

# 锂电池组冷却及热失控分析 CONVERGE计算方案

IDAJ-CHINA  
技术部

# 内容

1. 背景概述
2. CONVERGE分析方案
3. 案例介绍

# 锂电池安全性

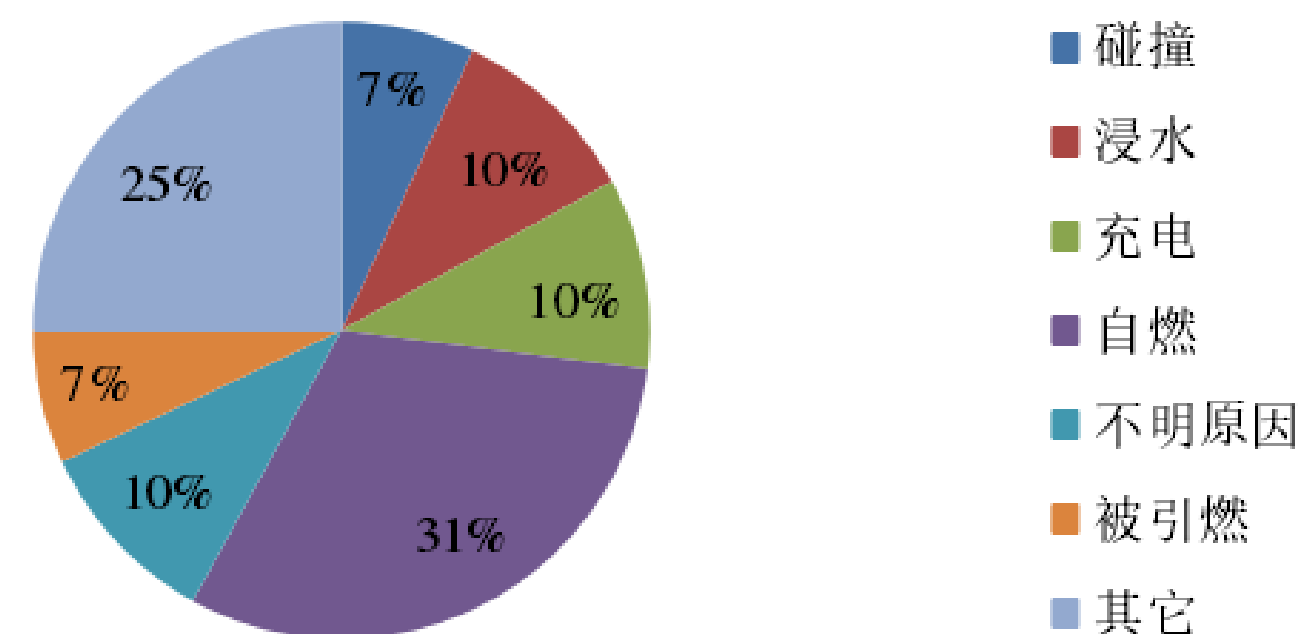
- 锂电池因为其高能量密度和大输出功率的特点得以快速推广使用，但由于其热不稳定性，在极端条件下发生火灾爆炸的几率很大。
- 锂电池的安全性是动力电池最关注的问题之一。电池的安全性和电池组的设计、滥用条件有很大关系。对于单电池来讲，安全性除了和正极材料有关，与负极，隔膜以及电解液都有很大关系。
- 电池热失控是由于电池的生热速率远高于散热速率，且热量大量累积而未及时散发出去所引起的。“热失控”是一个能量正反馈循环过程：升高的温度会导致系统变热，系统变热后温度升高，又反过来让系统变得更热。
- 锂电池火灾爆炸是一系列连锁反应，电池热失控就像多米诺效应，产生越来越多的热量，最终引发火灾爆炸。采取有效安全措施可以缓解热失控过程的扩散。

# 锂电池火灾及爆炸

- 锂离子和锂金属电池对温度较为敏感，在温度过高或故障状态下极易发生热失控，从而导致电池单元压力和温度快速升高并伴随可燃气体的释放
- 可燃气体通常会被电池的高温点燃而产生火灾，可燃气体的累积和潜在爆炸都是值得关心的问题



特斯拉电动车Model S着火现场



电动车着火原因统计

# 热失控过程

## ■ 第1阶段：电池内部热失控阶段

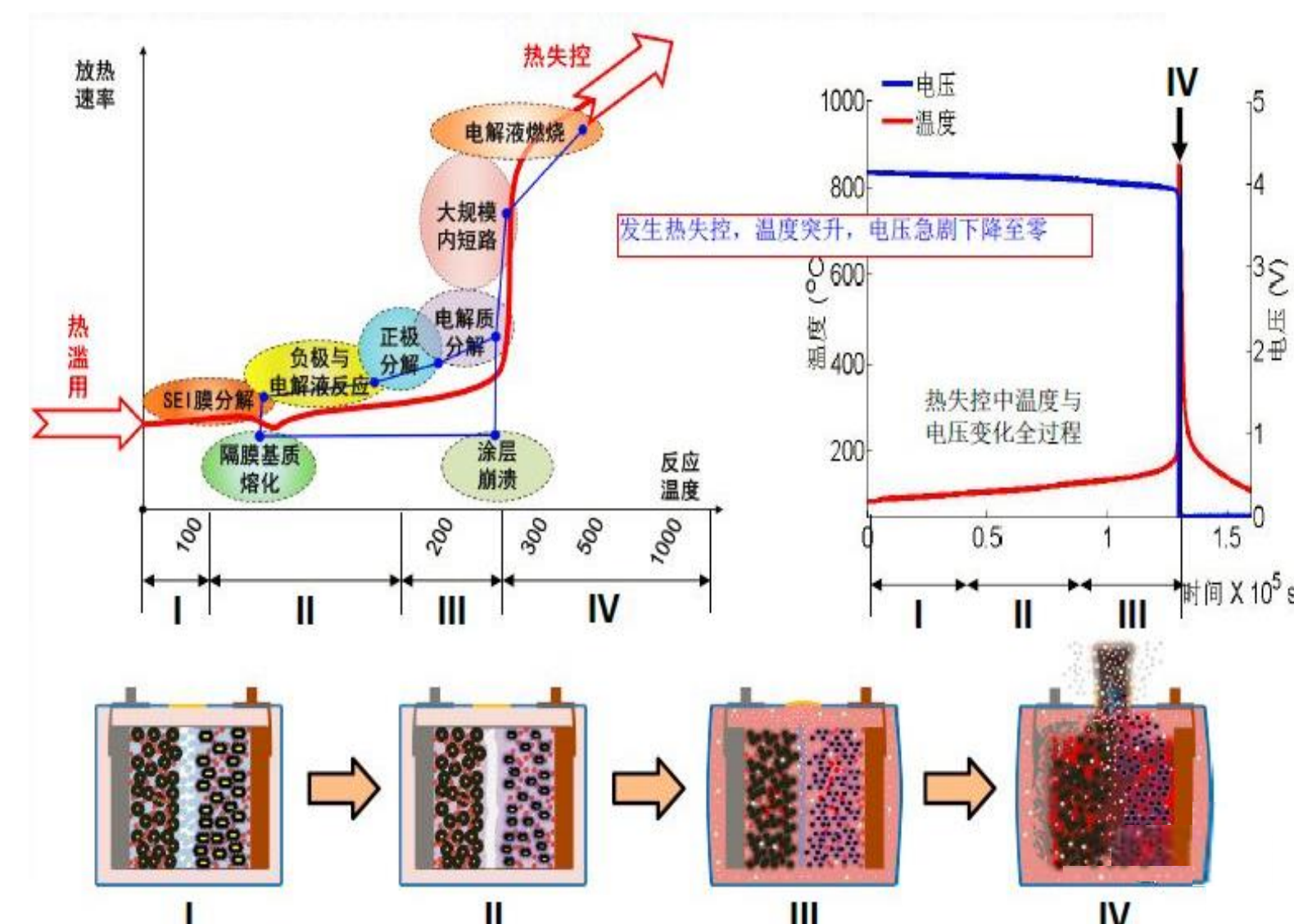
- 内部升温至90~100°C，发生剧烈放热反应

## ■ 第2阶段：电池鼓包阶段

- 电池温度达到200°C之上时，正极材料分解，释放出大量热和气体，持续升温。250-350°C嵌锂态负极开始与电解液发生反应。

## ■ 第3阶段：电池热失控，爆炸失效阶段

- 在反应发生过程中，充电态正极材料开始发生剧烈分解反应，电解液发生剧烈的氧化反应，释放出大量的热，产生高温和大量气体，电池发生燃烧爆炸。



# 热失控过程

## ■ 第1阶段：电池内部热失控阶段

- 内部升温至90~100°C，发生剧烈放热反应

## ■ 第2阶段：电池鼓包阶段

- 电池温度达到200°C之上时，正极材料分解，释放出大量热和气体，持续升温。250-350°C嵌锂态负极开始与电解液发生反应。

## ■ 第3阶段：电池热失控，爆炸失效阶段

- 在反应发生过程中，充电态正极材料开始发生剧烈分解反应，电解液发生剧烈的氧化反应，释放出大量的热，产生高温和大量气体，电池发生燃烧爆炸。

### CONVERGE应用



电池组冷却

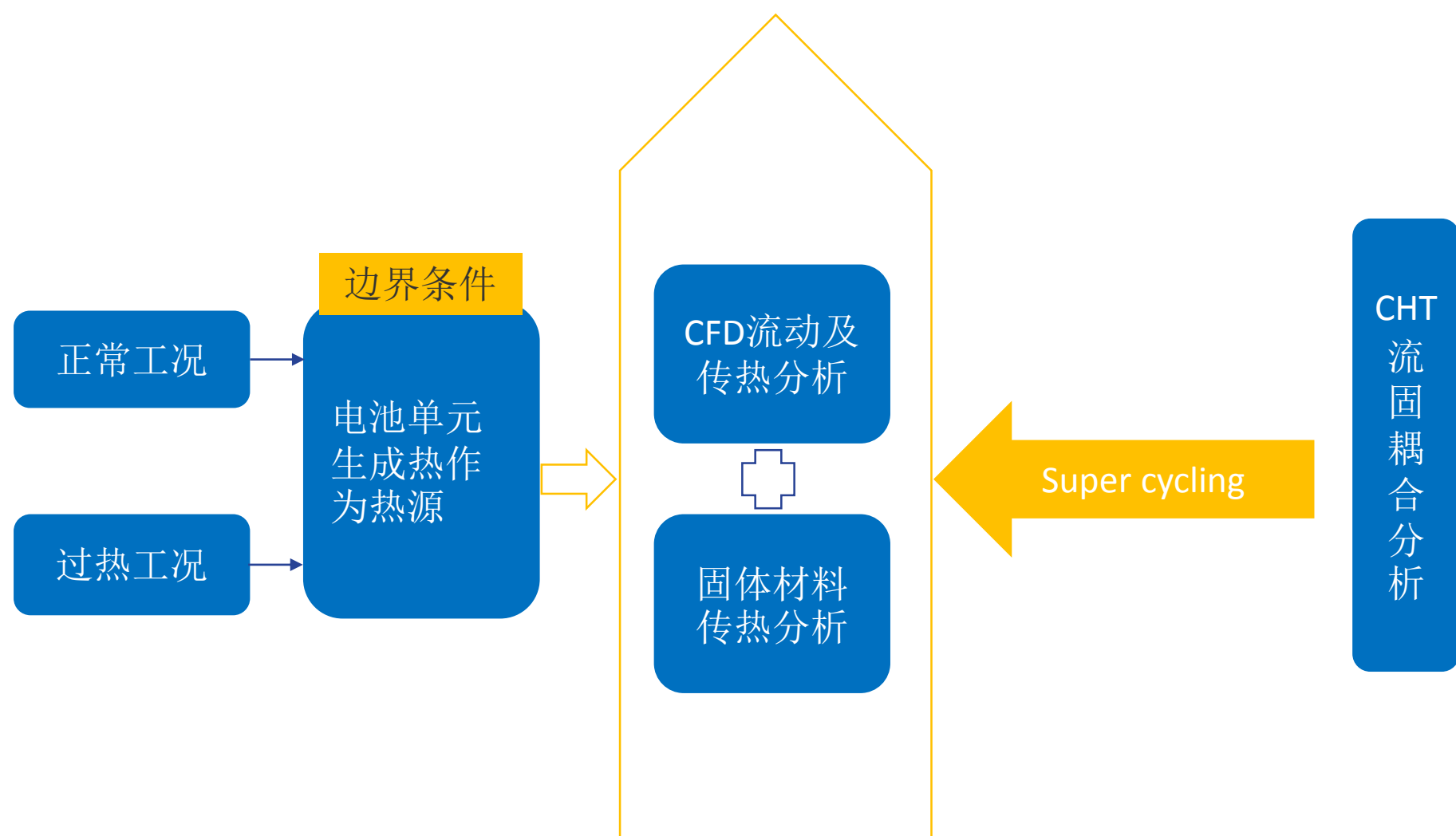


电池组燃烧分析

# CONVERGE应用及分析方法

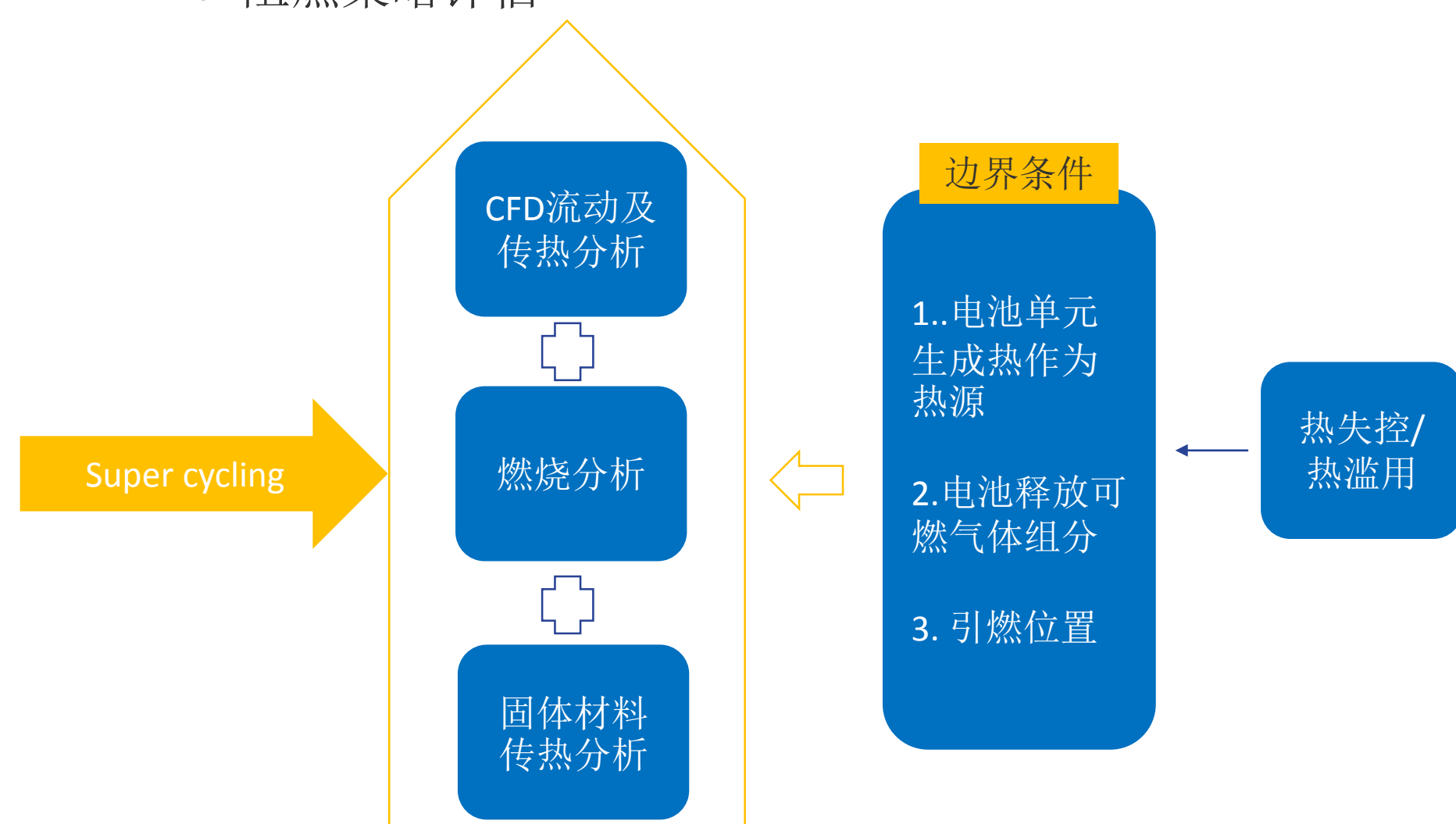
## ■ 电池组冷却

- 评估空间内温度分布
- 预测最高温度位置
- 冷却策略评估和优化



## ■ 电池组燃烧分析

- 排气安全及释放气体扩散分析
- 燃烧及火焰传播
- 热失控单元对相邻单元的影响
- 阻燃策略评估



# CONVERGE应用及分析方法

## ■ 真实几何难点：

- 小间隙，障碍物的存在对气体分布和火焰前端及发展预测的影响
- 复杂几何划分网格困难

## ■ 固定加密：

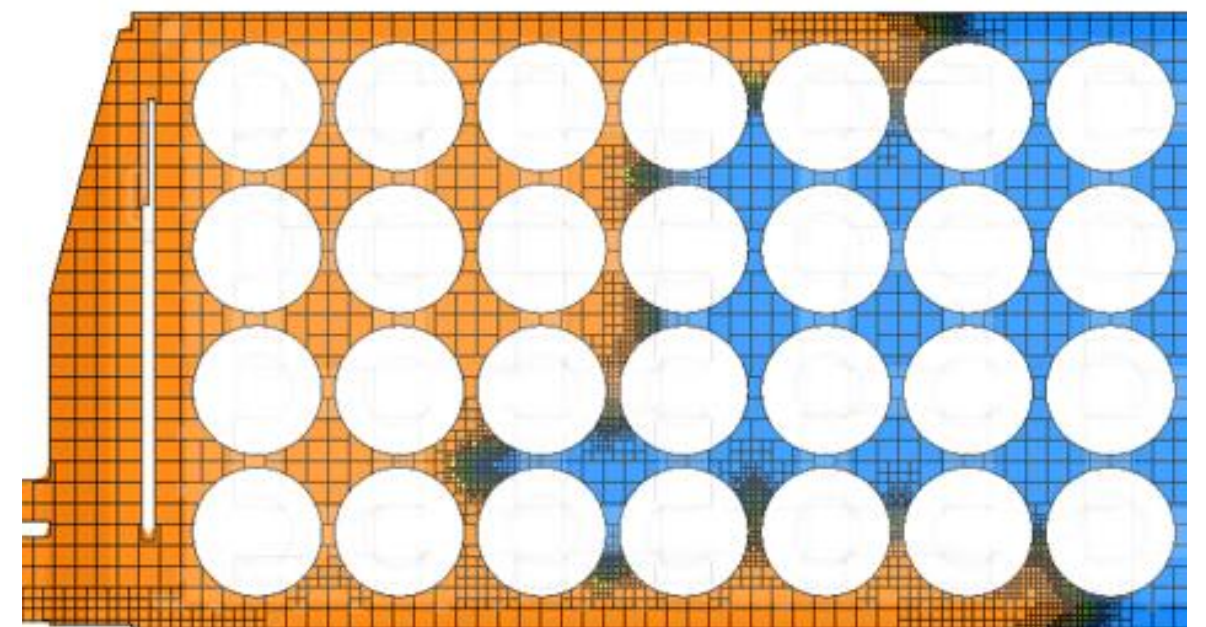
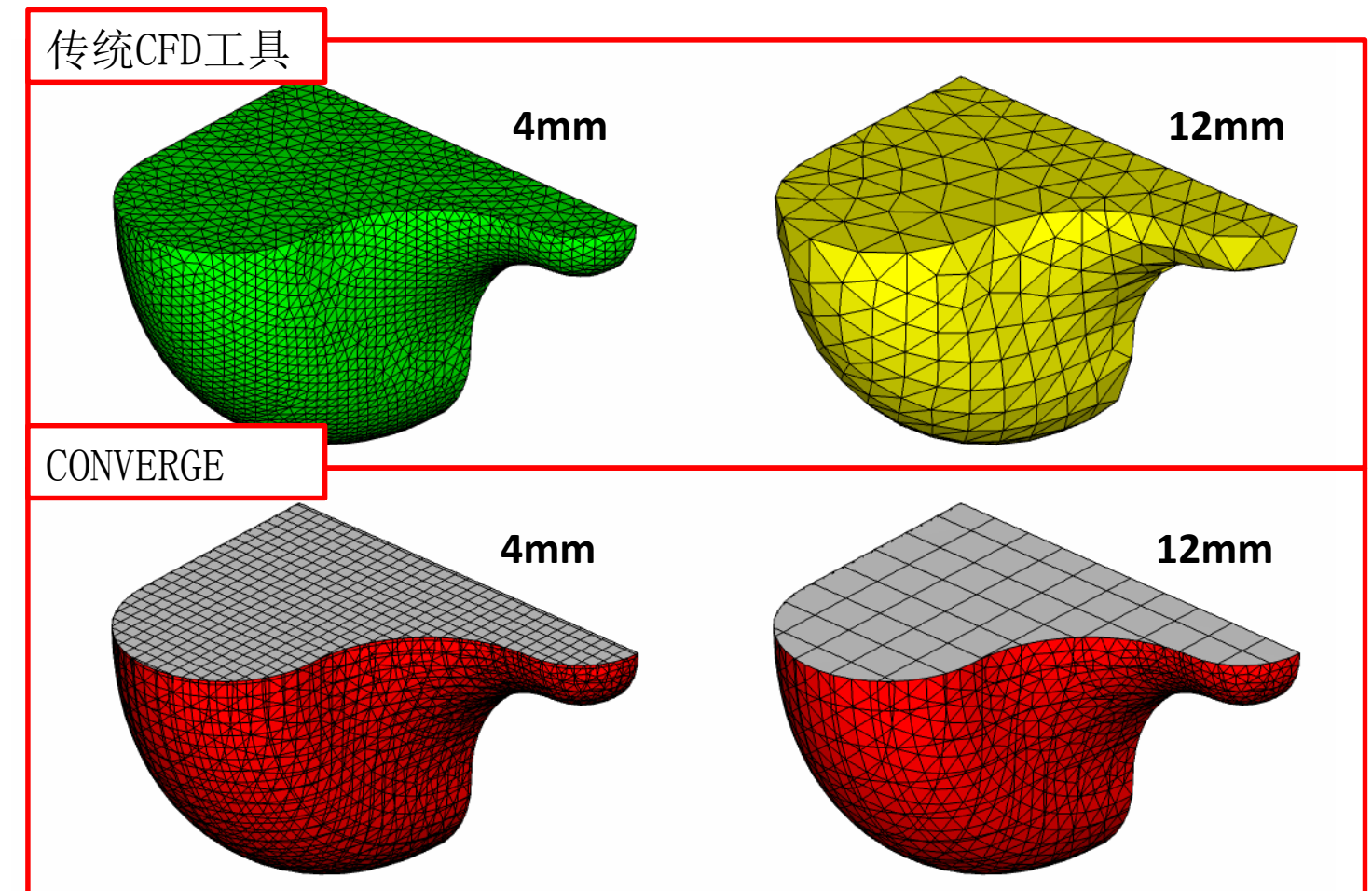
- 局部加密：如失控单元盖入口附近，固体壁面等

