کلین است.



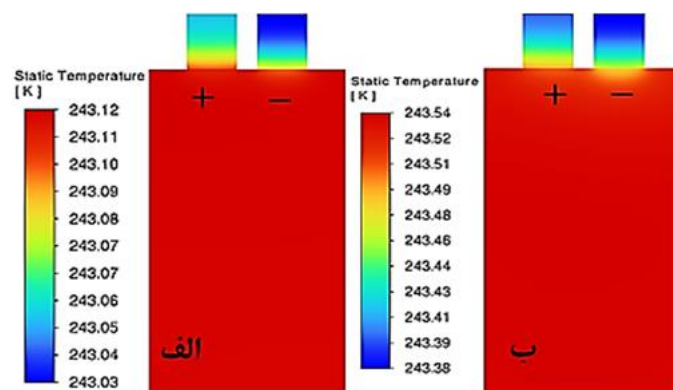
شکل ۸ نمودار توان خروجی انباره برحسب زمان در آزمایش راه‌اندازی سرد



شکل ۹ نمودار ولتاژ انباره برحسب زمان در آزمایش راه‌اندازی سرد



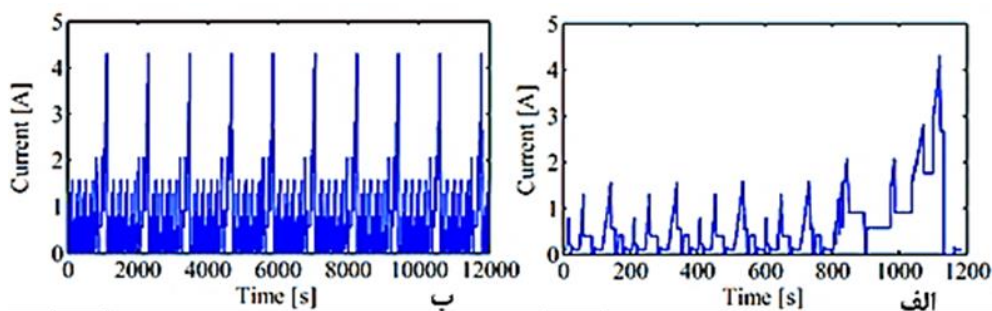
شکل ۱۰ نمودار بیشینه دمای انباره برحسب زمان در آزمایش راه‌اندازی سرد