## ■ 自适应网格加密（AMR）：

- 基于流场变化加密，避免非预测性的全局加密
  - 速度/组分 AMR：追踪壳体内部的气体扩散
  - 温度 AMR：追踪火焰前端

## ■ V3.0 优势：

- 基于单元的载荷平衡
- 加密级数可达 6-7



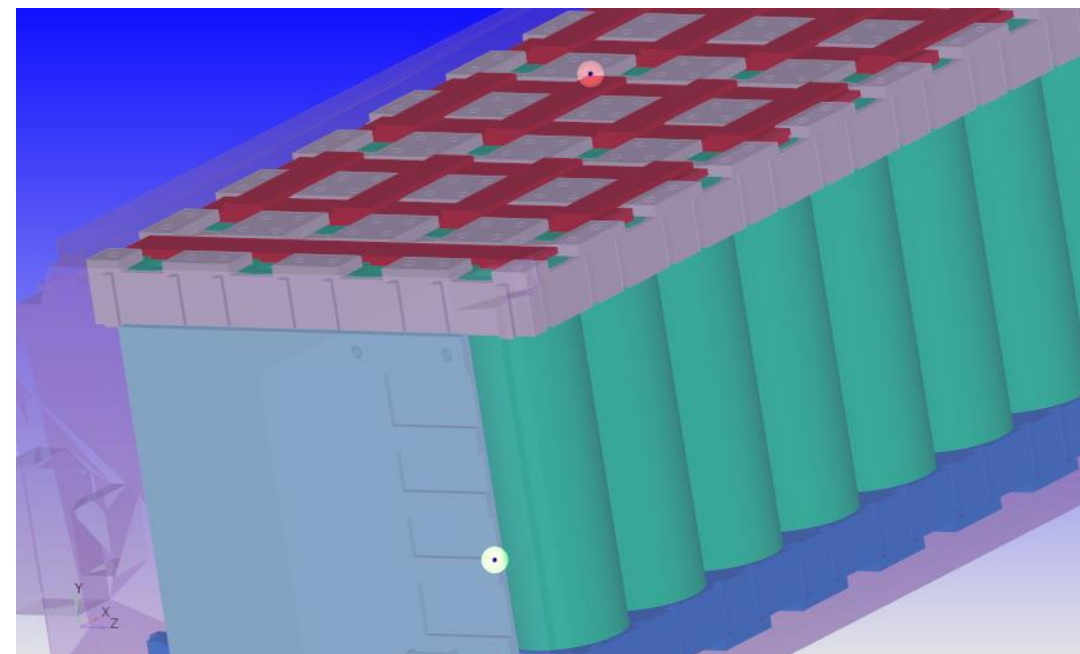
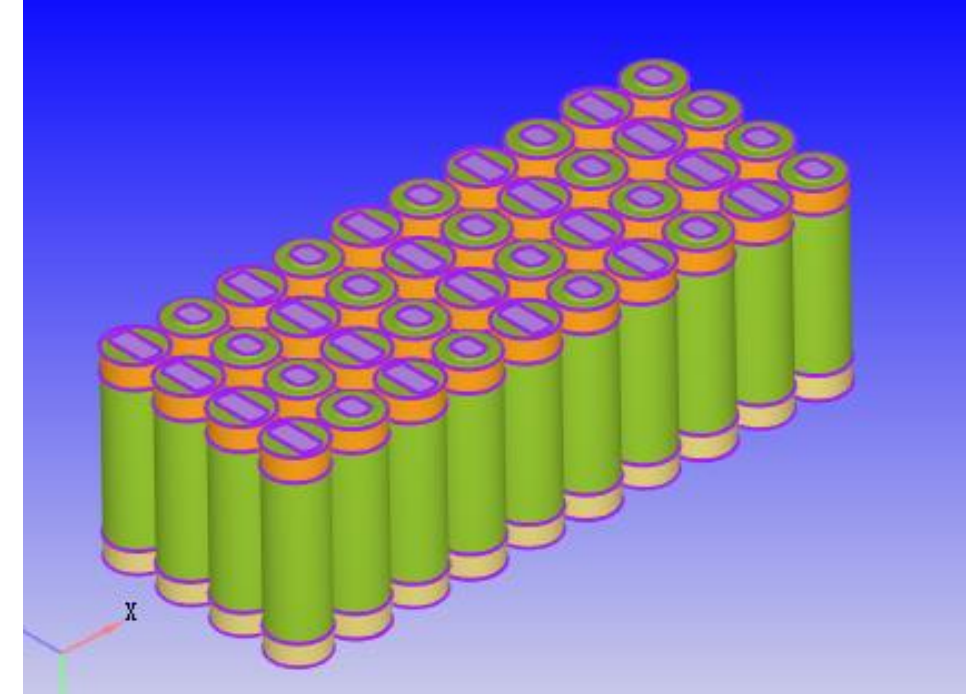
# CONVERGE应用及分析方法

## ■ 湍流模型

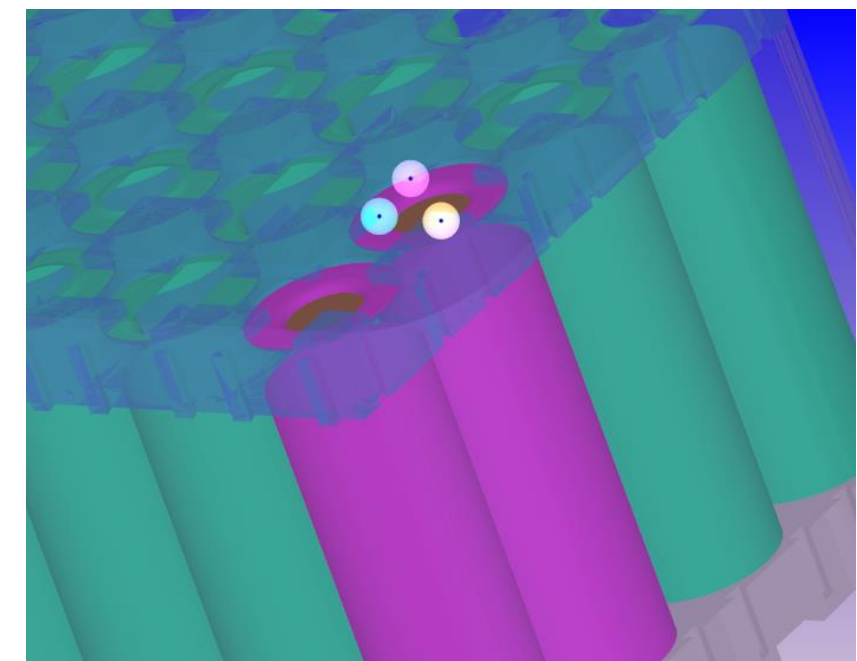
- RANS/DES/LES
- 适用于强制对流、自然对流

## ■ 源项

- 电池单元热
  - 基于单个电池或电池组区域设置热源
- 引燃
  - 通过一个能量源项模拟短路
  - 热失控单元边界处给热流量
  - 高温气体的自燃



在BMS和远端单元引燃



在热失控单元盖引燃

# CONVERGE应用及分析方法

## ■ CONVERGE详细反应求解器 : SAGE

- 加速计算: adaptive zoning

## ■ 详细反应机理: GRI MECH v3

- UC Berkeley database : 53 species, 325 reactions

## ■ CONVERGE机理工具: 机理简化

- 为了加速计算, 缩减机理中反应和组分的数量
- 53 species, 325 reactions -> 30 species, 184 reactions
- 通过敏感性分析去除了不太重要的组分
- 点火延迟和火焰速度在容差内, 保留了重要组分

```
! GRI-Mech Version 3.0 7/30/99  CHEMKIN-II format
! See README30 file at anonymous FTP site unix.sri.com, directory gri;
! WorldWideWeb home page http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/ or
! through http://www.gri.org , under 'Basic Research',
! for additional information, contacts, and disclaimer
```

ELEMENTS

O H C N AR

END

SPECIES

|      |      |       |        |        |       |      |      |
|------|------|-------|--------|--------|-------|------|------|
| H2   | H    | O     | O2     | OH     | H2O   | H02  | H2O2 |
| C    | CH   | CH2   | CH2(S) | CH3    | CH4   | CO   | CO2  |
| HCO  | CH2O | CH2OH | CH3O   | CH3OH  | C2H   | C2H2 | C2H3 |
| C2H4 | C2H5 | C2H6  | HCCO   | CH2CO  | HCCOH | N    | NH   |
| NH2  | NH3  | NNH   | NO     | NO2    | N2O   | HNO  | CN   |
| HCN  | H2CN | HCNN  | HCNO   | HOCN   | HNCO  | NCO  | N2   |
| AR   | C3H7 | C3H8  | CH2CHO | CH3CHO |       |      |      |

END

!THERMO

! Insert GRI-Mech thermodynamics here or use in default file

!END

REACTIONS

|                                                                              |           |        |          |
|------------------------------------------------------------------------------|-----------|--------|----------|
| 2O+M<=>O2+M                                                                  | 1.200E+17 | -1.000 | .00      |
| H2/ 2.40/ H2O/15.40/ CH4/ 2.00/ CO/ 1.75/ CO2/ 3.60/ C2H6/ 3.00/ AR/ .83/    |           |        |          |
| O+H+M<=>OH+M                                                                 | 5.000E+17 | -1.000 | .00      |
| H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/          |           |        |          |
| O+H2<=>H+OH                                                                  | 3.870E+04 | 2.700  | 6260.00  |
| O+H02<=>OH+O2                                                                | 2.000E+13 | .000   | .00      |
| O+H2O2<=>OH+H02                                                              | 9.630E+06 | 2.000  | 4000.00  |
| O+CH<=>H+CO                                                                  | 5.700E+13 | .000   | .00      |
| O+CH2<=>H+HCO                                                                | 8.000E+13 | .000   | .00      |
| O+CH2(S)<=>H2+CO                                                             | 1.500E+13 | .000   | .00      |
| O+CH2(S)<=>H+HCO                                                             | 1.500E+13 | .000   | .00      |
| O+CH3<=>H+CH2O                                                               | 5.060E+13 | .000   | .00      |
| O+CH4<=>OH+CH3                                                               | 1.020E+09 | 1.500  | 8600.00  |
| O+CO(+M)<=>CO2(+M)                                                           | 1.800E+10 | .000   | 2385.00  |
| LOW/ 6.020E+14 .000 3000.00/                                                 |           |        |          |
| H2/2.00/ O2/6.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/3.50/ C2H6/3.00/ AR/ .50/ |           |        |          |
| O+HCO<=>OH+CO                                                                | 3.000E+13 | .000   | .00      |
| O+HCO<=>H+CO2                                                                | 3.000E+13 | .000   | .00      |
| O+CH2O<=>OH+HCO                                                              | 3.900E+13 | .000   | 3540.00  |
| O+CH2OH<=>OH+CH2O                                                            | 1.000E+13 | .000   | .00      |
| O+CH3O<=>OH+CH2O                                                             | 1.000E+13 | .000   | .00      |
| O+CH3OH<=>OH+CH2OH                                                           | 3.880E+05 | 2.500  | 3100.00  |
| O+CH3OH<=>OH+CH3O                                                            | 1.300E+05 | 2.500  | 5000.00  |
| O+C2H<=>CH+CO                                                                | 5.000E+13 | .000   | .00      |
| O+C2H2<=>H+HCCO                                                              | 1.350E+07 | 2.000  | 1900.00  |
| O+C2H2<=>OH+C2H                                                              | 4.600E+19 | -1.410 | 28950.00 |
| O+C2H2<=>CO+CH2                                                              | 6.940E+06 | 2.000  | 1900.00  |
| O+C2H3<=>H+CH2CO                                                             | 3.000E+13 | .000   | .00      |

# CONVERGE应用及分析方法

## ■ 火灾或爆炸过程

- CONVERGE中火灾或爆炸模拟是通过点燃由热失控单元排入外壳内的可燃气体来实现的
- 两种方法：
  - 点燃预先填充好的壳体：20%的目标体积分数
  - 壳体内初始填充为空气，燃气泄漏并点燃

# CONVERGE应用及分析方法

## ■ 火灾或爆炸过程

- 不同的有机溶液可能产生不同的释放气体组分，但主要的成分仍是C,H,O。很多研究对常见电池类型的主要气体组分浓度做了测试，可以作为燃烧计算的边界条件
- 电池盖破裂允许排出物以INFLOW方式填充壳体空间
  - 可燃气体：由 CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>组成
  - 热失控过程中有机溶剂（电解质）分解
  - 排出气体组分比例和电池充电状态有关
  - 入口流速曲线

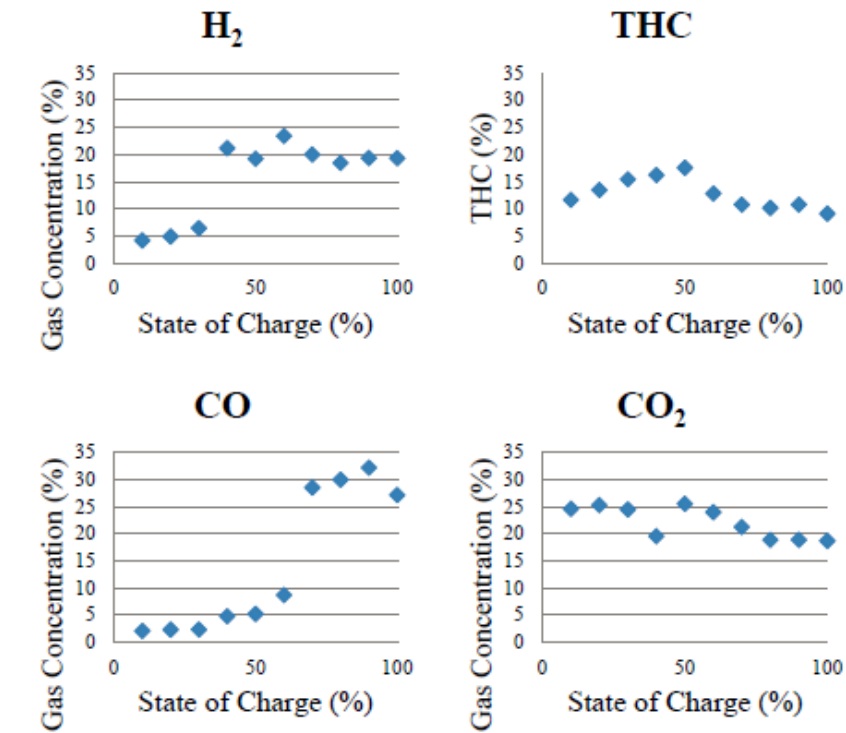
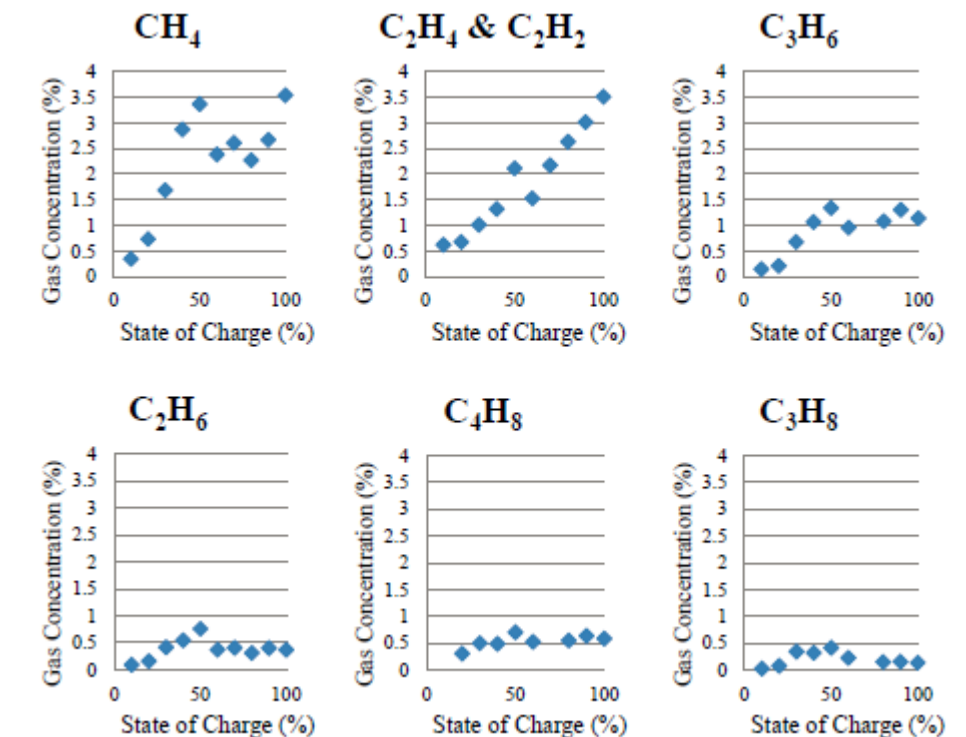


Figure 10. Major gas species concentrations for LiCoO<sub>2</sub> 18650 cells



# CONVERGE应用及分析方法

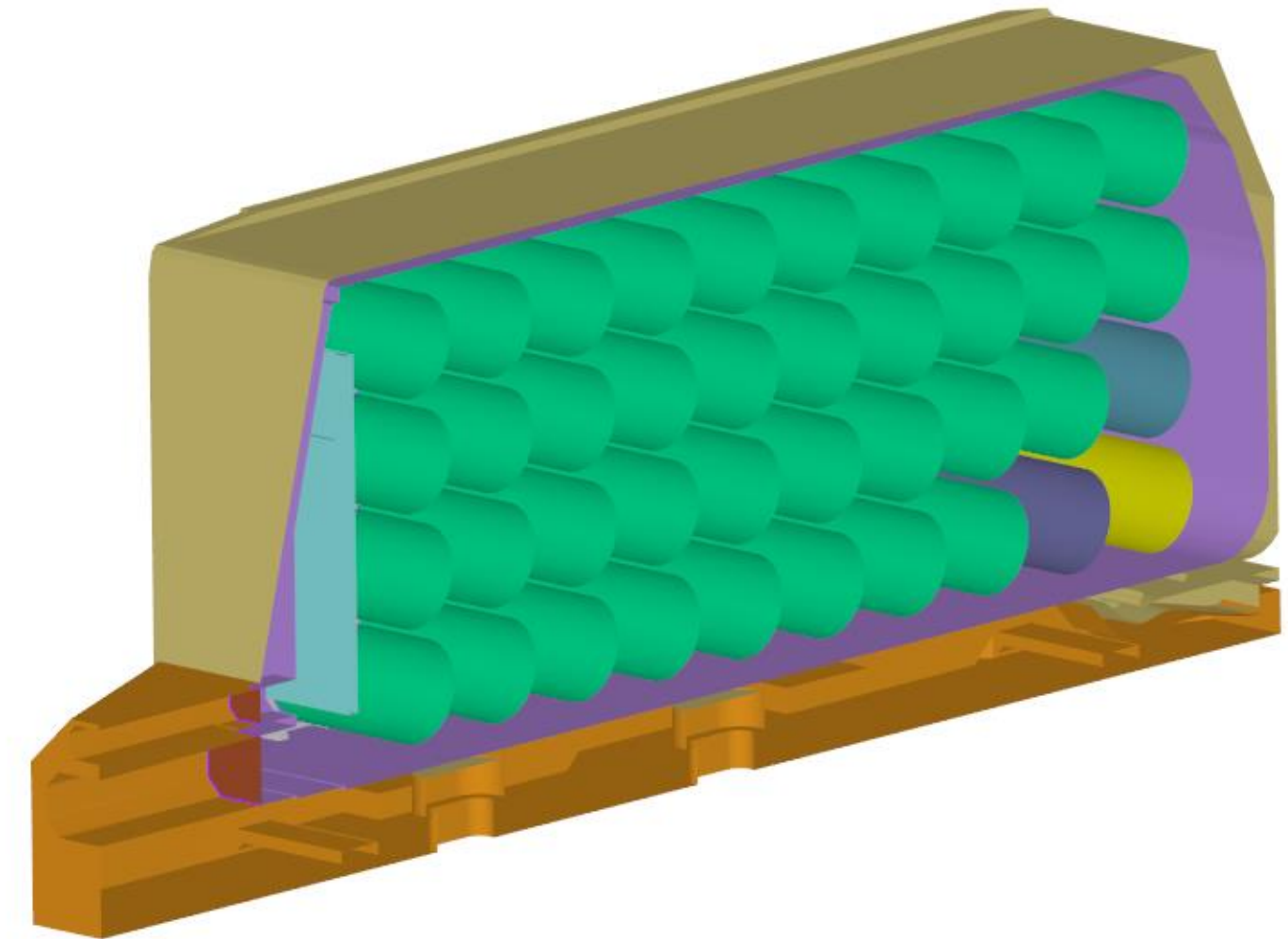
## ■ 耦合传热：CONVERGE中固体模拟

- 开启CHT求解固体域，流-固界面耦合传热解析
- 流体域的主要传热模式为对流(convection)
- 固体域中的主要传热模式为导热(conduction)

- 电池单元和隔板（spacers），镍带以及空气接触
- 隔板和电池单元及空气接触
- 电池管理系统（BMS）和空气接触
- 框架和空气接触
- 镍带和空气及电池单元接触

## ● Interface交界面边界

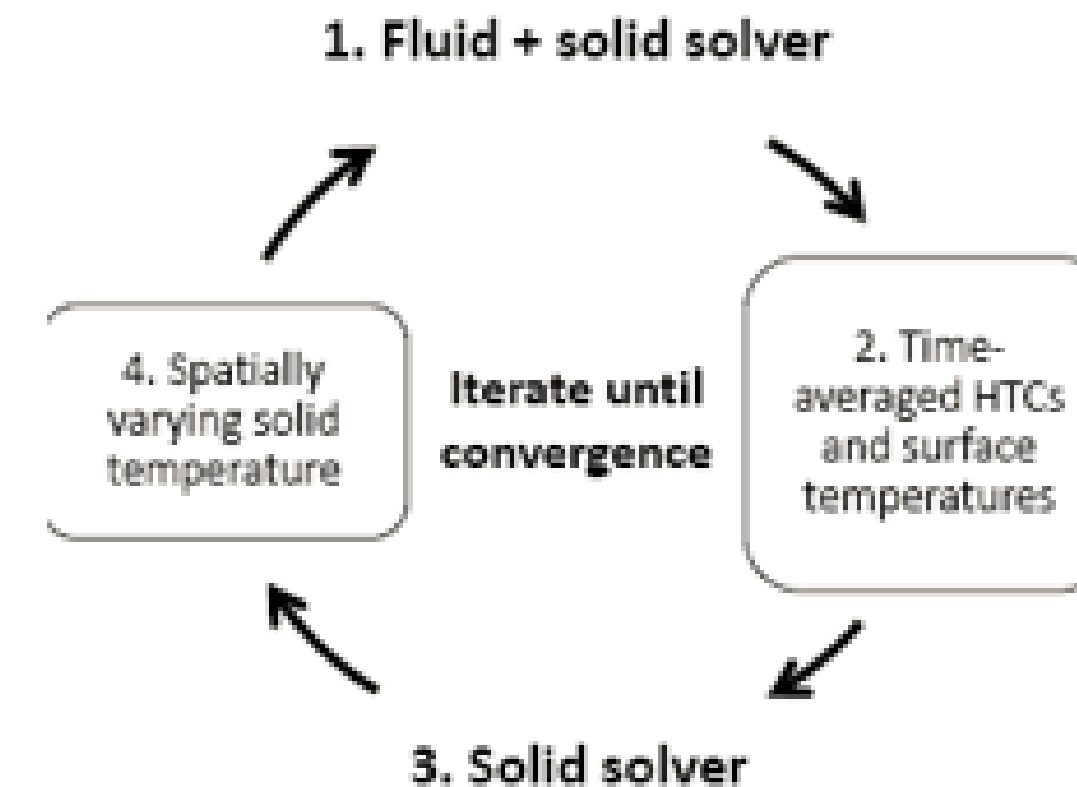
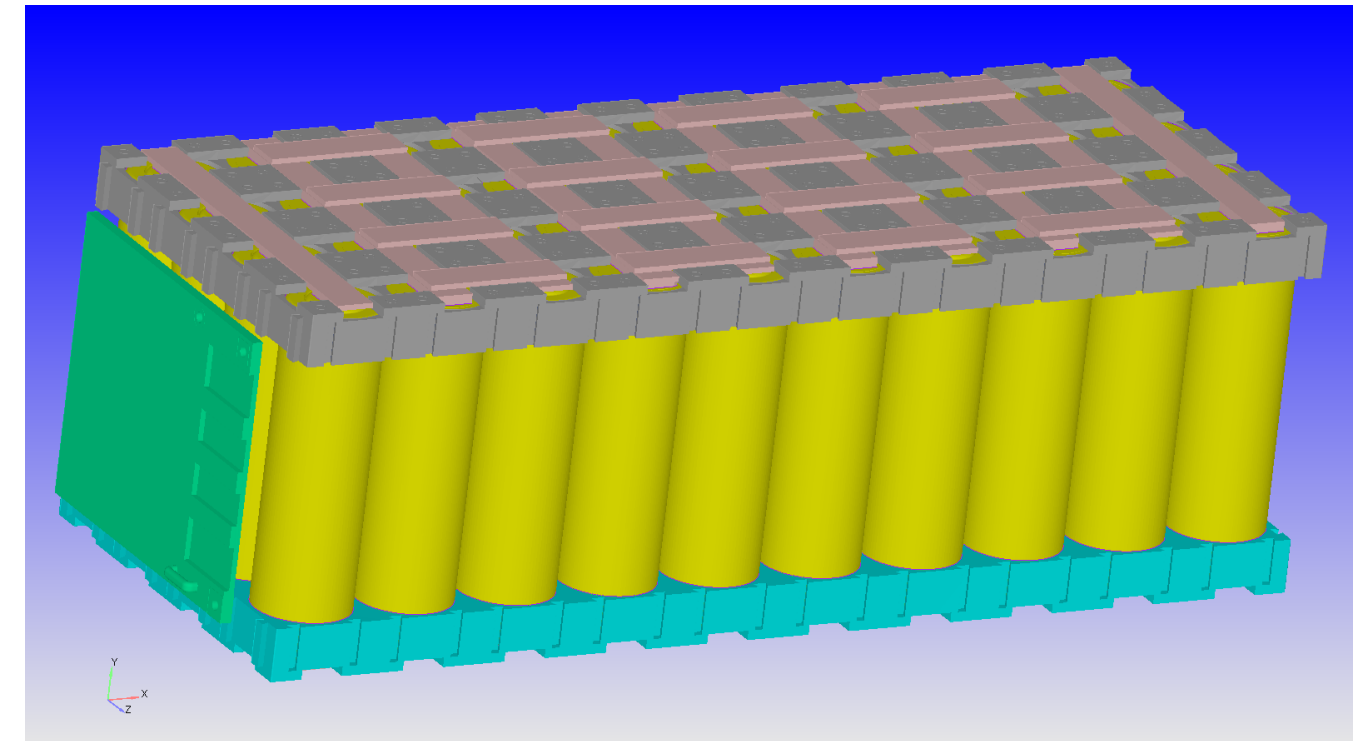
- 分离不同材料，一侧进行温度计算，另一侧匹配穿越边界的热通量



# CONVERGE应用及分析方法

## ■ 耦合传热：CONVERGE中固体模拟

- 接触热阻
  - 流-固：热障涂层形成的热阻
  - 固-固：两接触面间粗糙度引起的热阻
- Super-cycling
  - 处理不同材料之间传热时间尺度不一致的问题
    - 使用瞬态求解器同时求解流体和固体的传热
    - 周期性的冻结流体求解器只求解稳态固体温度
    - 瞬态求解器用更新后的固体温度求解流体和固体
    - 重复上述步骤直到固体温度收敛



# CONVERGE应用及分析方法

## ■ 稳态分析——流场、温度场评估

- 可压气体
- 自定义稳态监控评估收敛度
- CONVERGE BICGSTAB（双耦合梯度）求解器计算压力
- 更大的CFL 数

## ■ 瞬态分析——燃烧过程

- 可燃气体扩散过程
- 着火过程
- 火焰发展时间预测

# CONVERGE应用案例——电池组冷却

## ■ 电动自行车用的锂离子电池组

- 36-52V
- 10-20AH
- 适配250-1500W电机
- 空气冷却

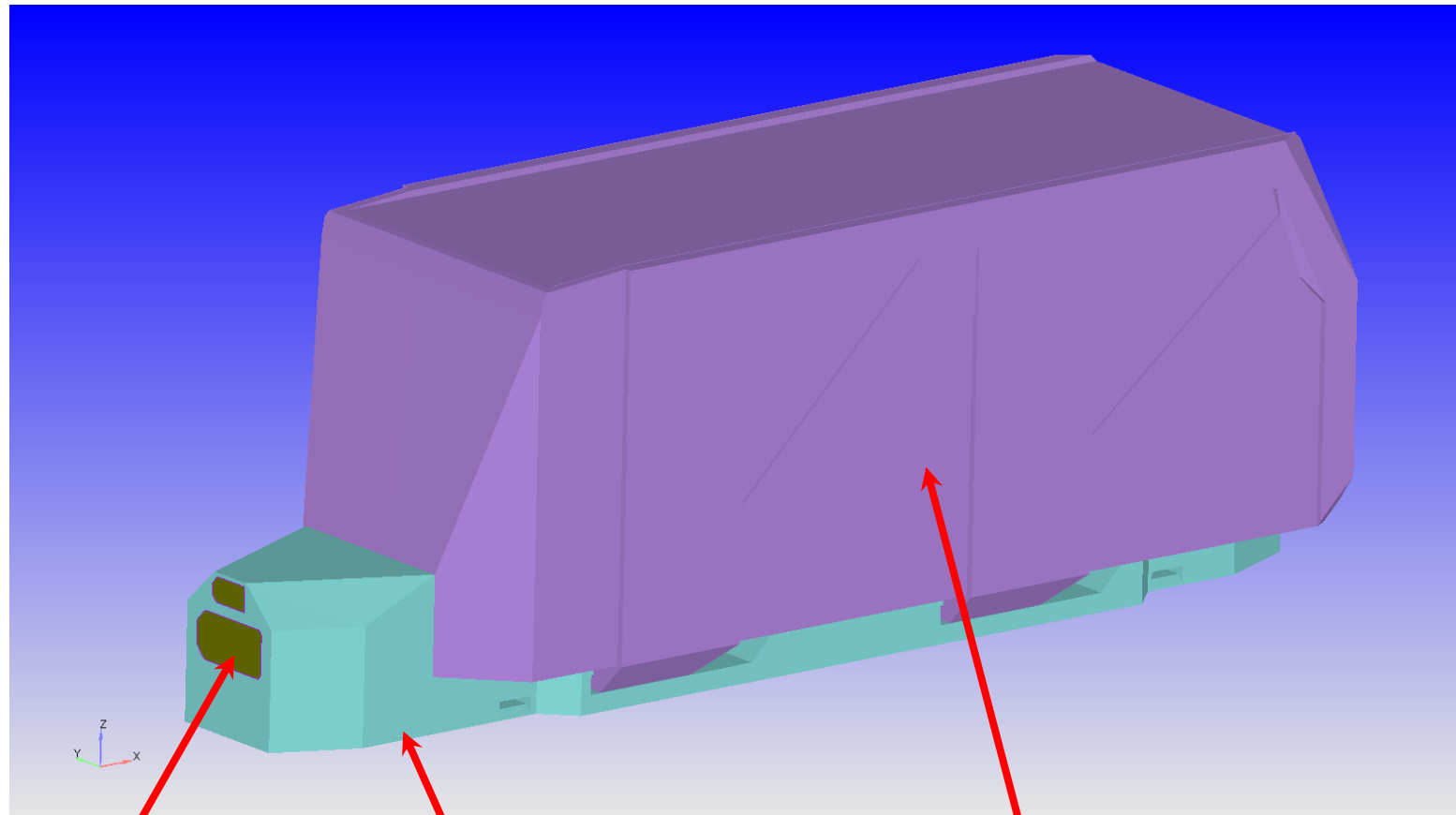
## ■ CONVERGE使用

- 正常工作条件下评估电池单元温度
- 进行排气安全和热失控分析



# CONVERGE应用案例——电池组冷却

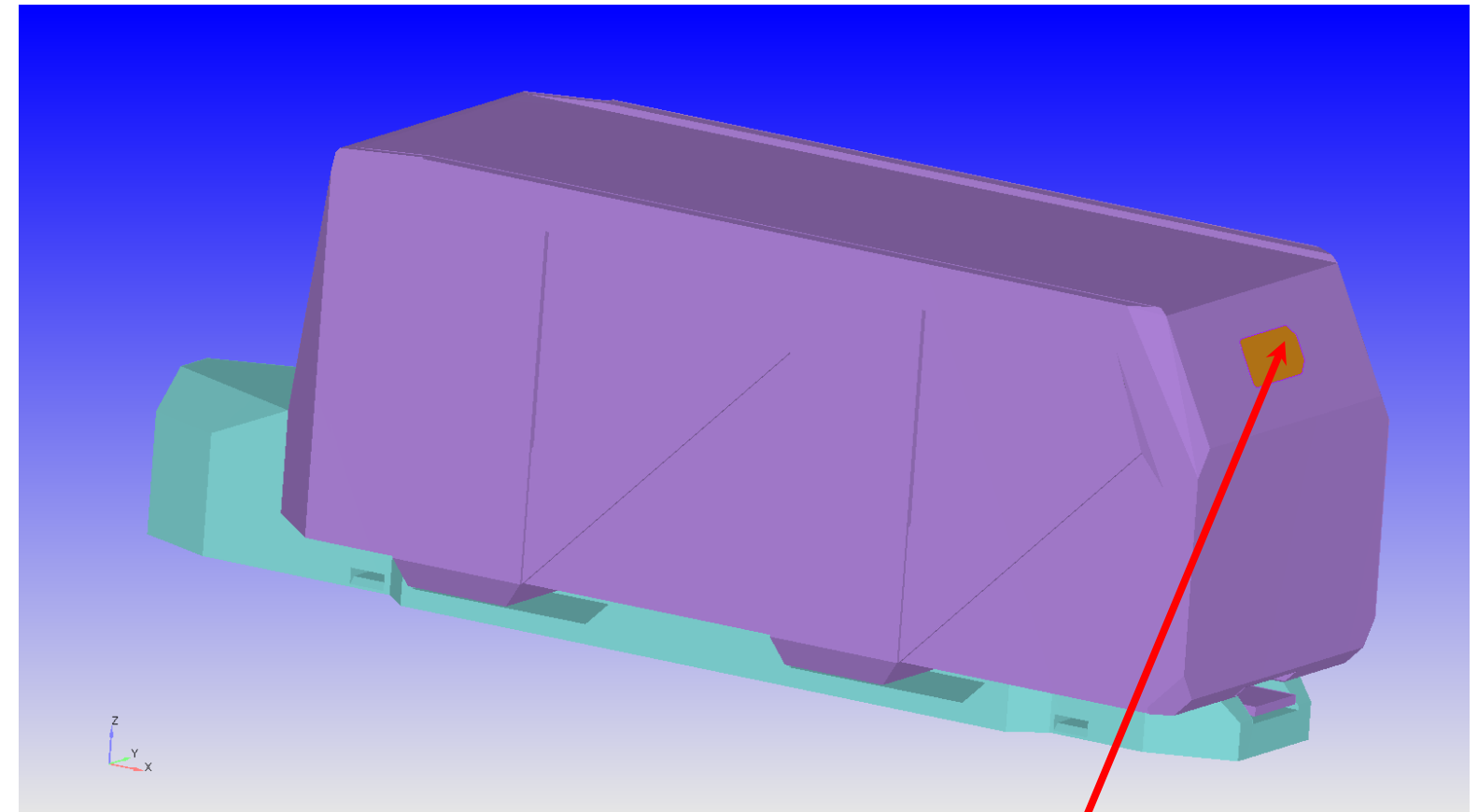
## 电池组模型：外部几何



空气入口

框架基座

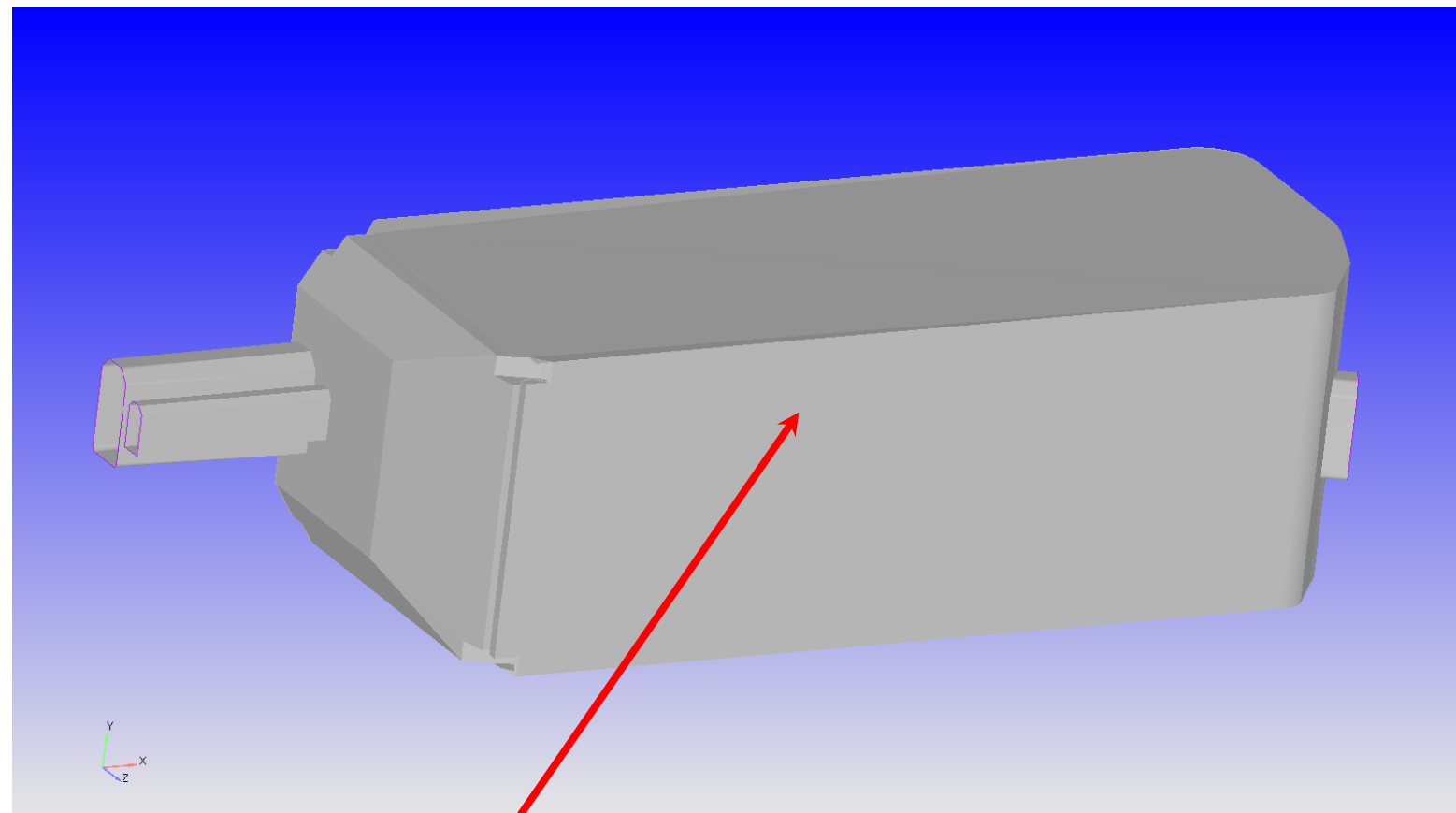
外框架



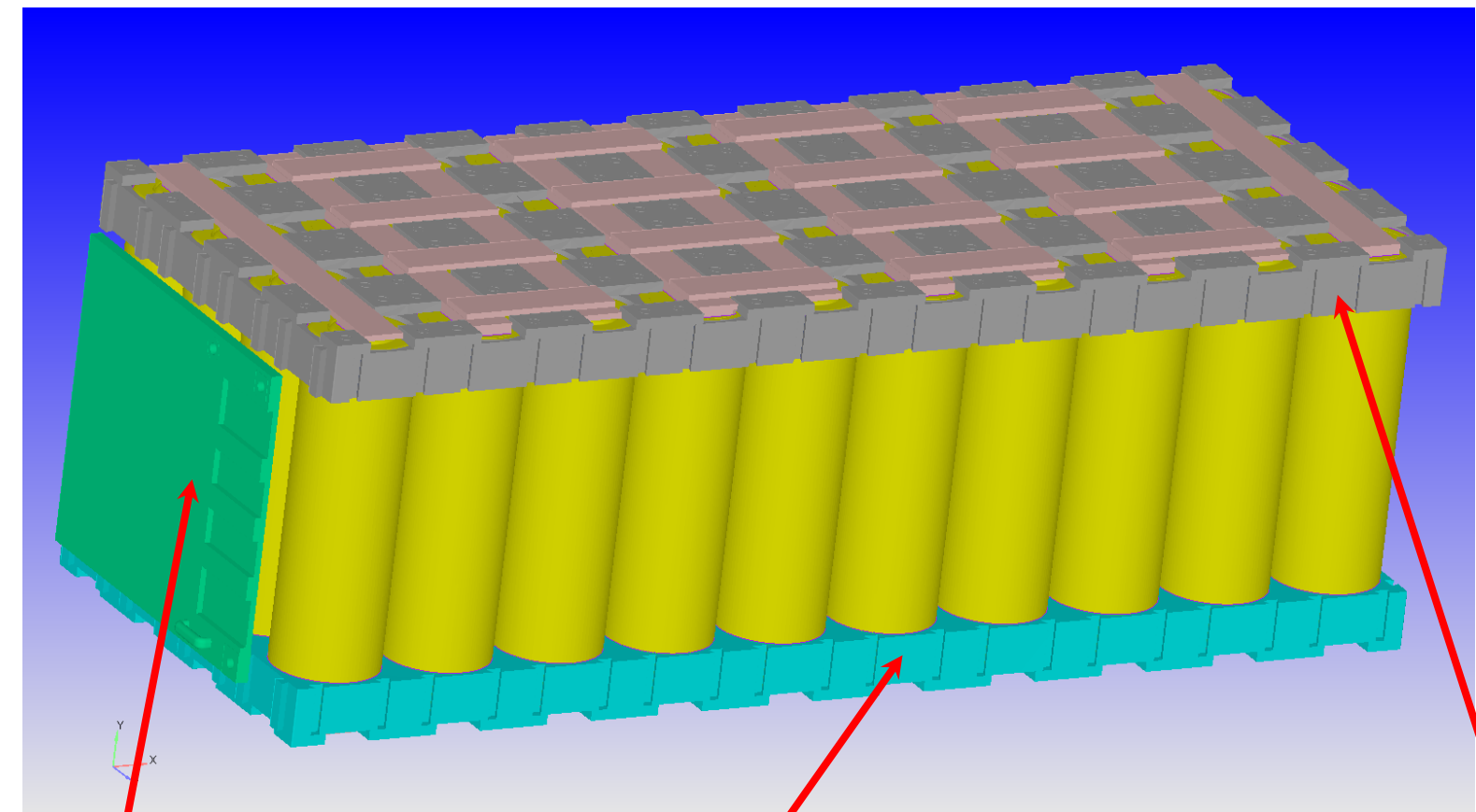
空气出口

# CONVERGE应用案例——电池组冷却

电池组模型：内部几何



框架内表面