شکل ۱۱ خط ترازهای توزیع دمای انباره. الف) پس از پالس اول. ب) پس از پالس سوم

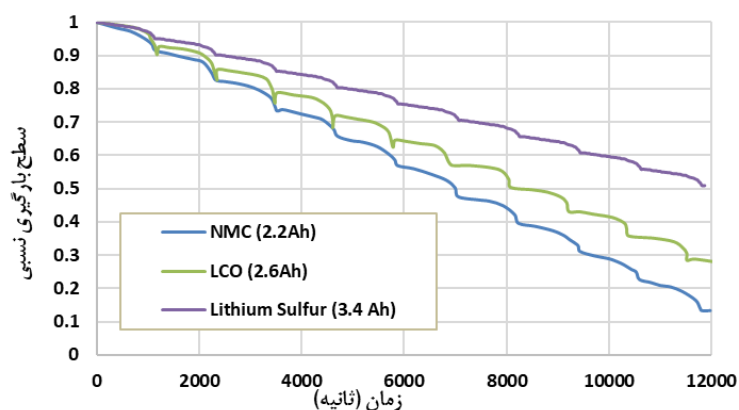
۸-۳- چرخه رانندگی اروپا

یکی از استانداردهای مهم برای شبیه‌سازی شرایط واقعی عملکرد انباره در کاربرد خودروهای برقی، آزمایش چرخه رانندگی اروپا است. این آزمایش با استفاده از الگوهای بارگذاری متغیر، شامل دوره‌های شتاب، توقف و سرعت‌های مختلف، امکان ارزیابی دقیق رفتار انباره را در شرایط دینامیکی فراهم می‌کند. به منظور ایجاد مقایسه چگالی انرژی انباره لیتیوم‌گوگرد و سایر انباره‌های لیتیوم‌یون و همچنین بررسی شرایط واقعی عملکردی آن‌ها، ده چرخه رانندگی اروپا متوالی شبیه‌سازی شد و نتایج آن با سایر مقالات مقایسه شد. مقایسه بین انباره‌های لیتیوم‌یونی از نوع لیتیوم نیکل منگنز کبالت اکسید (NCM) با ظرفیت ۲,۲ آمپرساعت و لیتیوم کبالت اکسید (LCO) با ظرفیت ۲,۶ آمپرساعت و انباره لیتیوم‌گوگرد با ظرفیت ۳,۴ آمپرساعت انجام شد. اطلاعات مربوط به نتایج تجربی انباره‌های لیتیوم‌یونی ذکر شده، در مراجع [۲۷، ۲۸] موجود است. در شکل ۱۲ تصویری از نمودار جریان برحسب زمان که به عنوان ورودی نرم‌افزار در نظر گرفته شده، نشان داده شده است.



شکل ۱۲ نتایج آزمایش چرخه رانندگی اروپا (الف) یک چرخه (ب) ده چرخه متوالی [۲۷]

نتایج مقایسه سطح تغذیه سه انباره در شکل ۱۳ نشان داده شده است. با توجه به چگالی انرژی بالا انباره لیتیوم‌گوگرد، سطح تغذیه نسبی این انباره در مقایسه با دو انباره لیتیوم‌یون دیگر، پس از اعمال ده چرخه رانندگی اروپا متوالی، بطور قابل توجهی بیشتر است؛ سطح تغذیه باقیمانده انباره لیتیوم‌گوگرد نزدیک به ۵۱ درصد، انباره لیتیوم نیکل منگنز کبالت اکسید ۱۳,۳ درصد و انباره لیتیوم کبالت اکسید ۲۸,۵ درصد است.



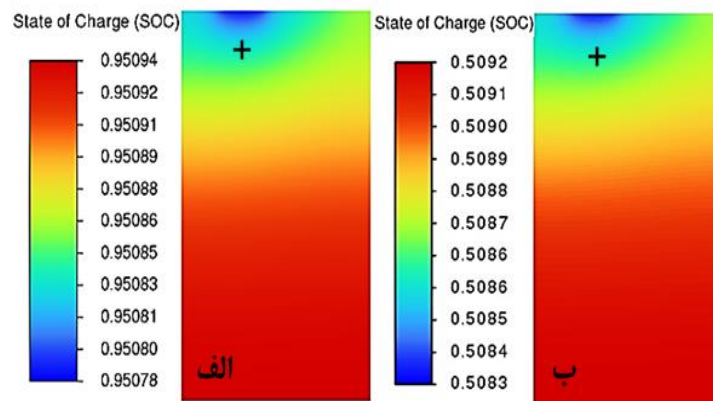
شکل ۱۳ نمودار سطح تغذیه نسبی برحسب زمان برای انباره‌های لیتیوم‌یون و لیتیوم‌گوگرد

مقدار افت ولتاژ انباره‌ها در جدول ۵ نشان داده شده است. با توجه به نتایج، مقدار افت ولتاژ انباره لیتیوم‌گوگرد نسبت به ولتاژ نامی، کمترین مقدار را در قیاس با دو انباره لیتیوم‌یون دیگر دارد. این موضوع، عملکرد پایدارتر انباره‌های لیتیوم‌گوگرد را در برابر پالس‌های جریان ناگهانی نشان می‌دهد.

جدول ۵ مقایسه افت‌های ظرفیت بوجود آمده در انبارة لیتیوم‌گوگرد و انبارة‌های لیتیومیون

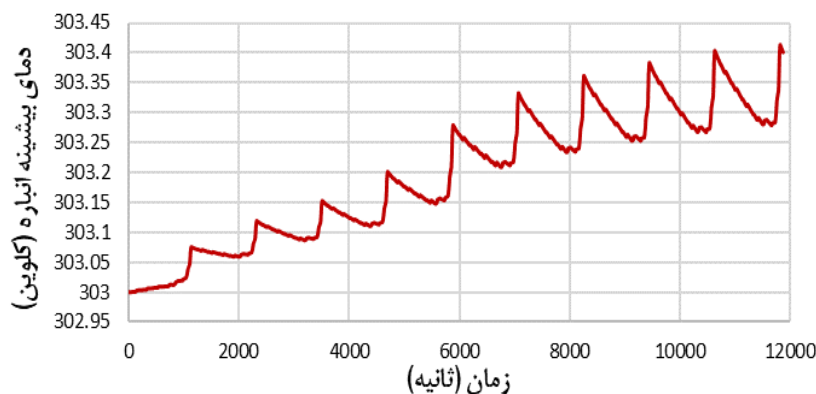
انباره	ولتاژ نامی (ولت)	کمترین ولتاژ (ولت)	مقدار افت ظرفیت (ولت)
لیتیوم گوگرد	۲٫۵	۱٫۸۳	۰٫۶۷
لیتیوم نیکل منگنز کبالت اکسید	۴٫۲	۳٫۳	۰٫۹
لیتیوم کبالت اکسید	۴٫۲	۳	۱٫۲