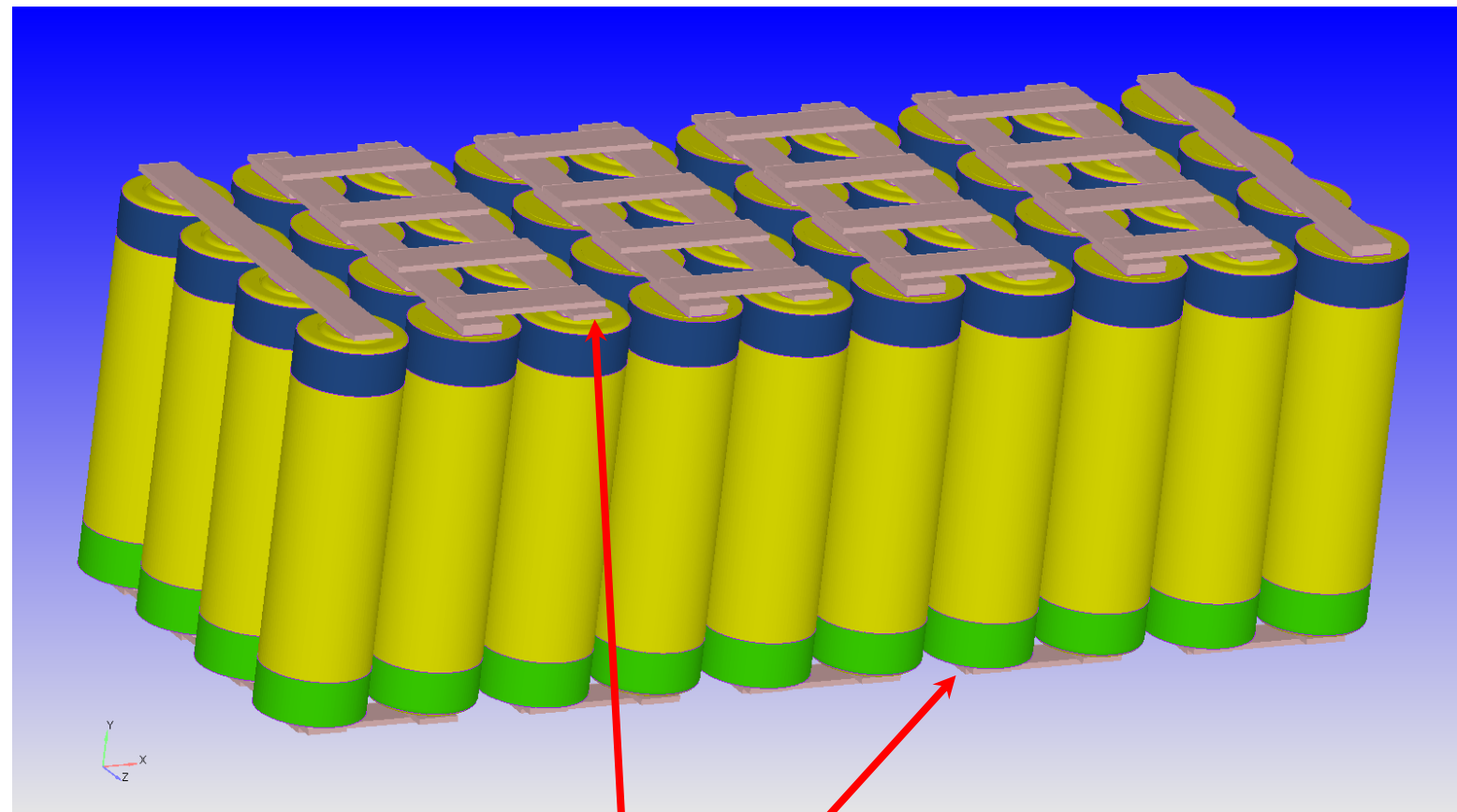
电池管理系统

隔板

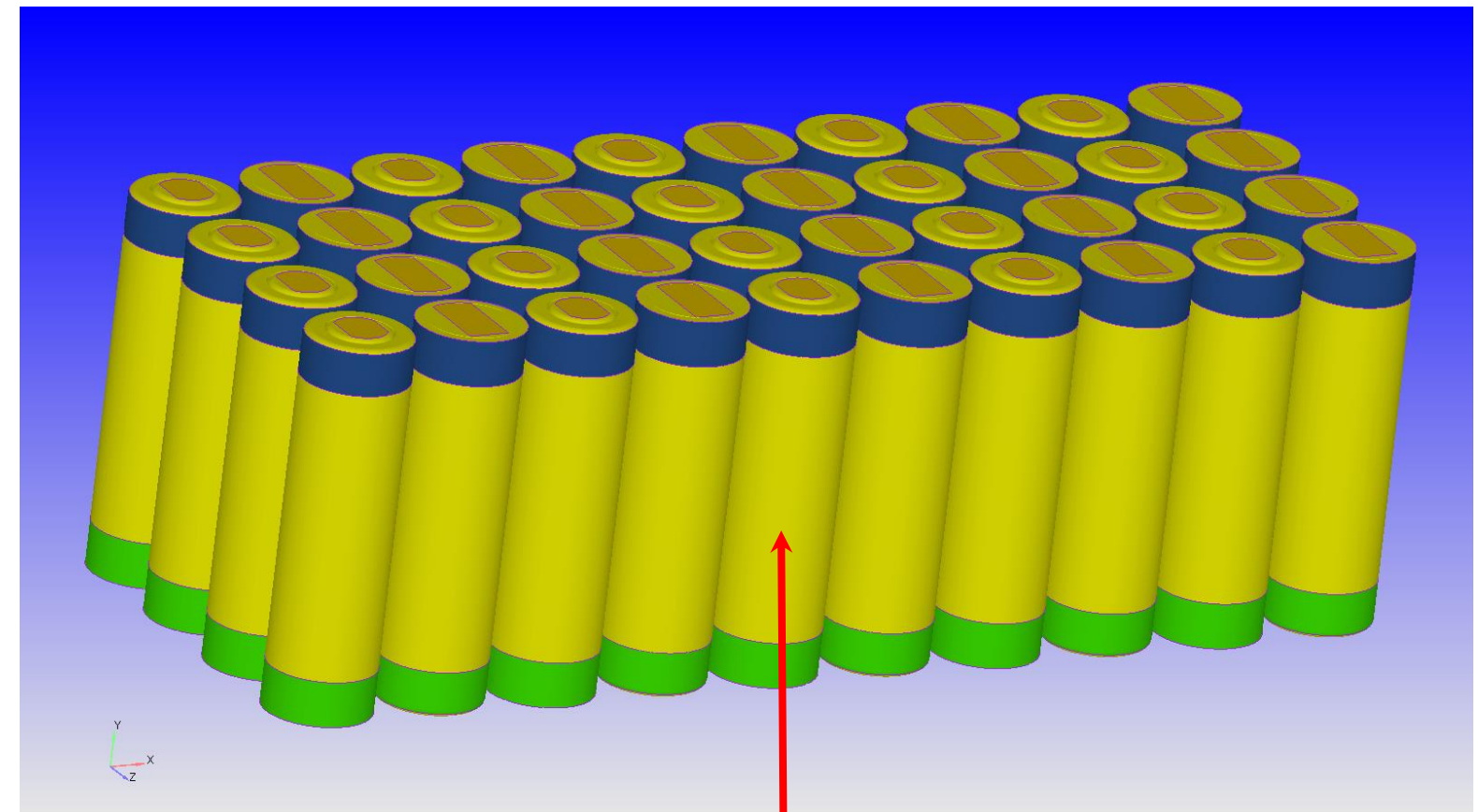
隔板

# CONVERGE应用案例——电池组冷却

电池组模型： 电池单元几何



镍带

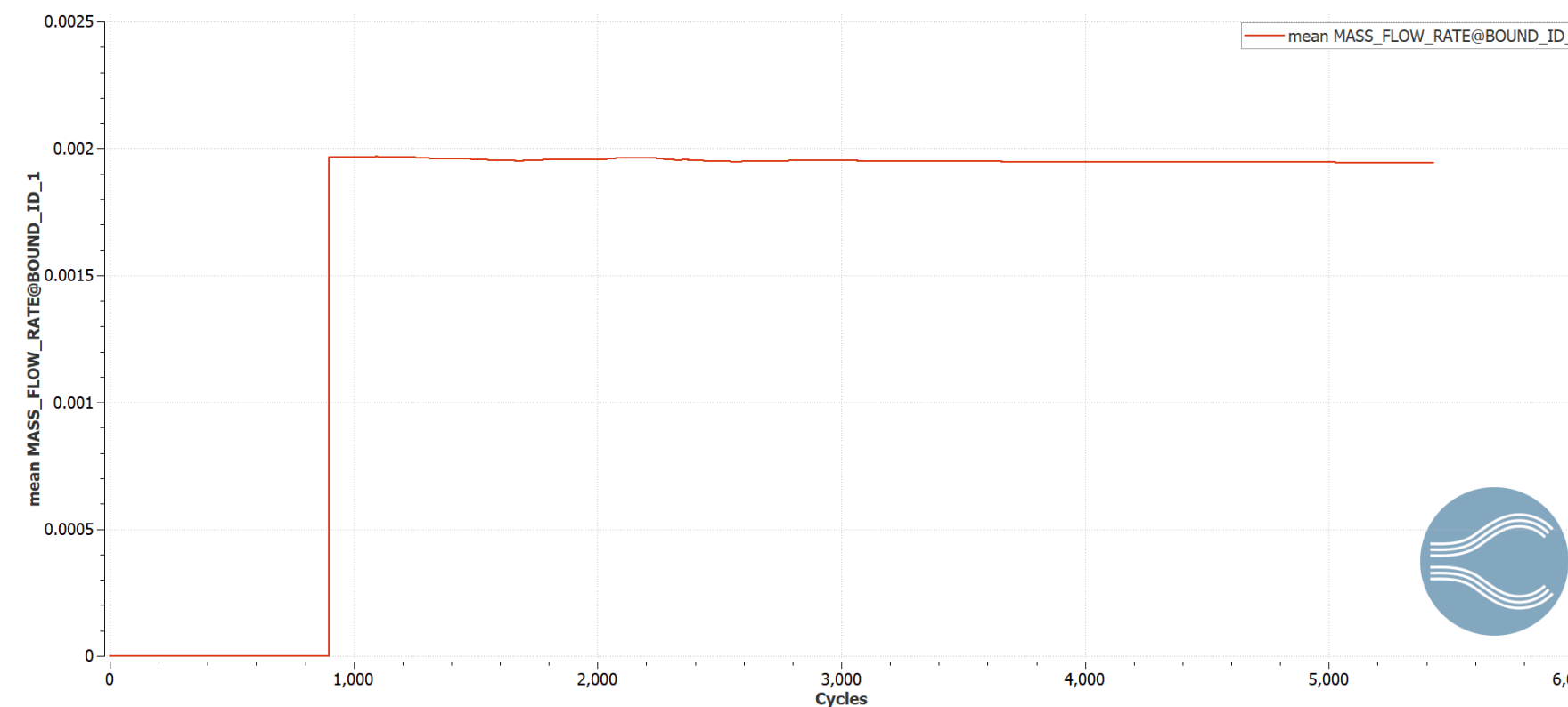
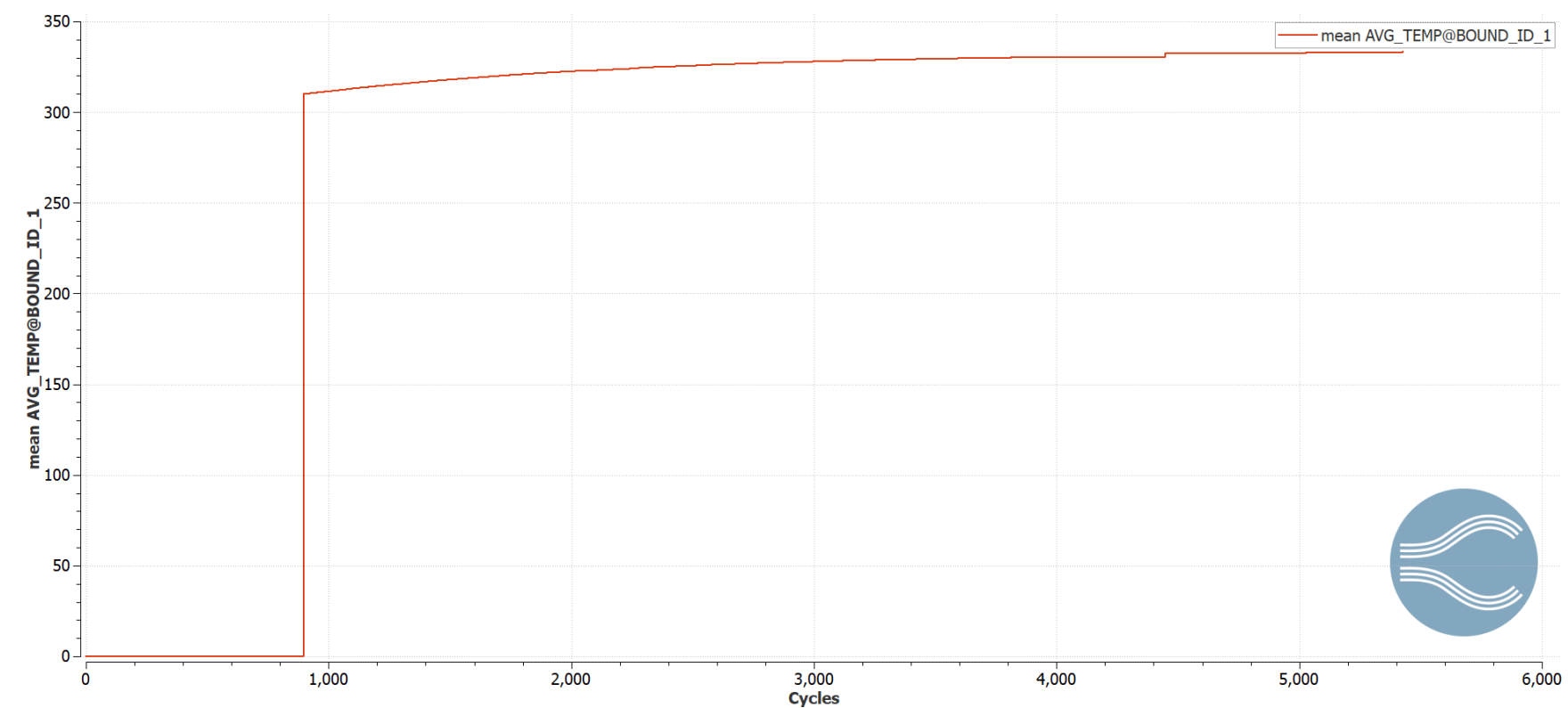
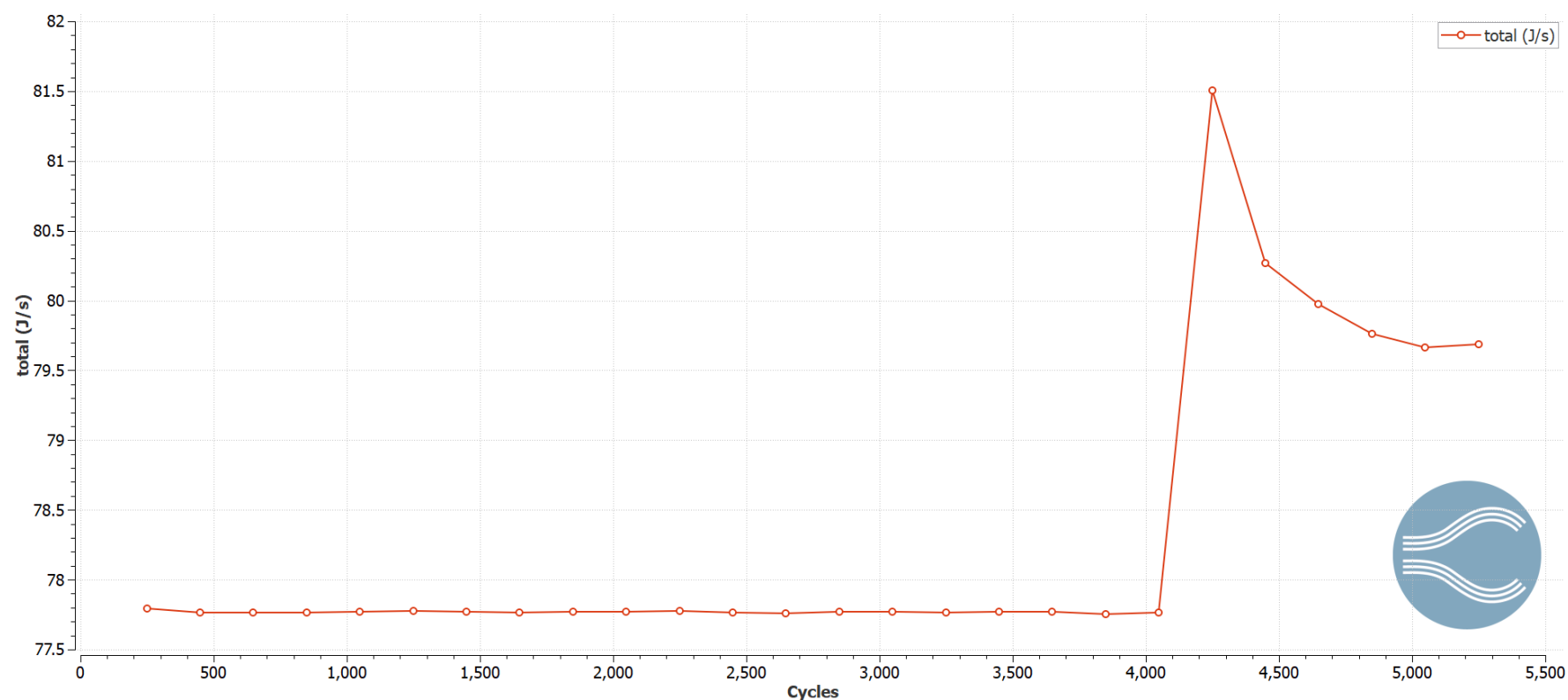


18650 锂离子电池单元

# CONVERGE应用案例——电池组冷却

## 稳态结果

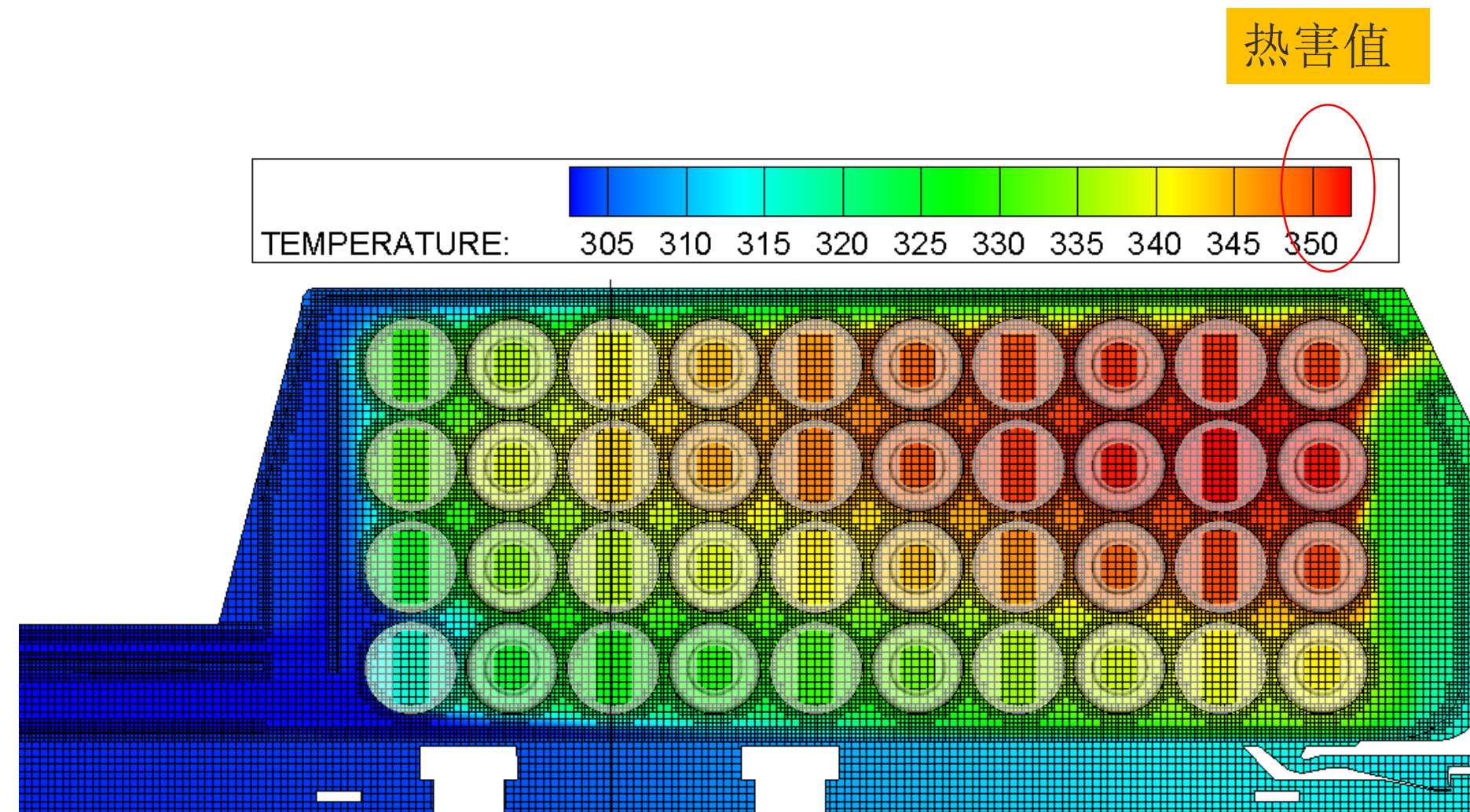
■ 整体能量平衡，出口的温度和质量流量收敛



# CONVERGE应用案例——电池组冷却

## 电池单元温度

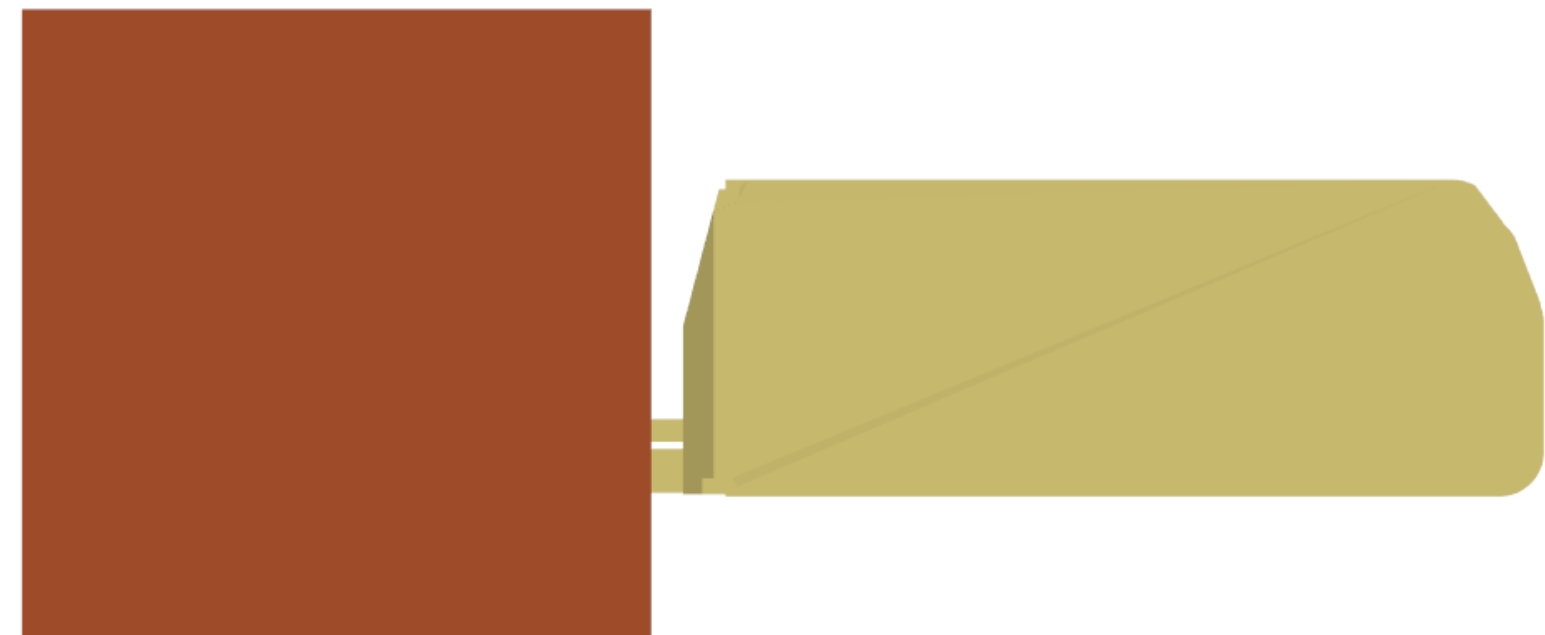
- 最高温度在空气出口附近
- 局部温度达到一定值时可能需要关注热失控
  - 80° C: 固体电解质 (solid electrolyte interphase SEI) 层开始分解



# CONVERGE应用案例——电池组燃烧

真实的电动自行车用电池组（外部CAD）

- Forty 18650 Li-ion充电电池
- 镍带连接及电池管理系统（BMS）芯片
- 封装外壳

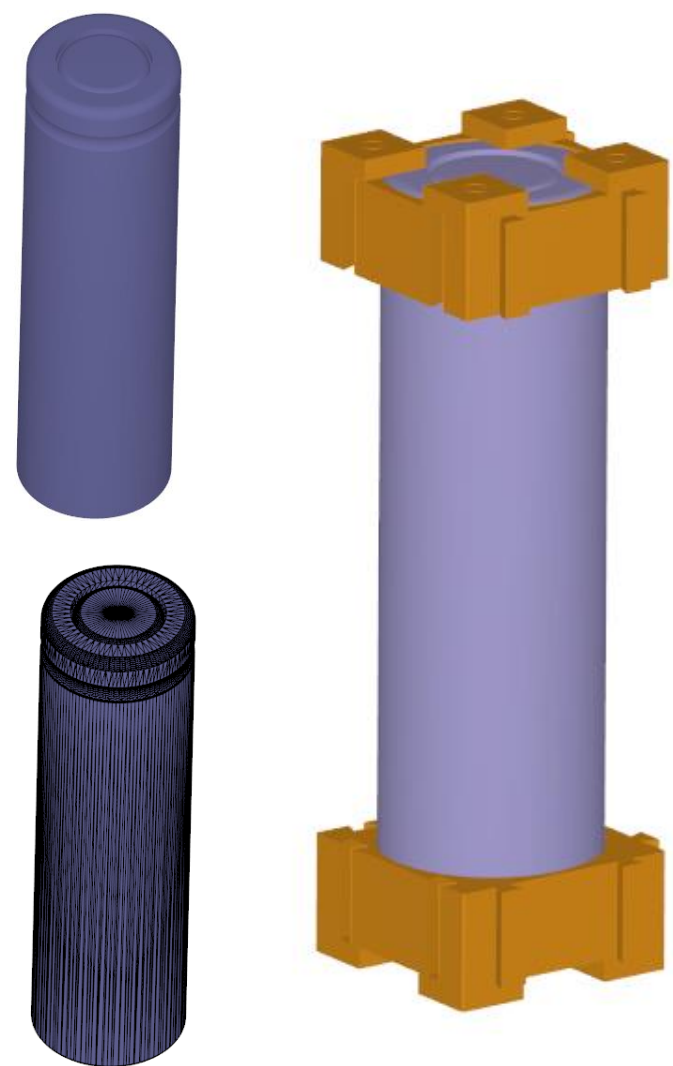


V3.0 CONVERGE Studio

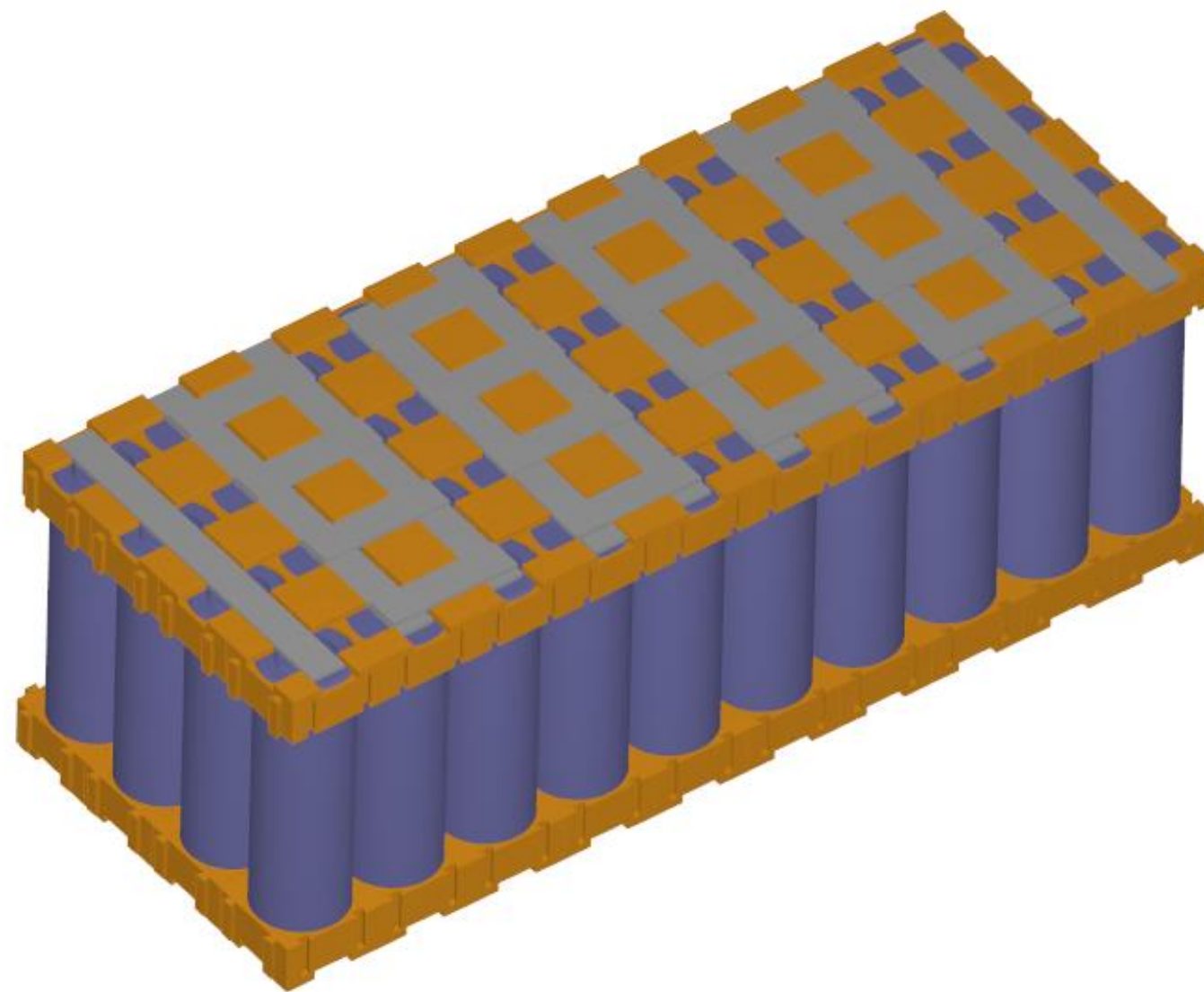
- 可直接读取原始CAD文件
- 几何工具+ Polygonica可以轻松连接不同的实体部分，简化和创建流体域

# CONVERGE应用案例——电池组燃烧

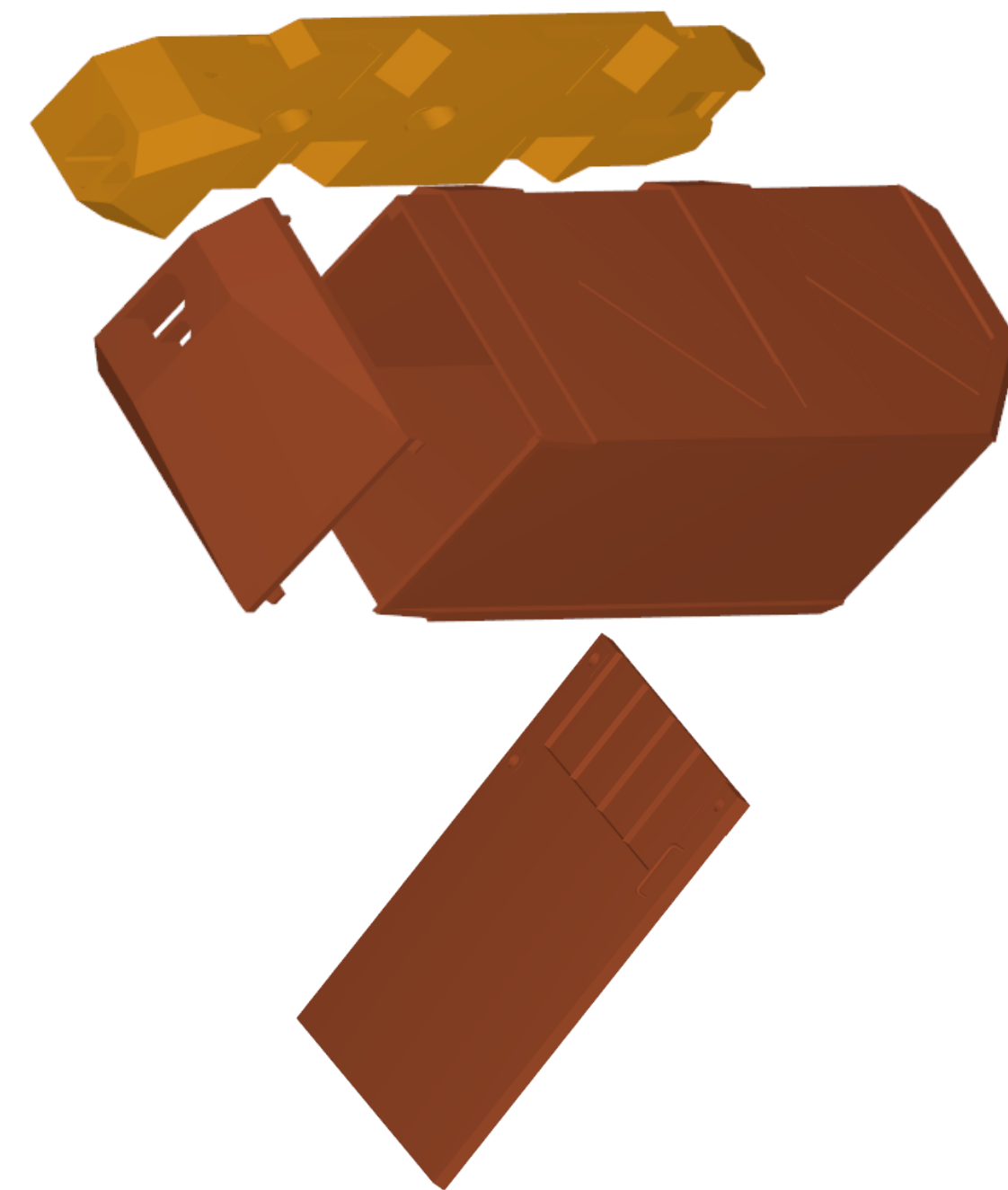
## 电池组模型



电池单元组成



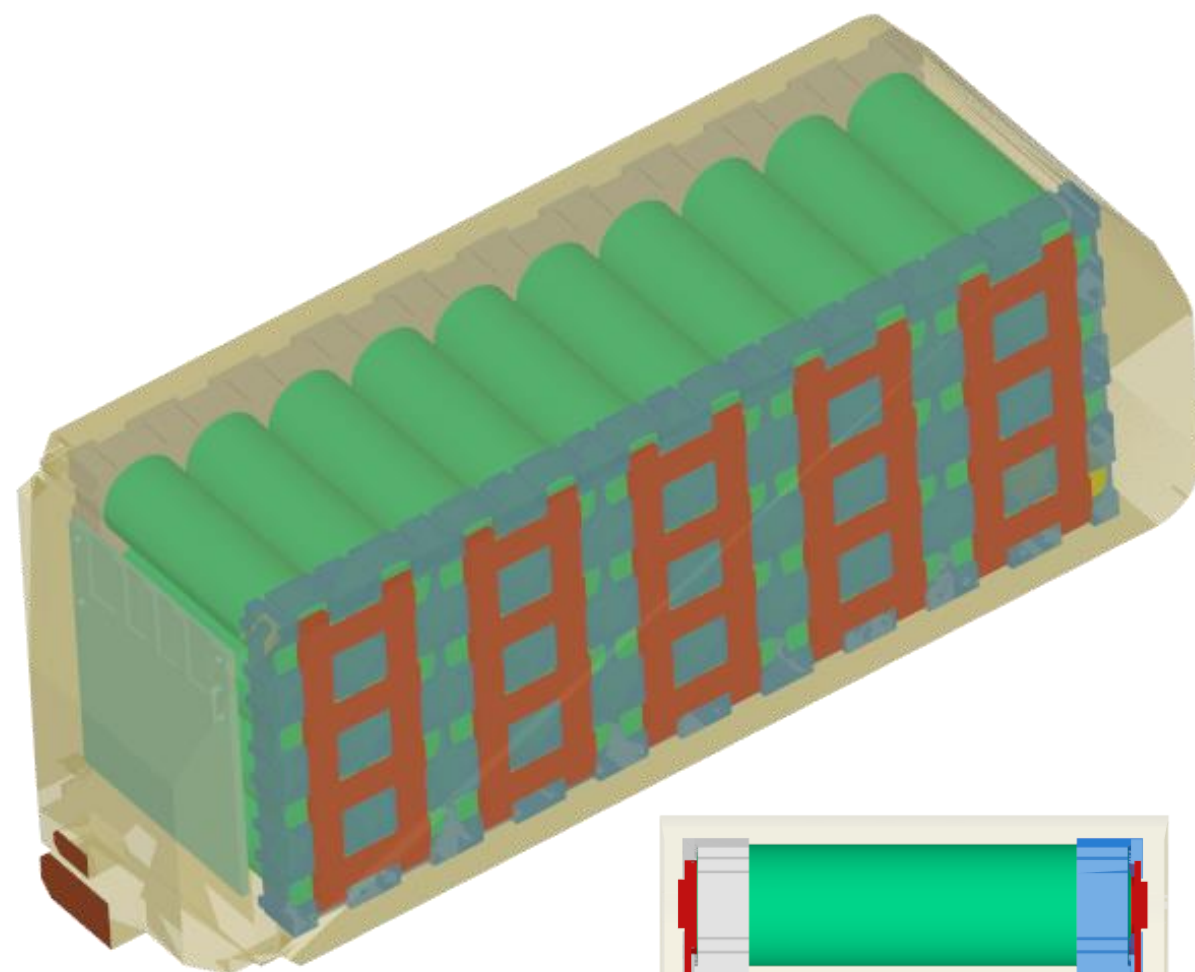
电池组



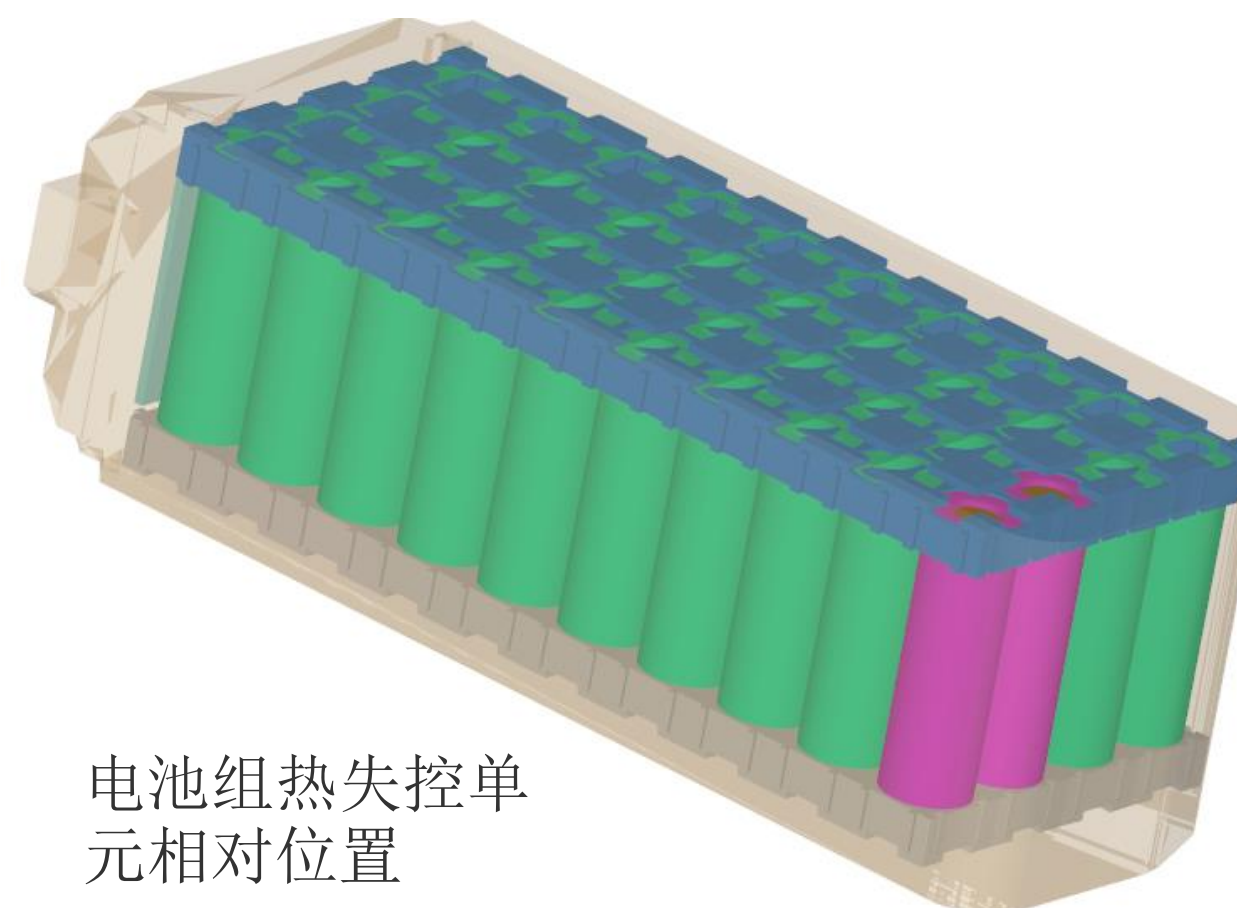
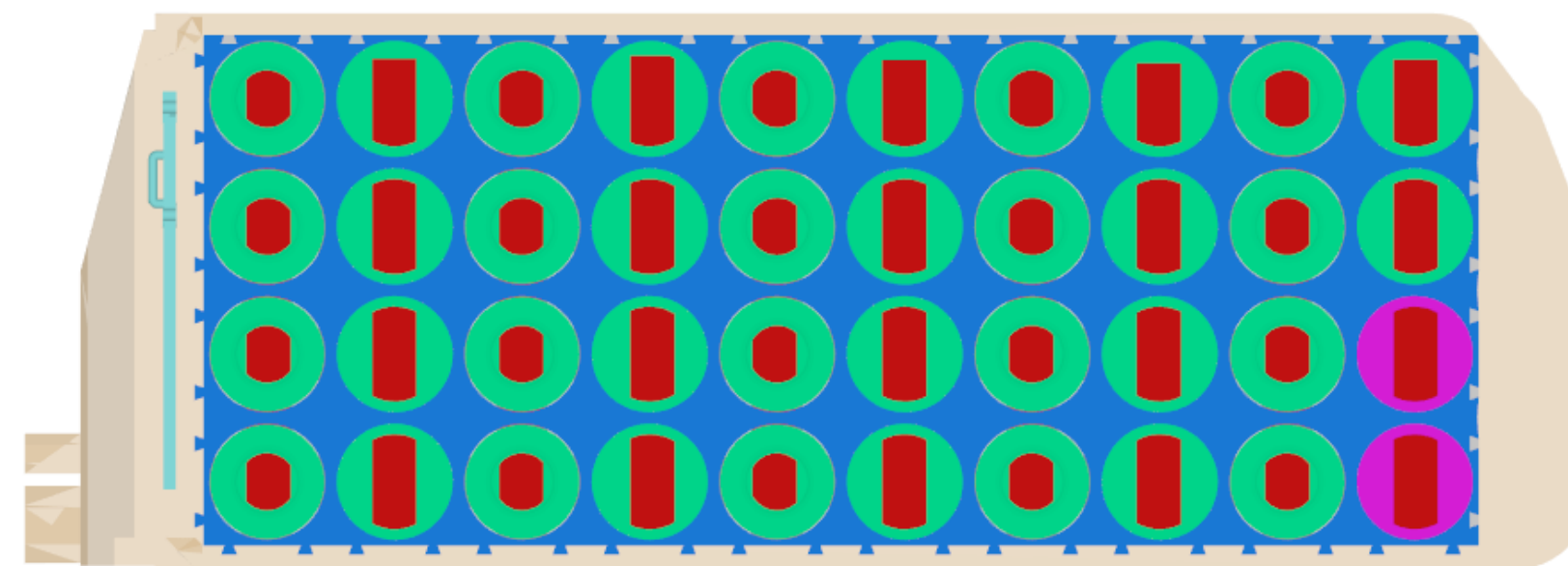
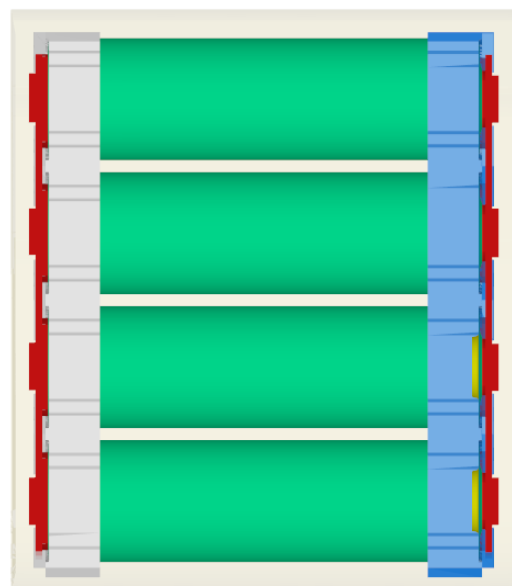
外壳及隔板

# CONVERGE应用案例——电池组燃烧

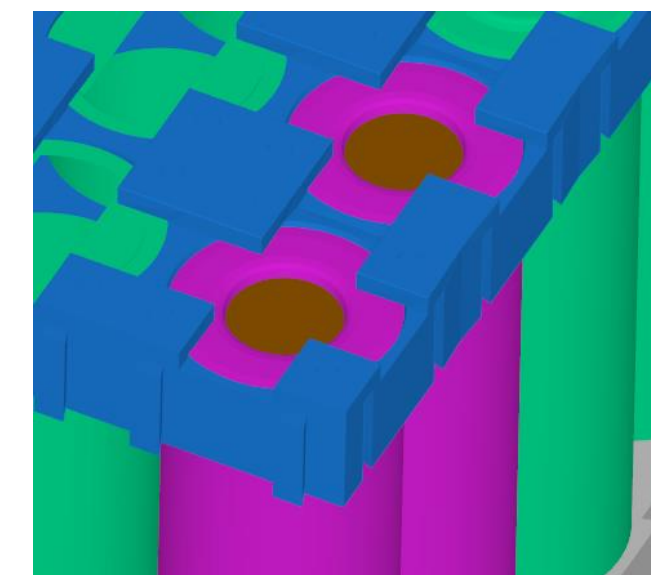
## 电池组模型



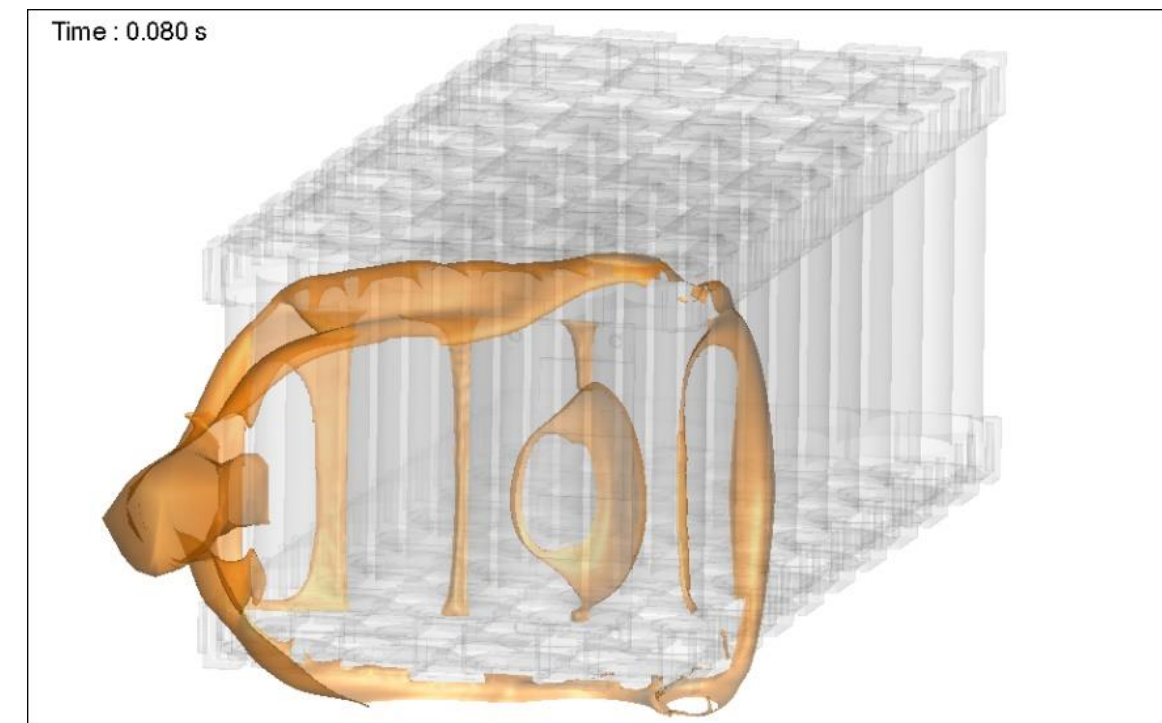
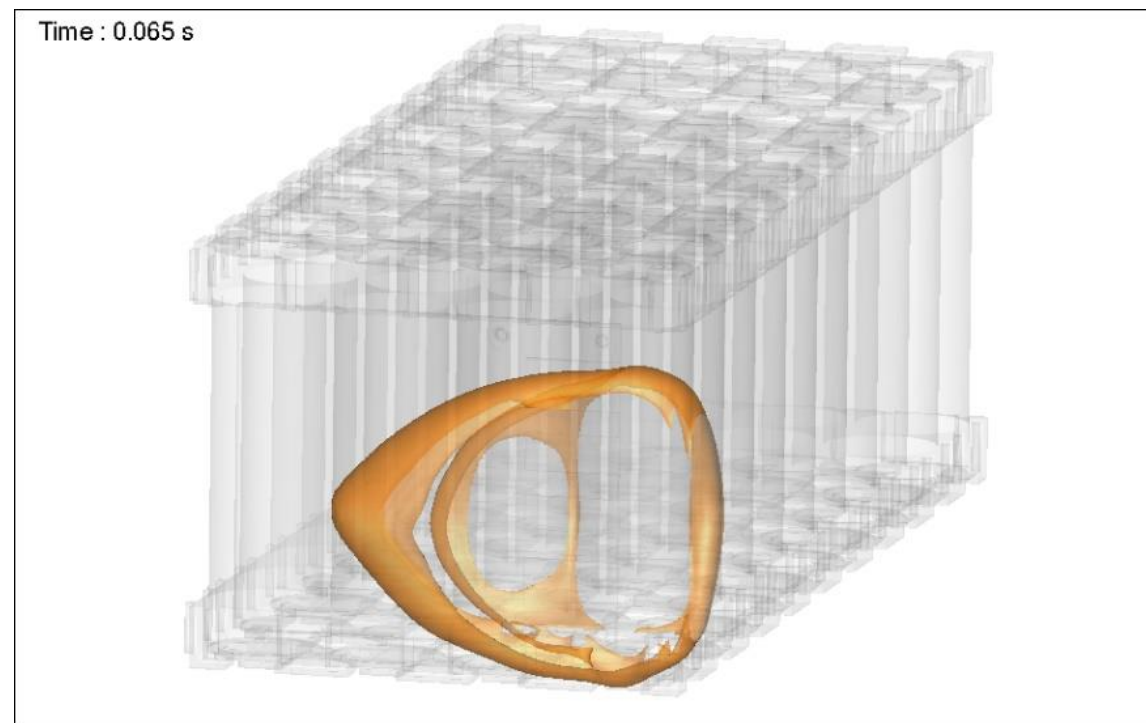
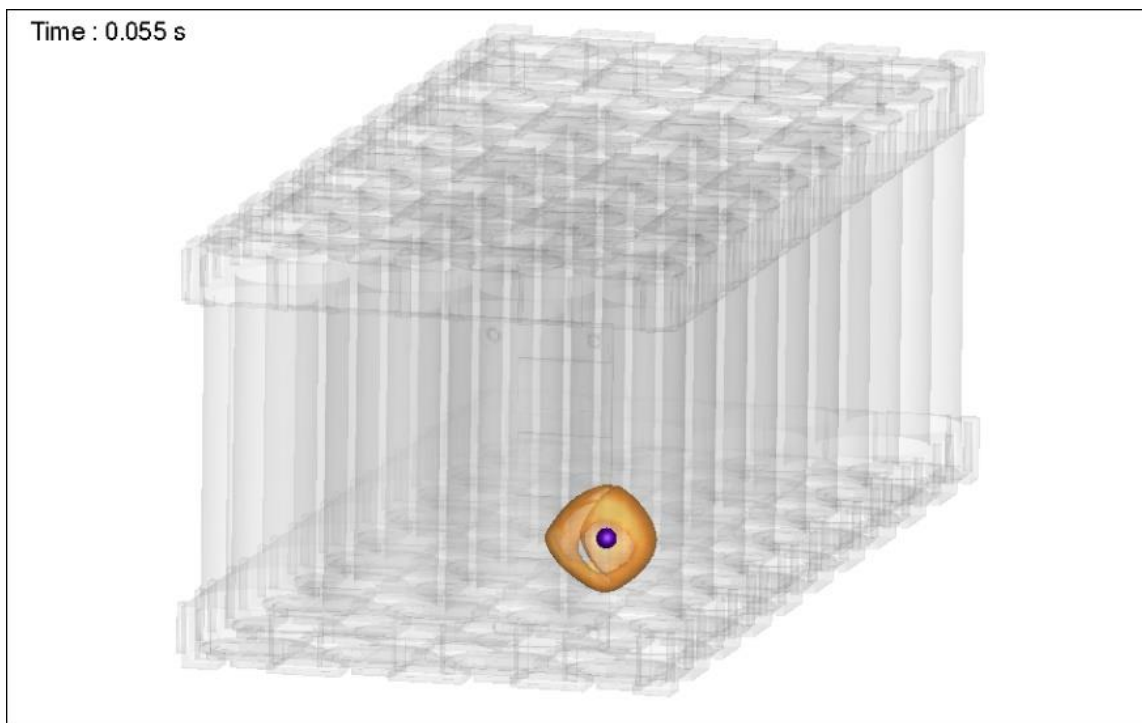
电池组相关部件  
接触关系