خط ترازهای توزیع سطح تغذیه در شکل ۱۴ قابل مشاهده است. توزیع سطح تغذیه انباره در طی تخلیه ثابت بوده و بیشترین افت سطح تغذیه در نزدیکی پایانه مثبت رخ داده است. علت آن مربوط به مقدار افت ظرفیت بوجود آمده در پایانه مثبت است. جنس پایانه مثبت از آلومینیوم بوده و مقاومت درونی آن از مس بیشتر است. در نزدیکی پایانه، به دلیل تغییر هندسه، چگالی جریان بیشتر است. اثر این چگالی جریان و نیز، مقاومت درونی پایانه مثبت، باعث بوجود آمدن افت ولتاژ بیشتری در نزدیکی پایانه مثبت می‌شود. به علت اینکه، در سطح تغذیه‌های پایین‌تر، مقدار ظرفیت پایین‌تر است، در نزدیکی پایانه مثبت نیز، سطح تغذیه کمتری وجود دارد.



شکل ۱۴ خط ترازهای توزیع سطح تغذیه انباره. الف) پس از یک چرخه NEDC. ب) پس از ده چرخه NEDC

در شکل ۱۵، نمودار بیشینه دمای انبارة لیتیوم‌گوگرد برحسب زمان نشان داده شده است. قابل ملاحظه است که در شرایط مرزی ذکرشده، بیشینه دمای انباره فقط ۰٫۴ کلوین افزایش داشته است. این رفتار ناشی از تلفات اهمی کم و عملکرد حرارتی قابل قبول انباره در برابر شرایط بارگذاری متغیر نسبت به زمان است.



شکل ۱۵ نمودار دمای بیشینه انبارة لیتیوم‌گوگرد برحسب زمان در اثر اعمال چرخه چرخه رانندگی اروپا

۹- نتیجه‌گیری

در این مقاله یک سلول سه‌بعدی از انباره لیتیوم‌گوگرد با ظرفیت ۳,۴ آمپر ساعت به کمک روش دینامیک سیالات محاسباتی و بصورت الکتروشیمیایی و حرارتی همزمان شبیه‌سازی شده است. این شبیه‌سازی در نرم‌افزار فلوئنت و با روش NTGK انجام شد. در سه نرخ تخلیه 0.2C، 0.5C و 1.5C اعتبارسنجی بین نتایج تجربی و شبیه‌سازی برای متغیر ولتاژ برحسب ظرفیت تخلیه‌شده صورت گرفت. در اکثر چرخه تخلیه، تطابق خوبی بین نتایج تجربی و شبیه‌سازی وجود داشت. علاوه بر متغیر ولتاژ، دما و سطح تغذیه انباره بررسی شد. پس از آن، انباره تحت شرایط راه‌اندازی سرد و چرخه راندگی اروپا شبیه‌سازی شد. خلاصه نتایج شبیه‌سازی بدین صورت است:

در شبیه‌سازی حالت نرخ تخلیه ثابت نسبت به زمان، کمترین افزایش دما مربوط به نرخ تخلیه 0.2C و به مقدار ۰,۴ کلوین بود. با افزایش نرخ تخلیه، سرعت رشد دما و نیز، مقدار رشد دما افزایش یافت. بیشترین دما برای نرخ تخلیه 1.5C و به مقدار ۳۱۱ کلوین بود.