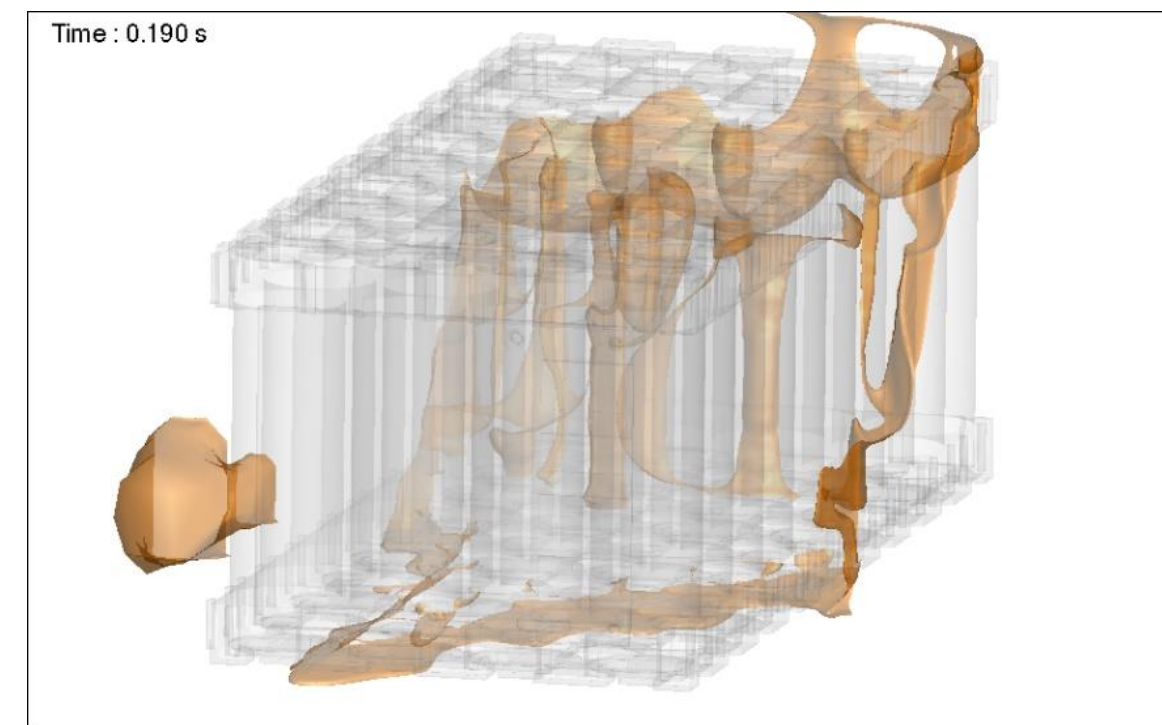
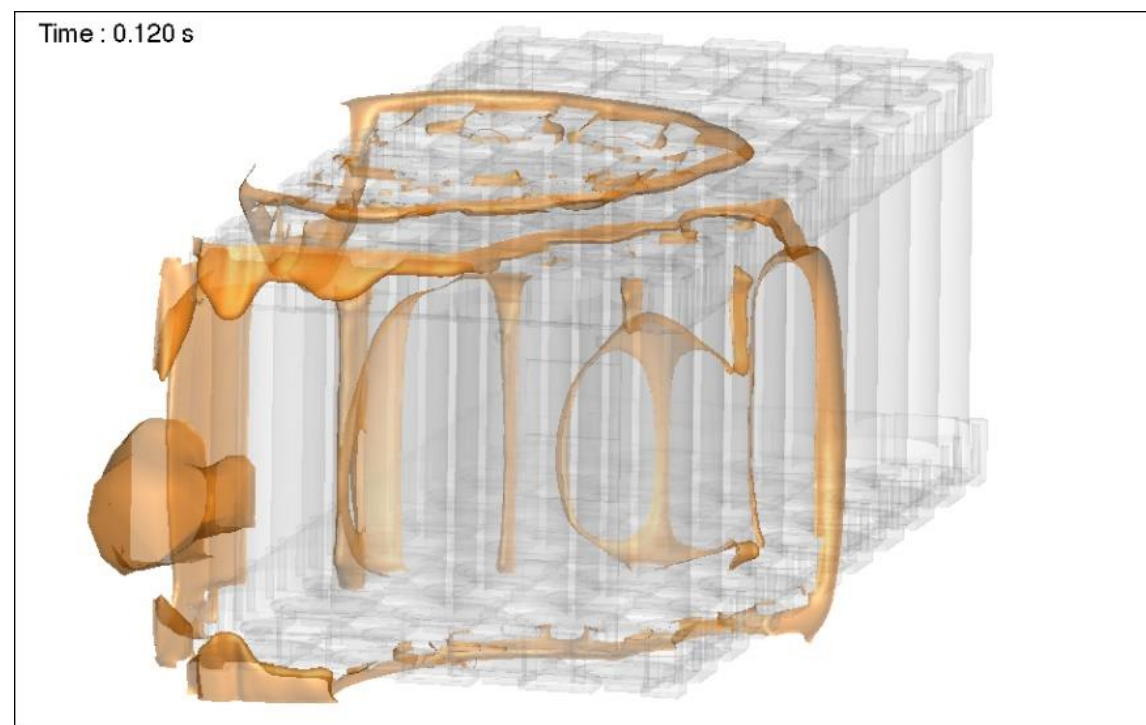
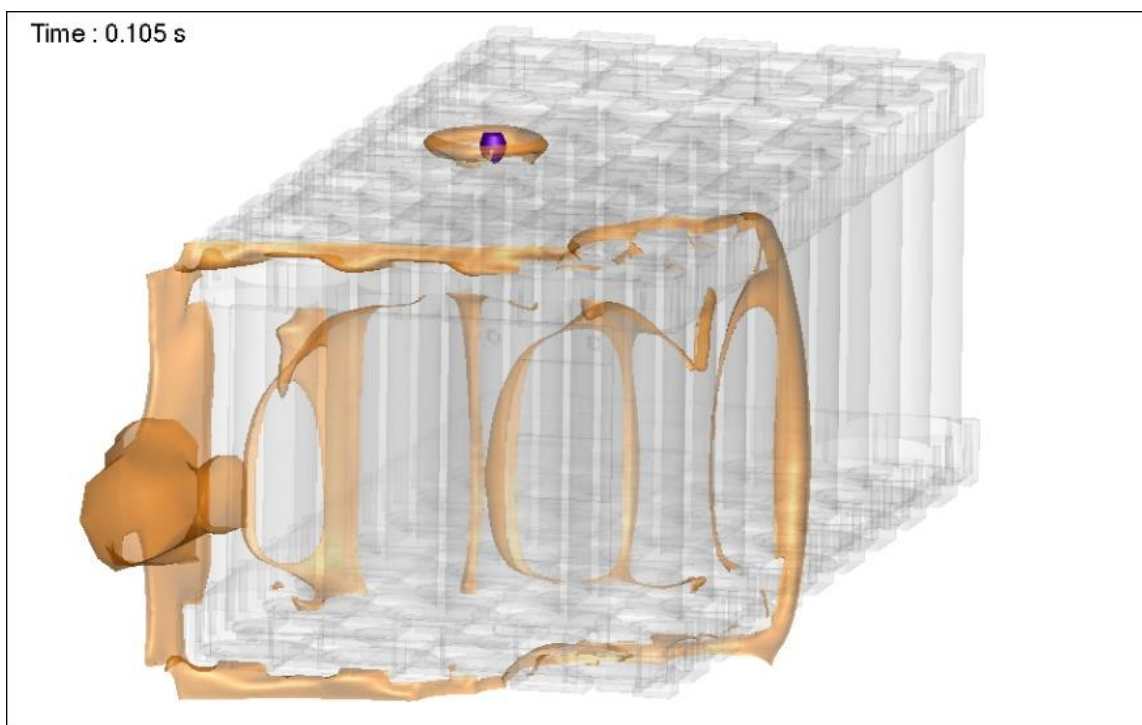
电池组热失控单  
元相对位置



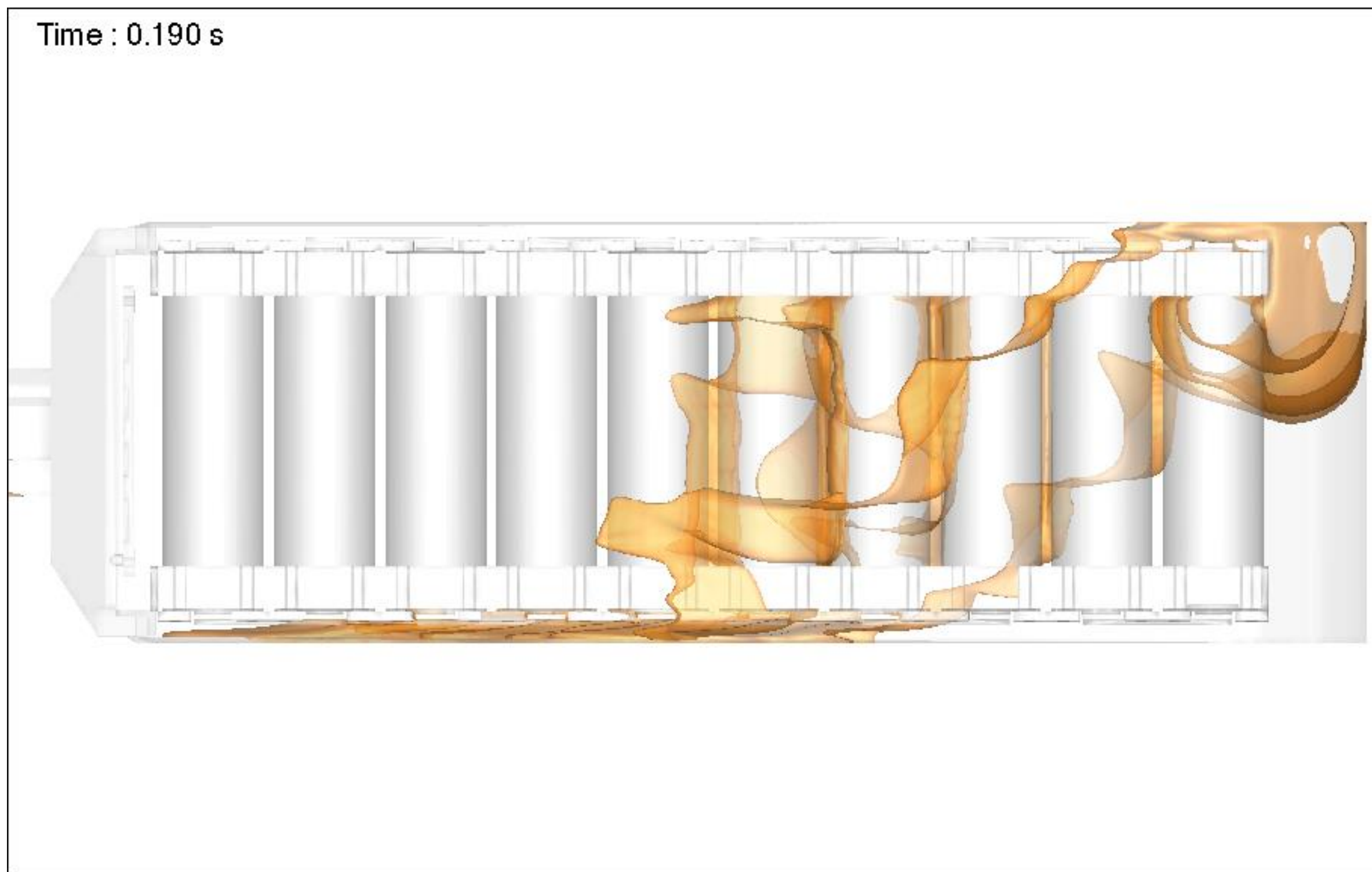
# CONVERGE应用案例——电池组燃烧



预填充壳体内BMS和远端单元短路，不同时间段的火焰（温度）等值面，深红色球体为能量源

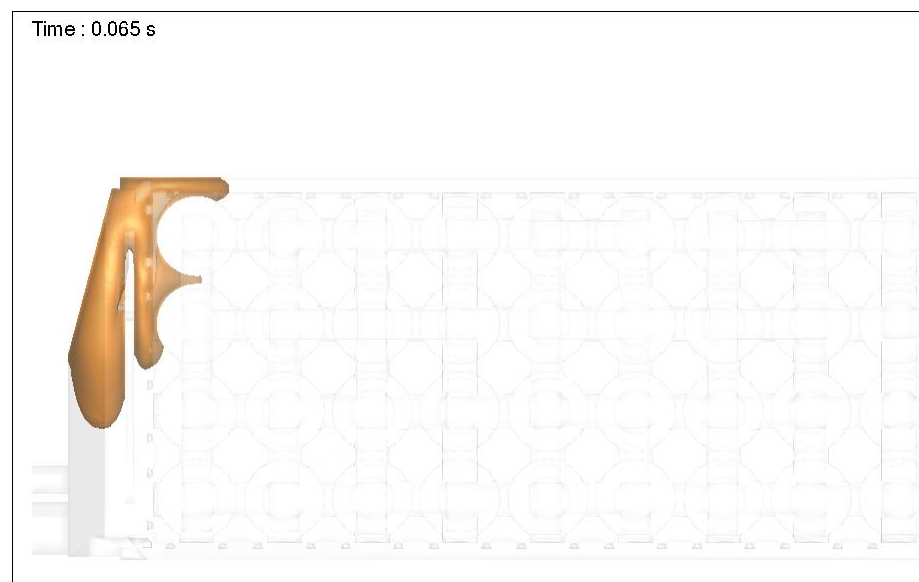


# CONVERGE应用案例——电池组燃烧

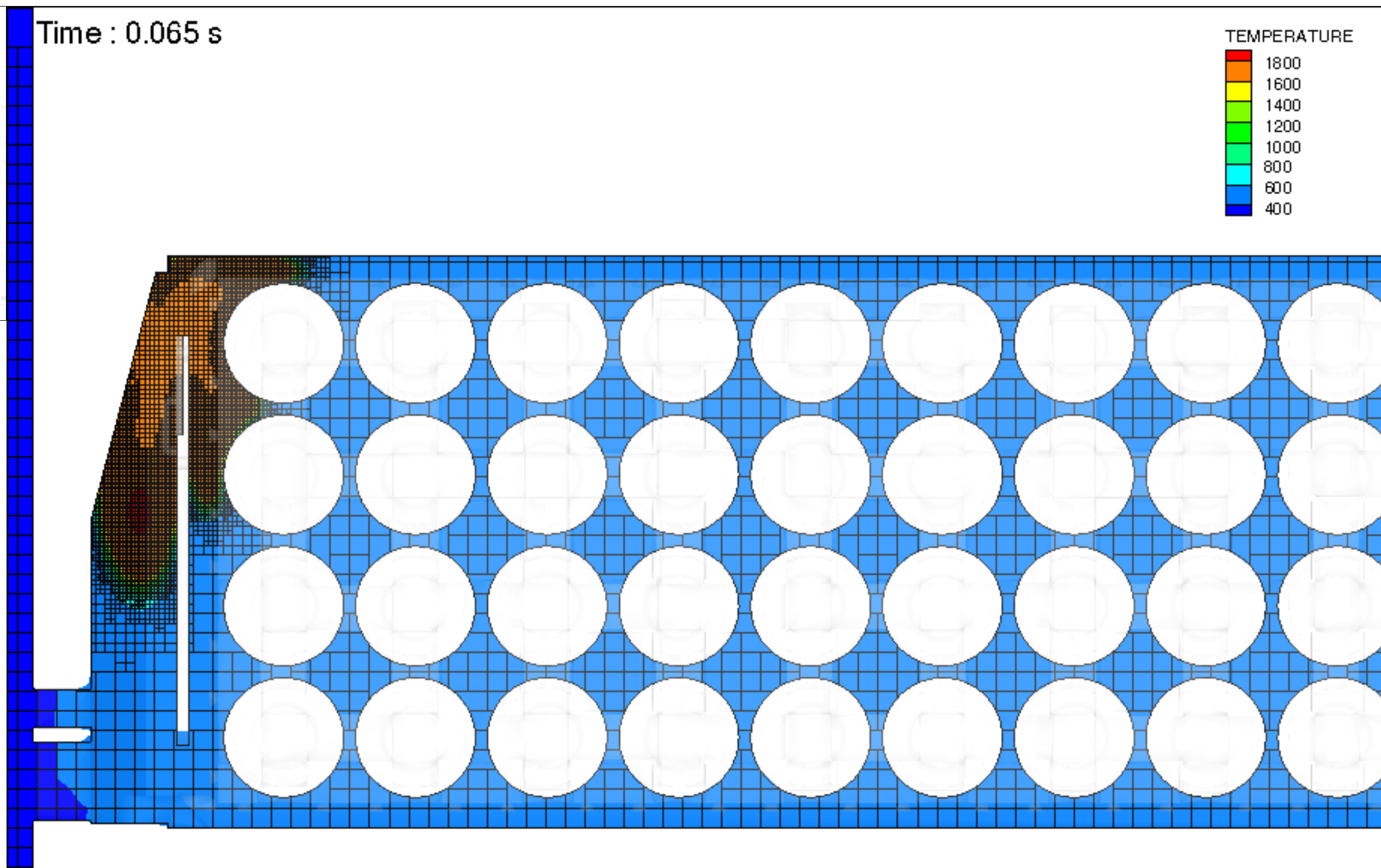


火焰发展过程预测

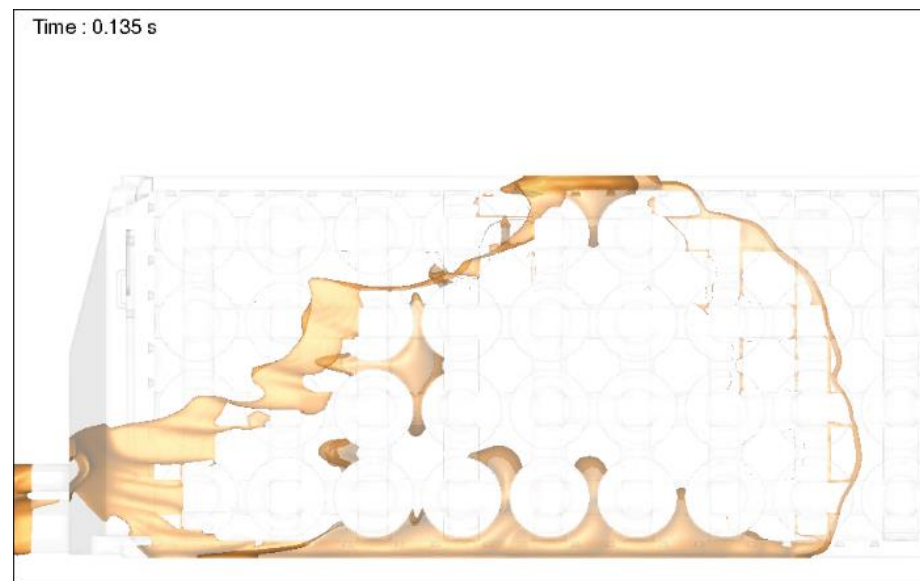
# CONVERGE应用案例——电池组燃烧



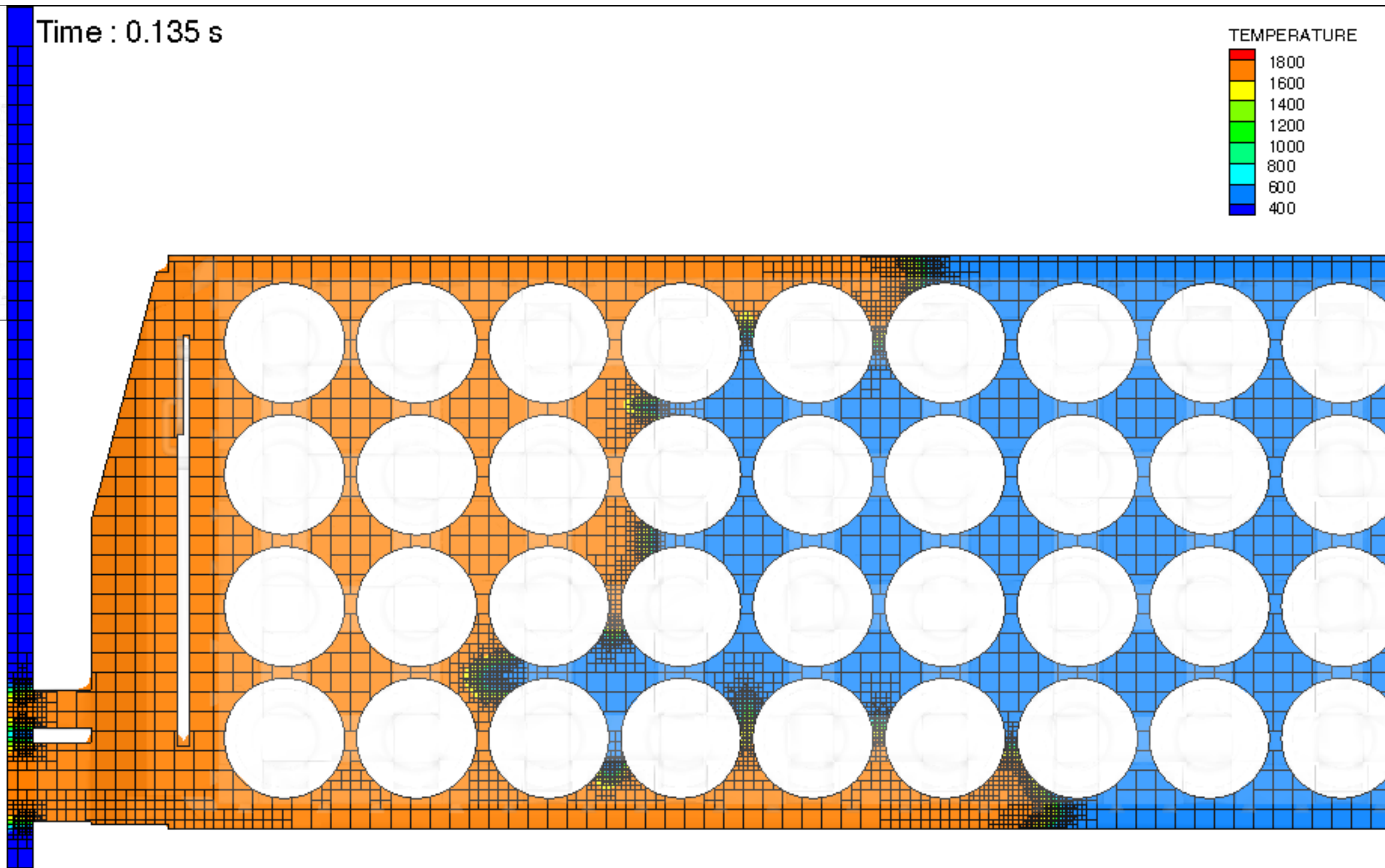
温度自适应求解火焰前端



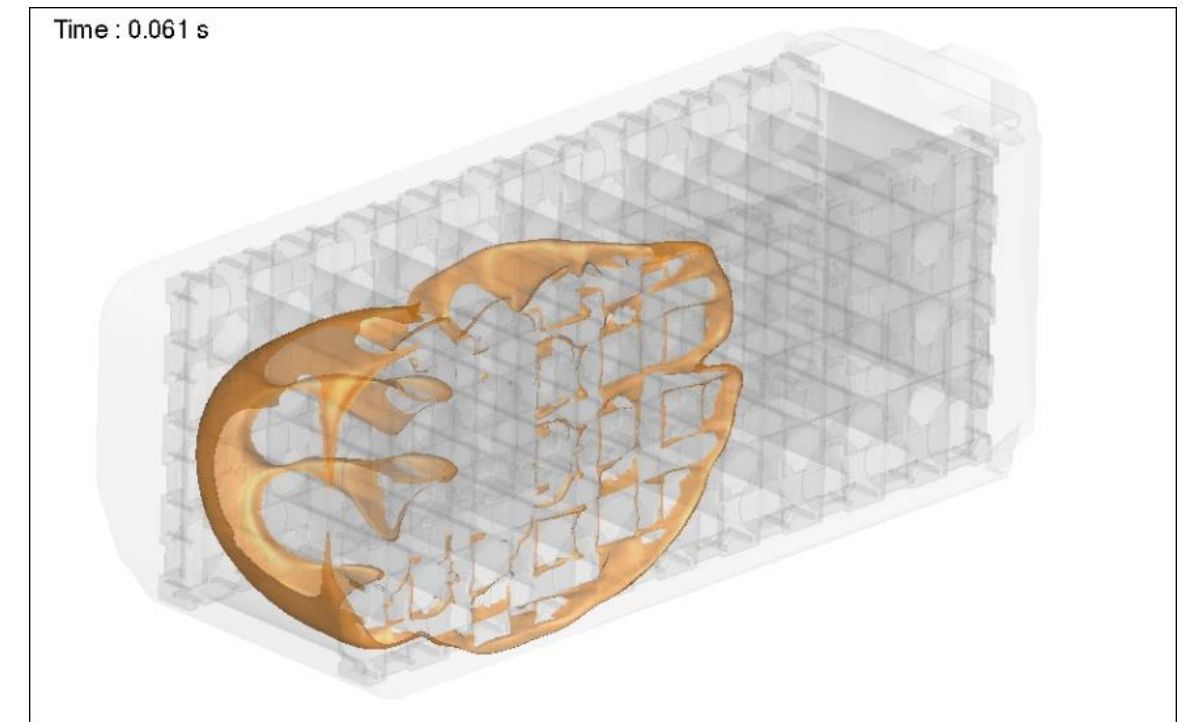
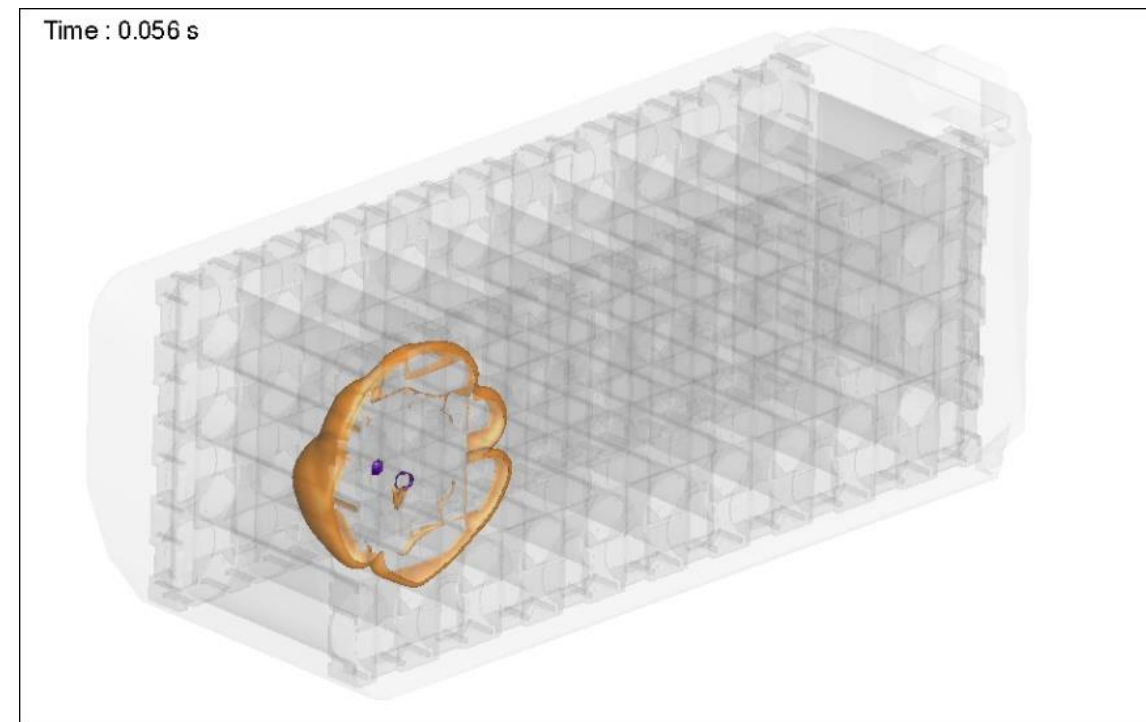
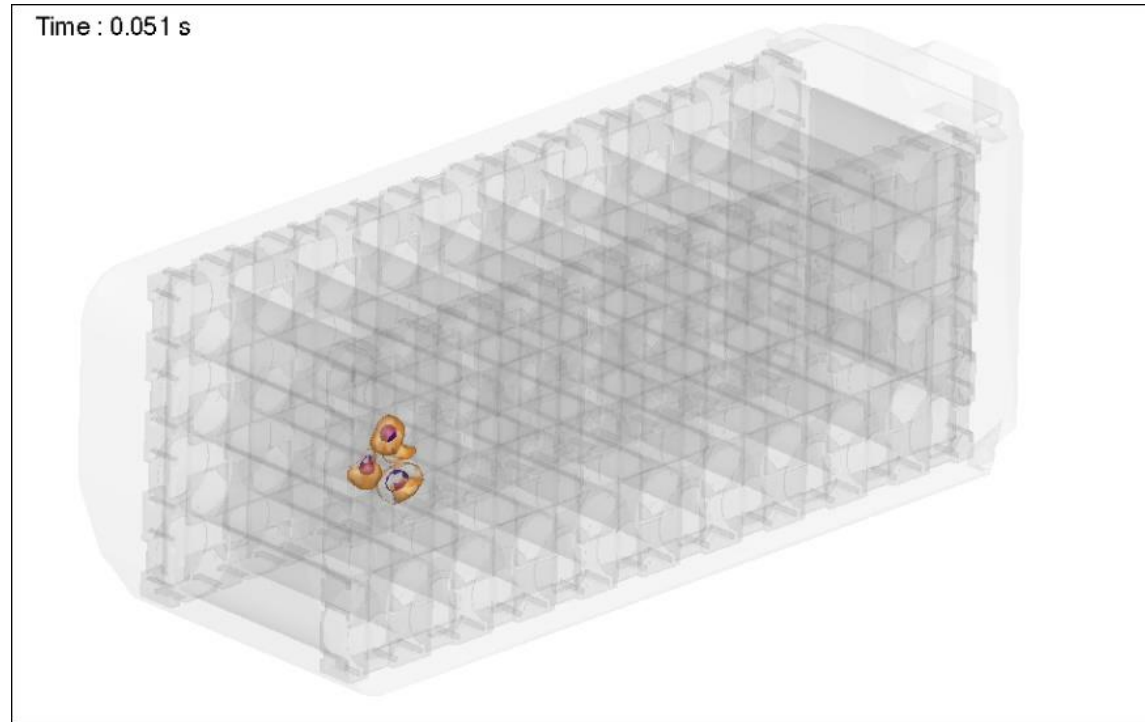
# CONVERGE应用案例——电池组燃烧



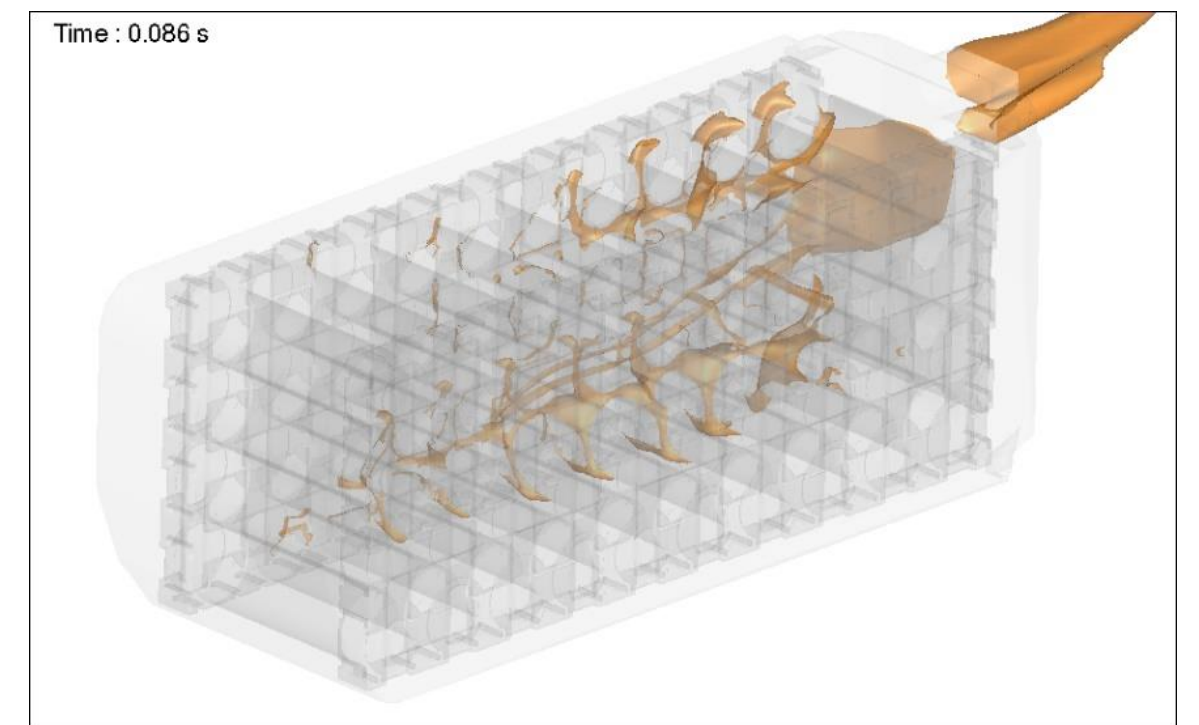
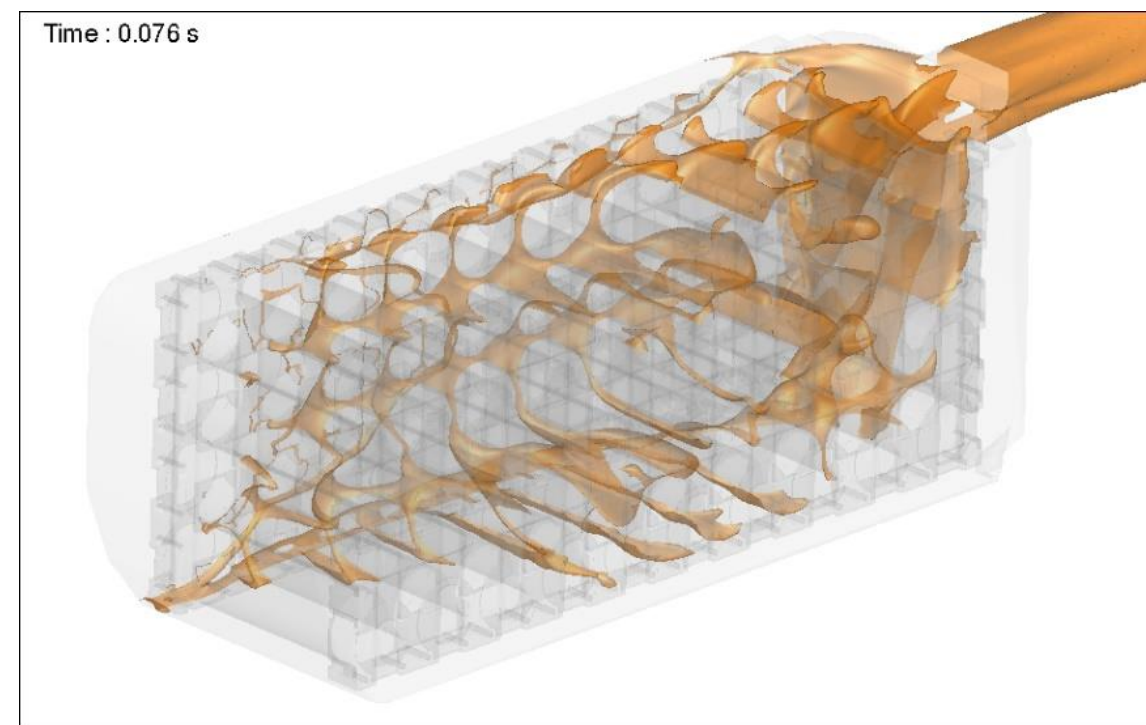
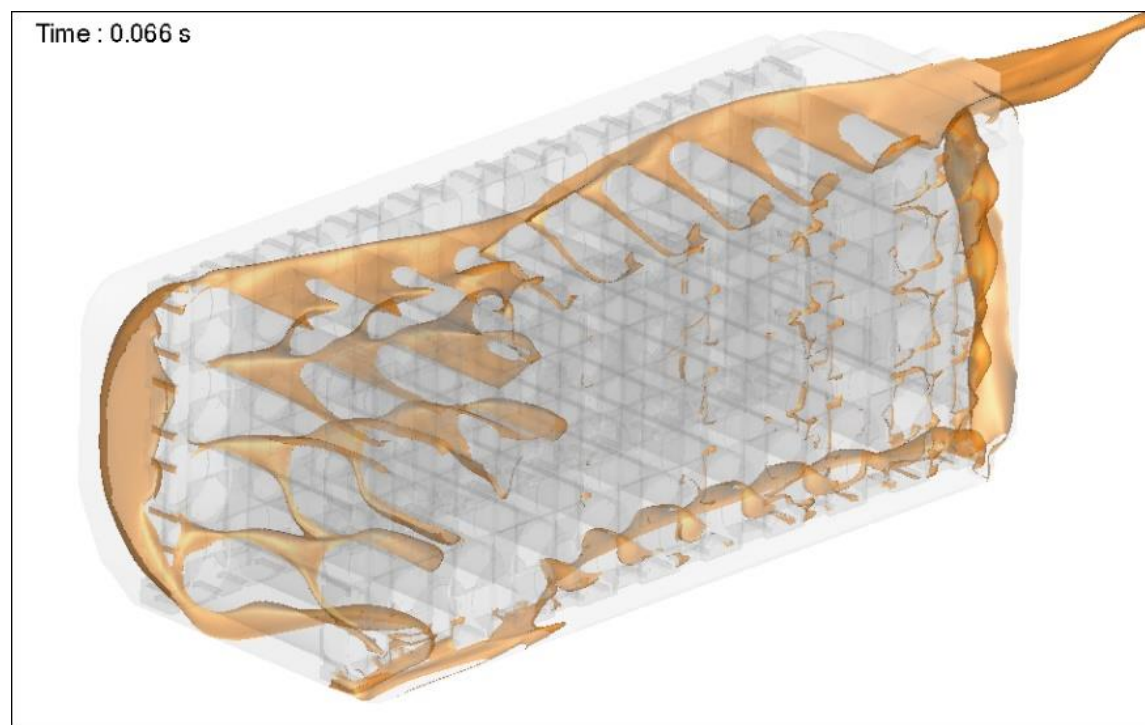
温度自适应求解火焰前端