مقدار سطح تغذیه در انتهای چرخه تخلیه فقط در شبیه‌سازی حالت نرخ تخلیه ثابت 0.2C، به صفر درصد رسید. با افزایش نرخ تخلیه، بخشی از ظرفیت انباره بصورت مصرف نشده باقی می‌ماند. علت آن برای افزایش سرعت واکنش‌های الکتروشیمیایی و ناتمام ماندن برخی از آن‌ها است. در نرخ تخلیه 1.5C، سطح تغذیه نهایی به حدود ۳۳,۵ درصد رسید و با توجه به رسیدن انباره به ولتاژ قطع ۱,۵ ولت، مصرف بقیه ظرفیت انباره بدون آسیب رساندن به آن ممکن نخواهد بود. در آزمایش راه‌اندازی سرد، با اعمال هر پالس، انباره دچار افت ولتاژ زیادی می‌شود. با حذف بار، بخشی از ولتاژ انباره، بازیابی می‌شود. مقدار بازیابی ولتاژ وابسته به سطح تغذیه انباره است. هرچه سطح تغذیه پایین‌تر باشد، مقدار بازیابی ولتاژ کمتر و افت ولتاژ بیشتر خواهد بود. لذا، بیشترین افت ظرفیت انباره در زمان اعمال پالس سوم و به اندازه ۰,۷۶ ولت رخ داد.

با توجه به زمان کوتاه بارگذاری در آزمایش راه‌اندازی سرد، سطح تغذیه انباره کاهش چشمگیری نداشته است و مقدار نهایی آن به ۹۸,۴ درصد رسید.

تغییرات دمای بیشینه انباره در آزمایش راه‌اندازی سرد کوچک و بیشترین مقدار آن به اندازه ۰,۶ کلوین بود. به علت زمان کوتاه و جریان بالا در اعمال هر پالس، تلفات اهمی بیشترین اثر را در تولید حرارت دارند. با توجه به اینکه در پالس‌های دوم و سوم تغییرات ولتاژ بصورت خطی است، تولید حرارت انباره نیز خطی خواهد بود. بنابراین، طبق معادله انتقال حرارت جابجائی و ثابت بودن مقدار ضریب انتقال حرارت جابجائی در فرض مسئله، تغییرات دما خطی است.

با اعمال ده چرخه راندگی استاندارد اروپا متوالی به انباره لیتیوم‌گوگرد، سطح تغذیه آن به مقدار ۵۱ درصد رسید. این مقدار از سطح تغذیه باقیمانده در مقایسه با سایر انباره‌ها بطور قابل توجهی بیشتر است. برای مثال، سطح تغذیه دو انباره لیتیومیون دیگر با شرایط تقریباً مشابه ۱۳,۳ درصد و ۲۸,۵ درصد بود.

کمترین مقدار افت ولتاژ بصورت لحظه‌ای در بارگذاری ده چرخه راندگی اروپا، در انباره لیتیوم‌گوگرد و به اندازه ۰,۶۷ ولت بود. این افت ولتاژ برای دو انباره‌های لیتیومیون دیگر به اندازه ۰,۹ و ۱,۲ ولت بود. این موضوع حاکی از عملکرد پایدارتر انباره‌های لیتیوم‌گوگرد در برابر پالس‌های جریان ناگهانی است.

بیشترین افزایش دمای انباره لیتیوم‌گوگرد با اعمال ده چرخه راندگی اروپا، به مقدار ۰,۴ کلوین بود. این مقدار افزایش دما نشان‌دهنده عملکرد حرارتی قابل قبول این انباره در شرایط عملکردی واقعی است.

فهرست علائم

a	مساحت سطح فعال در واحد حجم، m^2/m^3
A	مساحت، m^2

c_p	ظرفیت حرارتی ویژه، J/kg.K
C	نرخ تغذیه یا تخلیه، 1/h
DoD	عمق تخلیه
i	جریان برق، A
J	نرخ انتقال جریان حجمی، A/m ³
k	هدایت حرارتی، W/m.K
q_{ohmic}	تولید حرارت اهمی، W
\dot{q}	شار حرارتی، W/m ²
Q_{Ah}	ظرفیت نامی انباره، Ah
SoC	سطح تغذیه
t	زمان، s
T	دما، K
T_{ref}	دمای محیط آزمایش انباره، K
Vol	حجم، m ³
U	متغیر نوع NTGK، V
Y	متغیر نوع NTGK، S
h	ضریب انتقال حرارت جابجائی، W/m ² .K