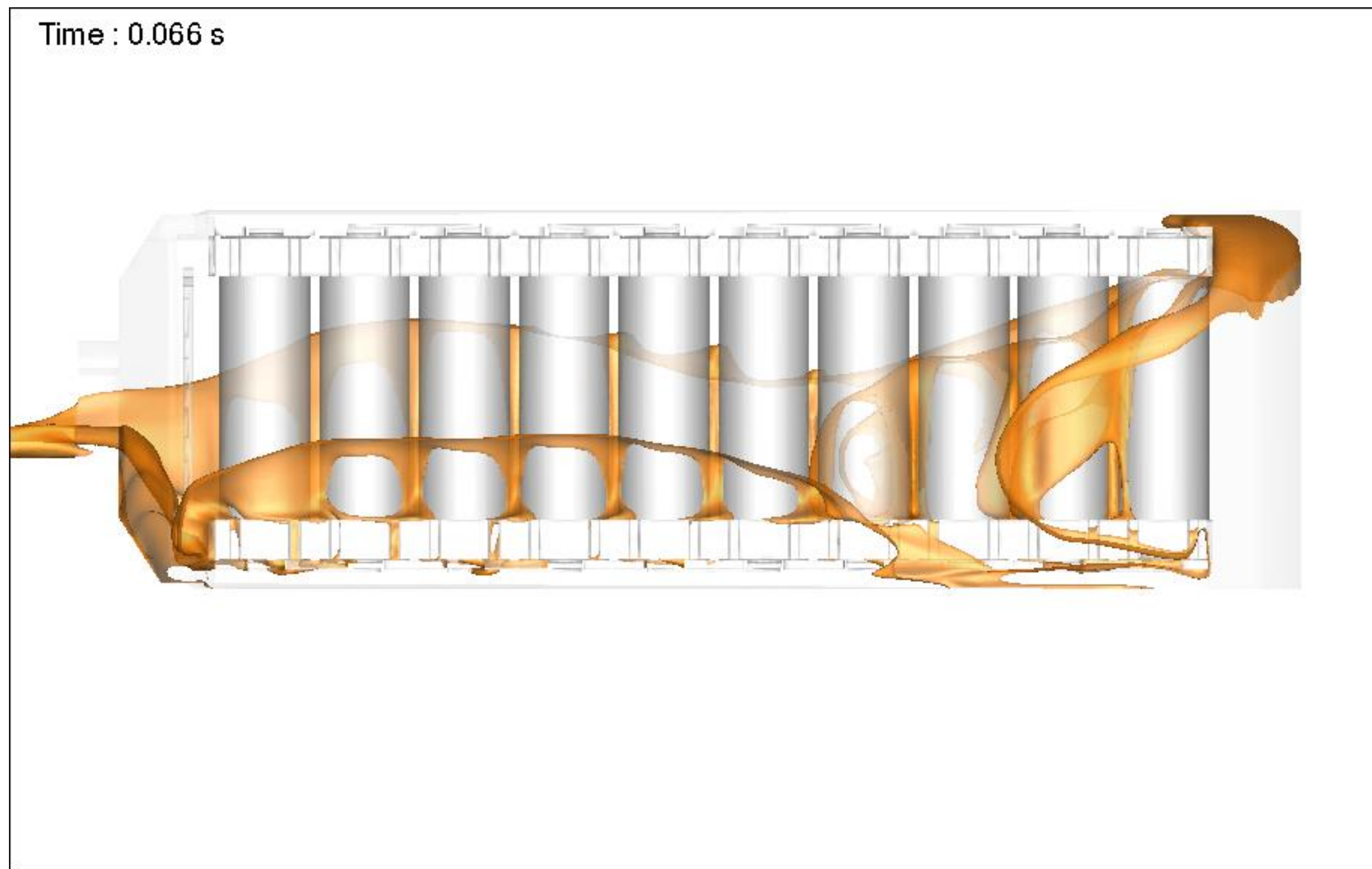
# CONVERGE应用案例——电池组燃烧



预填充壳体内热失控单元短路，不同时间段的火焰（温度）等值面，深红色球体为能量源

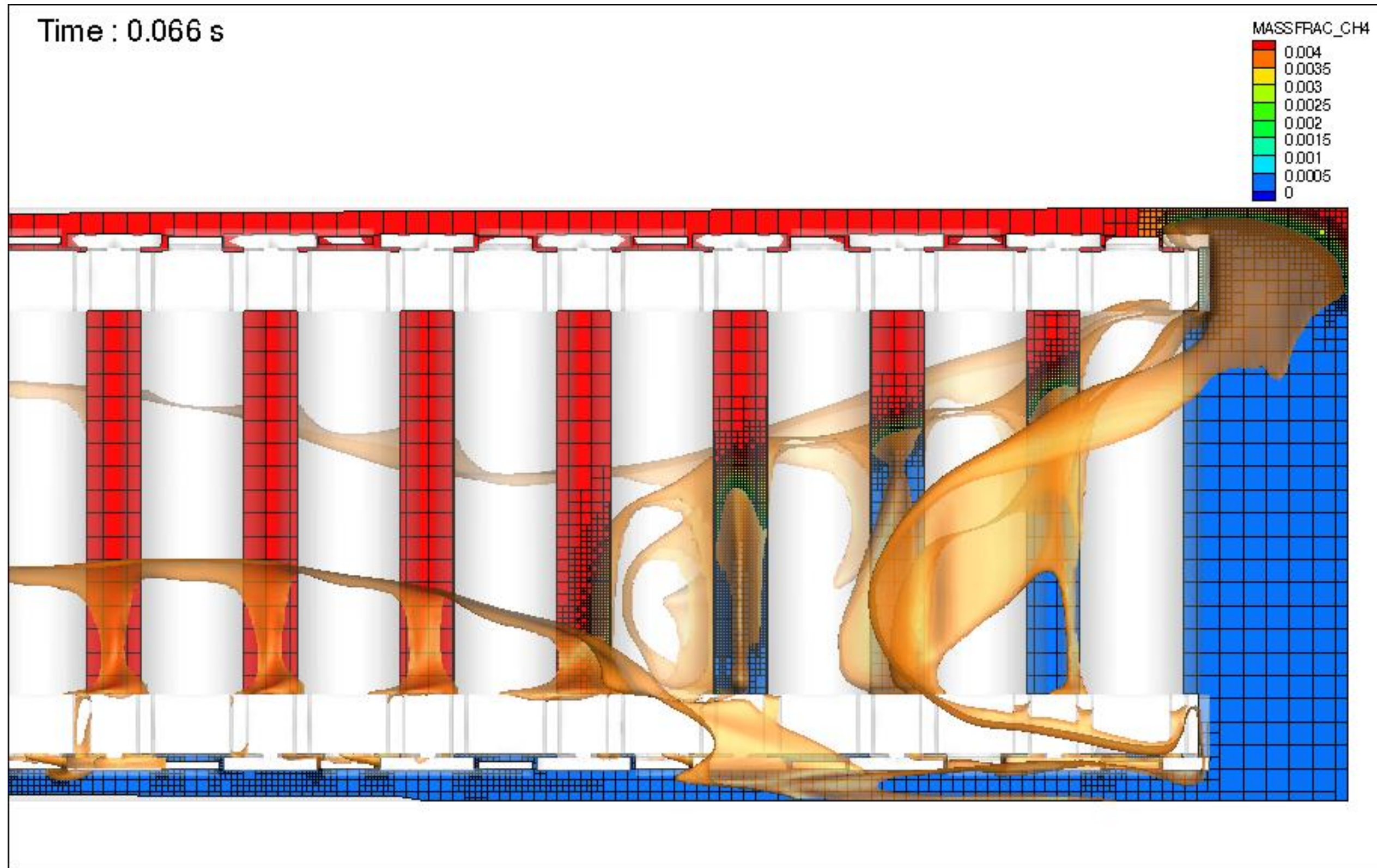


# CONVERGE应用案例——电池组燃烧



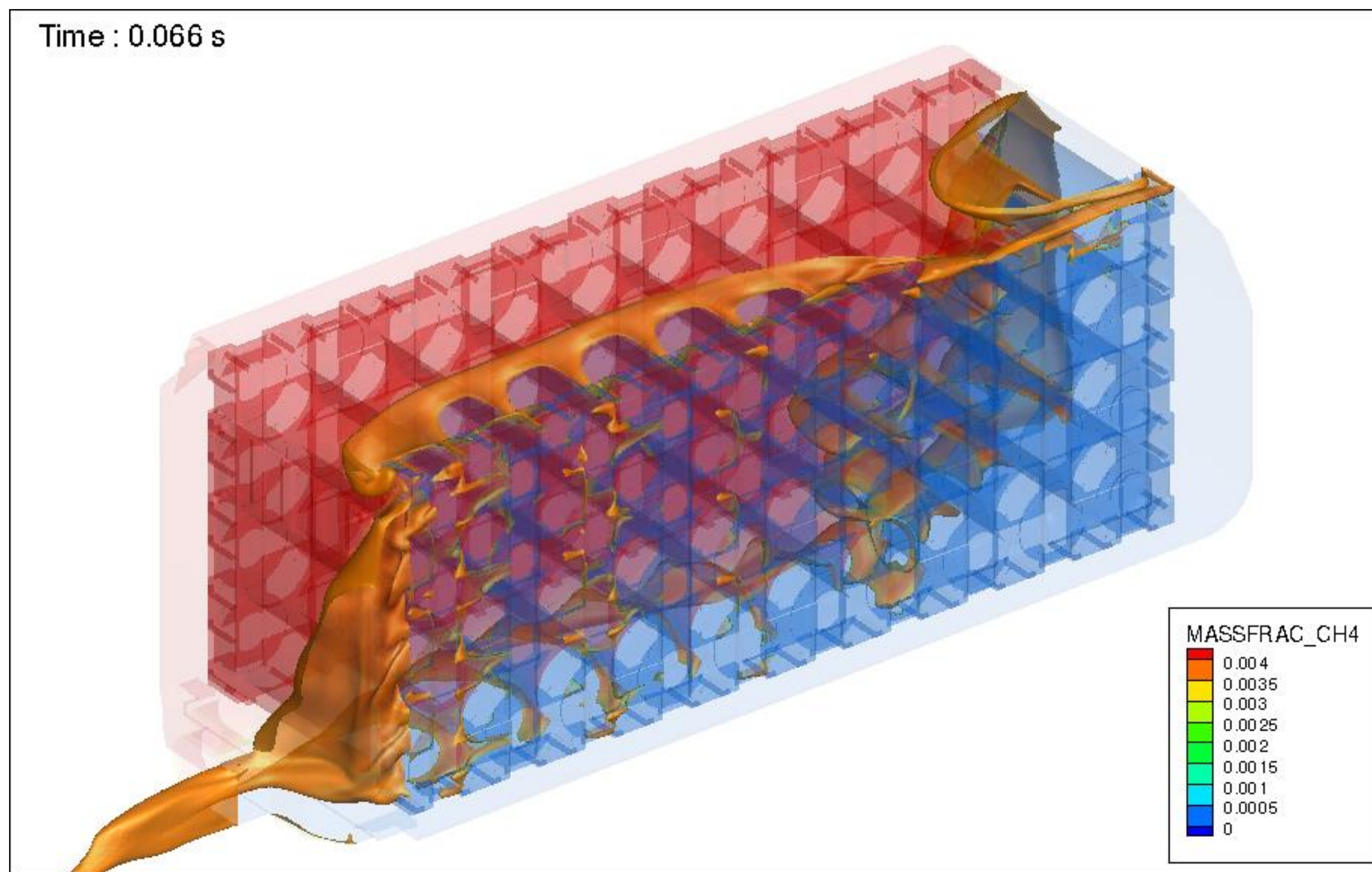
火焰发展过程预测

# CONVERGE应用案例——电池组燃烧



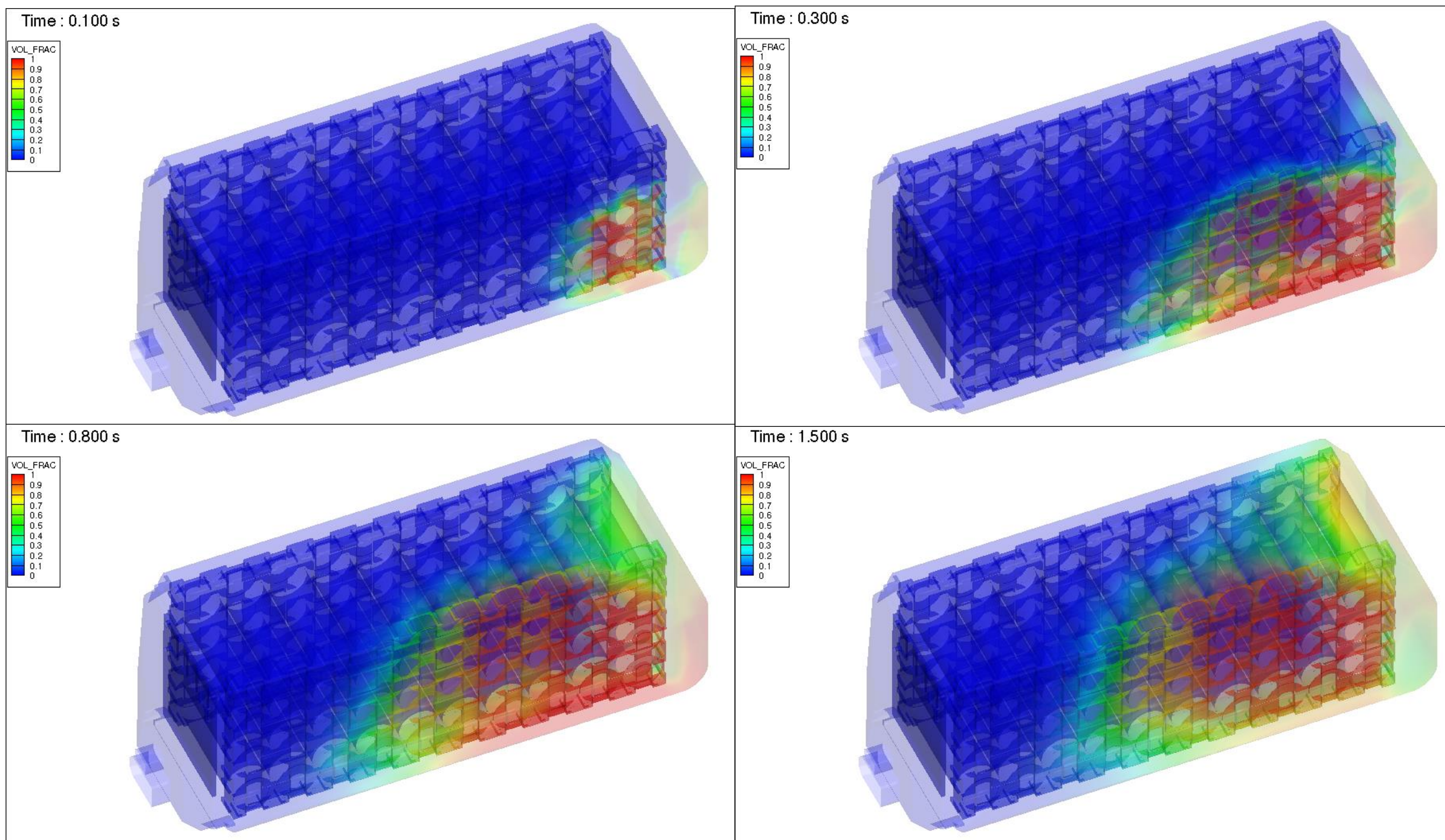
组分分布云图

# CONVERGE应用案例——电池组燃烧



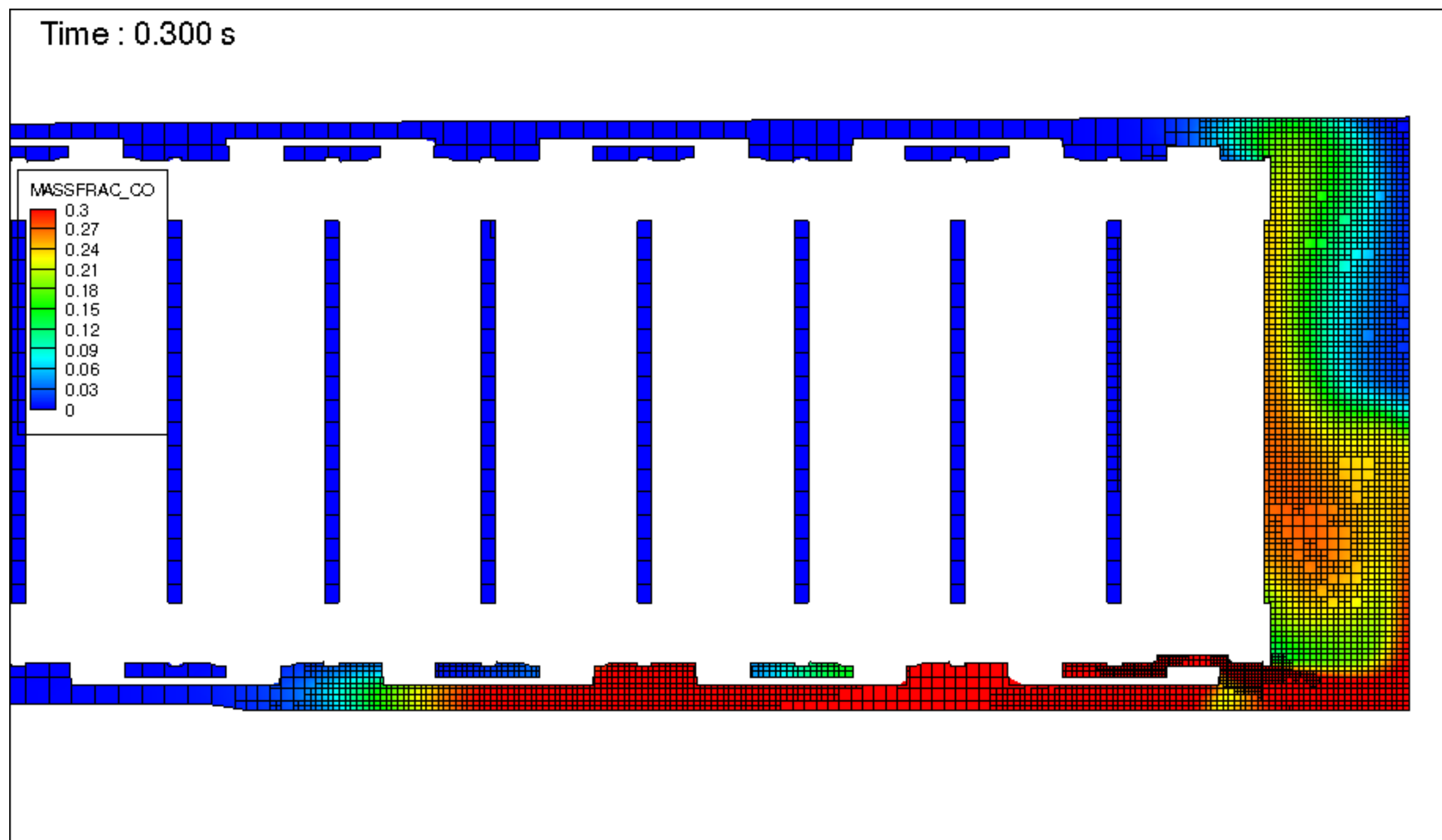
火焰发展及气体组分分布预测

# CONVERGE应用案例——电池组燃烧



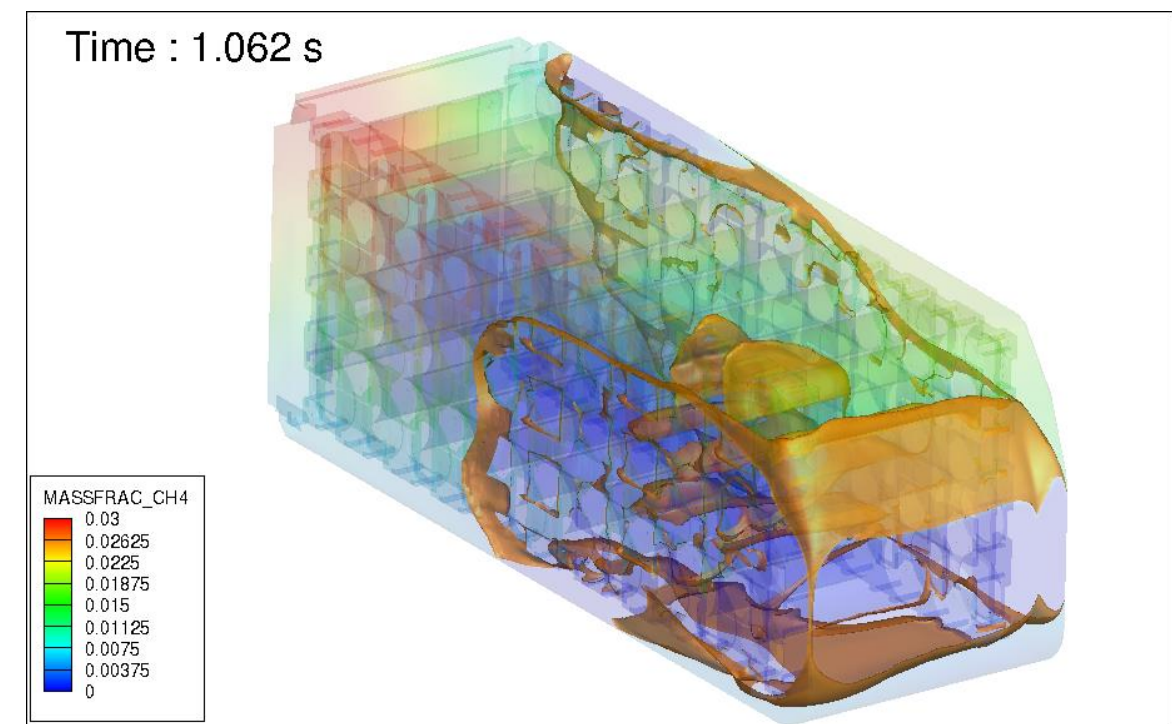
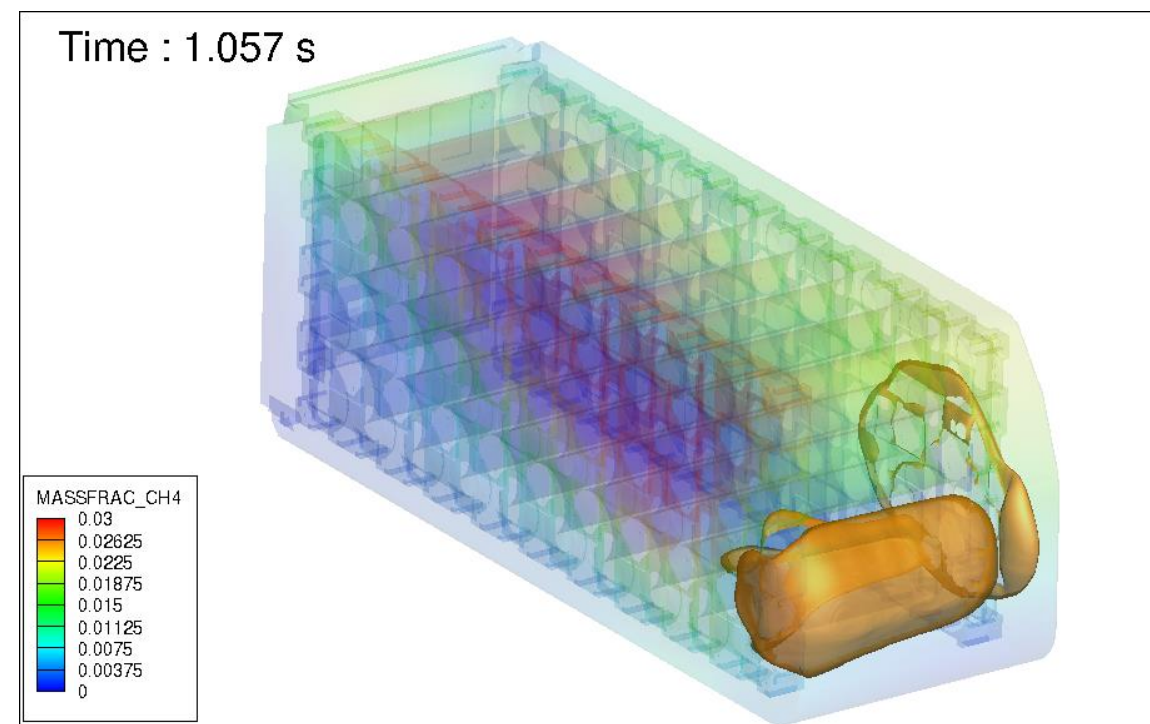
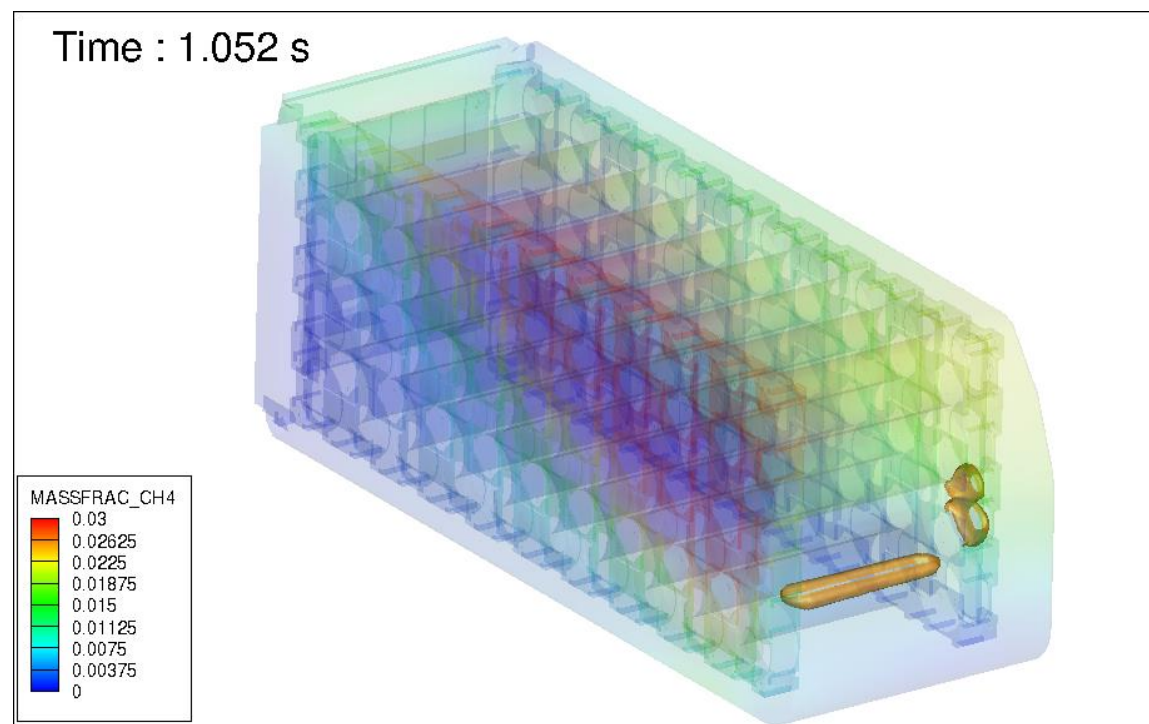
热失控过程中的可燃  
气体在壳体內的扩散

# CONVERGE应用案例——电池组燃烧

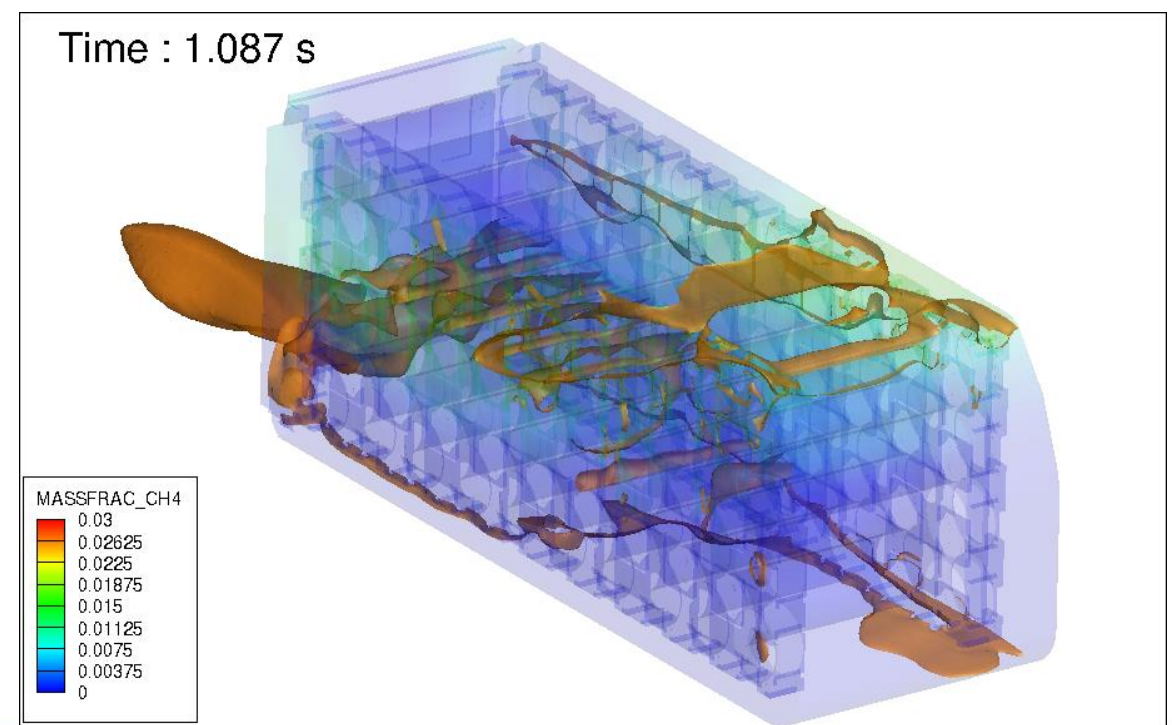
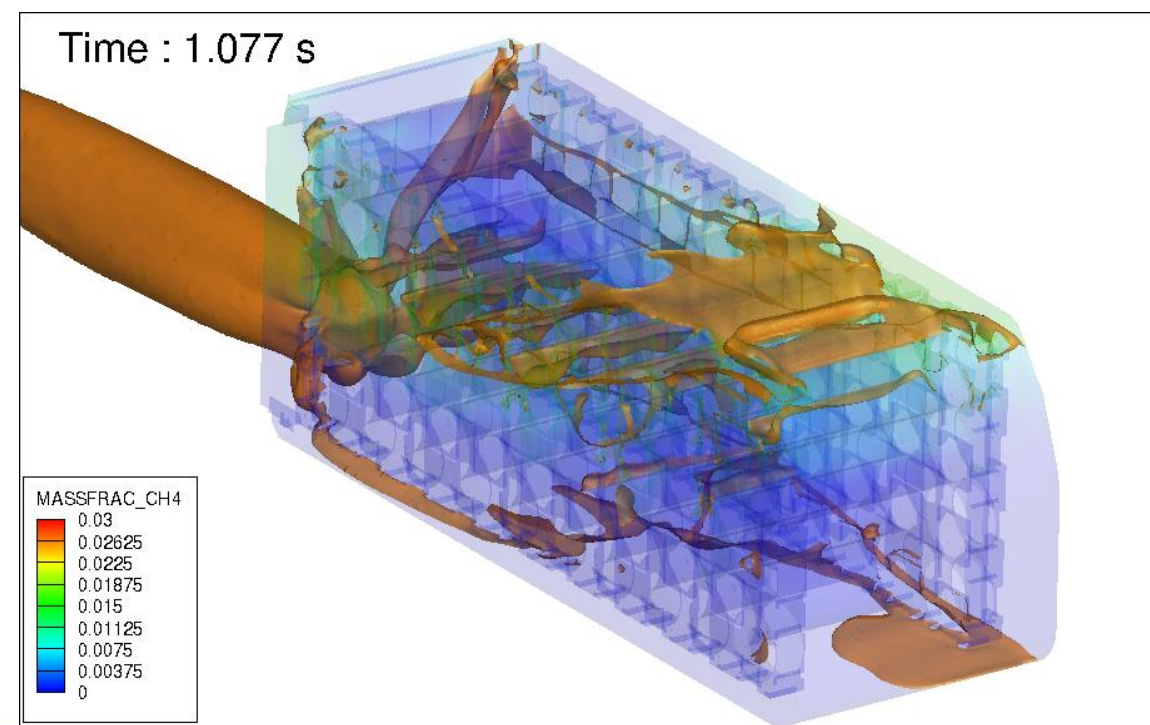
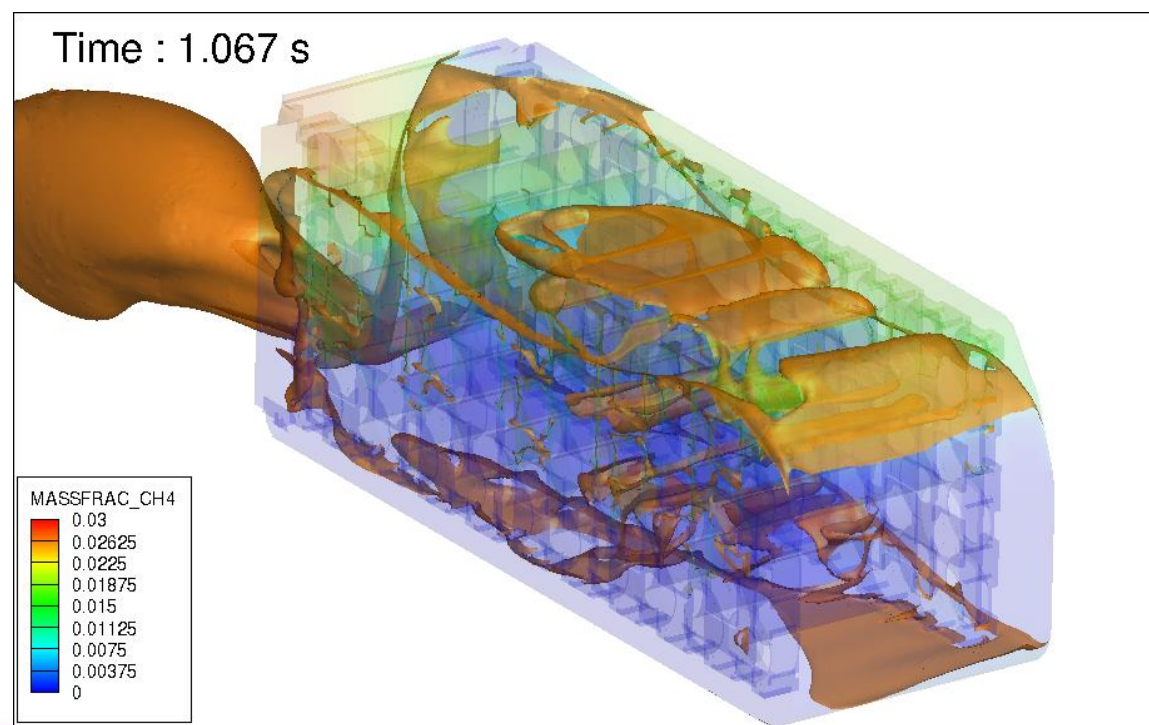


组分自适应捕捉气体分布

# CONVERGE应用案例——电池组燃烧



释放气体的热失控单元点燃，释放周期：1s， 点燃时刻 1.05s.，不同时间步的火焰（温度）等值面



期待与您的进一步合作 😊

## 联系我们

- web: <https://www.idaj.cn/>
- e-mail: [support@idaj.cn](mailto:support@idaj.cn)
- Tel: 021-50588290; 010-65881497