علائم یونانی

ρ	چگالی، J/kg.K
σ	هدایت برقی، S/m
φ	ظرفیت برقی، V

زیرنویس‌ها

E_{ch}	الکتروشیمیایی
$Short$	اتصال کوتاه
$abuse$	استفاده نادرست (منجر به فرار حرارتی)
+	الکتروود مثبت
-	الکتروود منفی

References

- [1] Song MK, Cairns EJ, Zhang Y. Lithium/sulfur batteries with high specific energy: old challenges and new opportunities. *Nanoscale*. 2013;5(6):2186-204. doi: 10.1039/C2NR33044J
- [2] Goodenough JB, Kim Y. Challenges for rechargeable batteries. *Journal of Power Sources*. 2011 Aug 15;196(16):6688-94. doi: 10.1016/j.jpowsour.2010.11.074
- [3] Hasan MM, Haque R, Jahirul MI, Rasul MG, Fattah IM, Hassan NM, Mofijur M. Advancing energy storage: The future trajectory of lithium-ion battery technologies. *Journal of Energy Storage*. 2025 Jun 1;120:116511.
- [4] Lopez S, Akizu-Gardoki O, Lizundia E. Comparative life cycle assessment of high performance lithium-sulfur battery cathodes. *Journal of cleaner production*. 2021 Feb 1;282:124528.
- [5] Manthiram A, Chung SH, Zu C. Lithium-sulfur batteries: progress and prospects. *Advanced materials*. 2015 Mar;27(12):1980-2006. doi: 10.1002/adma.201405115
- [6] Bharti VK, Cherian SK, Gaikwad MM, Pathak AD, Sharma CS. Chemistry and operation of

- lithium-sulfur batteries. In *Lithium-Sulfur Batteries 2022* Jan 1 (pp. 37-55). Elsevier. doi: [10.1016/B978-0-323-91934-0.00027-2](https://doi.org/10.1016/B978-0-323-91934-0.00027-2)
- [7] Kolosnitsyn VS, Karaseva EV. Lithium-sulfur batteries: Problems and solutions. *Russian Journal of Electrochemistry*. 2008 May;44(5):506-9. doi: [10.1134/S1023193508050029](https://doi.org/10.1134/S1023193508050029)
- [8] Yang L, Li Q, Wang Y, Chen Y, Guo X, Wu Z, Chen G, Zhong B, Xiang W, Zhong Y. A review of cathode materials in lithium-sulfur batteries. *Ionics*. 2020 Nov;26(11):5299-318. doi: [10.1007/s11581-020-03767-3](https://doi.org/10.1007/s11581-020-03767-3)
- [9] Hauser A, Kuhn R. High-voltage battery management systems (BMS) for electric vehicles. In *Advances in battery technologies for electric vehicles 2015* Jan 1 (pp. 265-282). Woodhead Publishing. doi: [10.1016/B978-1-78242-377-5.00011-X](https://doi.org/10.1016/B978-1-78242-377-5.00011-X)
- [10] Vezzini A. Lithium-ion battery management. In: *Lithium-ion batteries: advances and applications*. Elsevier; 2014. p. 345-60. doi: [10.1016/B978-0-444-59513-3.00015-7](https://doi.org/10.1016/B978-0-444-59513-3.00015-7)
- [11] Karami H, Karimi MA, Mahdipour M. ANN modeling of cold cranking test for sealed lead-acid batteries. *Journal of power sources*. 2006 Aug 25;158(2):936-43. doi: [10.1016/j.jpowsour.2005.11.024](https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2005.11.024)
- [12] Brückner J, Thieme S, Grossmann HT, Dörfler S, Althues H, Kaskel S. Lithium-sulfur batteries: Influence of C-rate, amount of electrolyte and sulfur loading on cycle performance. *Journal of Power Sources*. 2014 Dec 5;268:82-7. doi: [S0378775314008441](https://doi.org/S0378775314008441)
- [13] Propp K, Auger DJ, Fotouhi A, Longo S, Knap V. Kalman-variant estimators for state of charge in lithium-sulfur batteries. *Journal of Power Sources*. 2017 Mar 1;343:254-67. doi: [10.1016/j.jpowsour.2016.12.087](https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2016.12.087)
- [14] Mastali M, Foreman E, Modjtahedi A, Samadani E, Amirfazli A, Farhad S, Fraser RA, Fowler M. Electrochemical-thermal modeling and experimental validation of commercial graphite/LiFePO₄ pouch lithium-ion batteries. *International Journal of Thermal Sciences*. 2018 Jul 1;129:218-30. doi: [S129007291730176X](https://doi.org/S129007291730176X)
- [15] Zeng Q, Zou Z, Chen J, Jiang Y, Zeng L, Li C. Closed-loop modeling to evaluate the performance of a scaled-up lithium-sulfur battery in electric vehicle applications. *Applied Sciences*. 2021 Oct 14;11(20):9593. doi: [10.3390/app11209593](https://doi.org/10.3390/app11209593)
- [16] Bauknecht S, Wätzold F, Schlösser A, Kowal J. Comparing the cold-cranking performance of lead-acid and lithium iron phosphate batteries at temperatures below 0 C. *Batteries*. 2023 Mar 17;9(3):176. doi: [10.3390/batteries9030176](https://doi.org/10.3390/batteries9030176)
- [17] Bai X, Peng D, Chen Y, Ma C, Qu W, Liu S, Luo L. Three-dimensional electrochemical-magnetic-thermal coupling model for lithium-ion batteries and its application in battery health monitoring and fault diagnosis. *Scientific Reports*. 2024 May 11;14(1):10802. doi: [s41598-024-61526-0](https://doi.org/s41598-024-61526-0)
- [18] Heo J, Gu H, Lee C, Sung J, Kim DH, Han J, Oh YS, Ahn S, Jeon I, Park JW. Recent Advances in Achieving High Energy/Power Density of Lithium-Sulfur Batteries for Current and Near-Future Applications. *Battery Energy*. 2025 Feb 3:e20240051. doi: [10.1002/bte2.20240051](https://doi.org/10.1002/bte2.20240051)
- [19] Kim US, Yi J, Shin CB, Han T, Park S. Modeling the dependence of the discharge behavior of a lithium-ion battery on the environmental temperature. *Journal of The Electrochemical Society*. 2011 Mar 28;158(5):A611. doi: [10.1149/1.3565179](https://doi.org/10.1149/1.3565179)
- [20] Kwon KH, Shin CB, Kang TH, Kim CS. A two-dimensional modeling of a lithium-polymer battery. *Journal of Power Sources*. 2006 Dec 7;163(1):151-7. doi: [10.1016/j.jpowsour.2006.03.012](https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2006.03.012)
- [21] Naseh A, Bayatinejad MA, Mohammadi A. Electrochemical-thermal simulation of Lithium Iron Phosphate battery for electric vehicle application. In: *Proceedings of the 12th International Conference on Internal Combustion Engines*; 2022. [In Persian]
- [22] ANSYS Inc. ANSYS Fluent tutorial guide 18. ANSYS Inc.; 2018. p. 724-46.
- [23] Propp K. Advanced state of charge estimation for lithium-sulfur batteries [PhD thesis]. Cranfield: Cranfield University; 2014.
- [24] Kumaresan K, Mikhaylik Y, White RE. A mathematical model for a lithium-sulfur cell. *Journal of the electrochemical society*. 2008 Jun 18;155(8):A576. doi: [10.1149/1.2937304](https://doi.org/10.1149/1.2937304)
- [25] Knap V, Stroe DI, Purkayastha R, Walus S, Auger DJ, Fotouhi A, Propp K. Reference performance test methodology for degradation assessment of lithium-sulfur batteries. *Journal of The Electrochemical Society*. 2018 May 26;165(9):A1601. doi: [10.1149/2.0121809jes](https://doi.org/10.1149/2.0121809jes)
- [26] United States Department of Energy. FreedomCAR battery test manual for power-assist hybrid electric vehicles. Idaho Falls (ID): Idaho National Engineering and Environmental Laboratory;

2003. Report No.: DOE/ID-11069.

- [27] Tian Y, Chen C, Xia B, Sun W, Xu Z, Zheng W. An adaptive gain nonlinear observer for state of charge estimation of lithium-ion batteries in electric vehicles. *Energies*. 2014 Sep 10;7(9):5995-6012.
- [28] Wang J, Meng J, Peng Q, Liu T, Zeng X, Chen G, Li Y. Lithium-ion battery state-of-charge estimation using electrochemical model with sensitive parameters adjustment. *Batteries*. 2023 Mar 20;9(3):180.