

锂离子电池枝晶内短路的电热特性研究*

耿莉敏^{1,2} 杜泽宇^{1,2} 赵扬^{1,2} 张俊¹ 舒俊豪^{1,2} 高楠^{1,2} 孟伟嘉^{1,2}

(1. 长安大学陕西省交通新能源开发、应用与汽车节能重点实验室, 710064, 西安; 2. 长安大学西安市交通先进动力重点实验室, 710064, 西安)

摘要: 针对锂离子电池内短路到热失控的演化过程, 对常见的由锂枝晶引发的正极-负极内短路进行了仿真分析。采用多物理场耦合的方法, 构建考虑锂枝晶熔断和热失控副反应的三维电化学-热-内短路耦合模型, 研究了该过程不可逆阶段前的电化学与热特性, 并通过仿真数据与实验结果对比验证了该模型的准确性。在此基础上, 进一步分析了不同锂枝晶半径及荷电状态下锂离子电池的电热特性, 研究表明: 锂枝晶半径越大, 通过锂枝晶的电流越大, 当锂枝晶半径从2 mm增至5 mm时, 触发内短路的锂枝晶处电流由1.2 A增至7.2 A, 电池整体产热率增大了20.7倍, 熔断触发时间从6.80 s缩短至0.84 s。本模型中, 锂枝晶熔断临界点在其半径为1.4 mm时, 当锂枝晶半径小于1.4 mm时, 电池散热量大于产热量, 不会触发熔断。当电池荷电状态从0.2增大到1时, 触发内短路时, 端电压的压降从0.138 V增大到0.158 V, 锂枝晶电流密度增大了21.5%, 短路区域欧姆产热和电化学反应产热的增大使电池整体产热率增大了38%, 热失控风险上升。该研究为锂离子电池内短路故障诊断及安全预警提供理论依据与研究方向。

关键词: 锂离子电池; 电化学-热-内短路耦合模型; 锂枝晶半径; 产热率; 热失控

中图分类号: TM912.9 **文献标志码:** AA

文章编号: 0253-987X(XXXX)XX-0001-18

Study on Electrothermal Characteristics of Dendrite-Induced Internal Short Circuit in Lithium-Ion Batteries

GENG Limin^{1,2}, DU Zeyu^{1,2}, ZHAO Yang^{1,2}, ZHANG Jun¹, SHU Junhao^{1,2}, GAO Nan^{1,2}, MENG Weijia^{1,2}

(1. Shaanxi Key Laboratory of New Transportation Energy and Automotive Energy Saving, Chang'an University, Xi'an 710064, China;

2. Xi'an Key Laboratory of Advanced Transport Power Machinery, Chang'an University, Xi'an 710064, China)

Abstract: To investigate the electrochemical and thermal characteristics of lithium-ion batteries before the irreversible stage of thermal runaway caused by internal short-circuit faults, this paper adopts a multi-physics coupling method to establish a three-dimensional electrochemical-thermal-internal short-circuit coupled model considering lithium dendrite fusing and thermal runaway side reactions, and

收稿日期: 2026-01-06。基金项目: 陕西省自然科学基金基础研究计划实验室重点项目(2025SYS-SYSZD-117); 长安大学中央高校基本科研业务费专项经费资助项目(300102384201, 300102385504)。

verifies the accuracy of the model by comparing simulation data with experimental results. On this basis, the electrothermal characteristics of lithium-ion batteries under different lithium dendrite radii and state of charge are further analyzed. The results show that: A larger lithium dendrite radius leads to a higher passing current. When the lithium dendrite radius increases from 2 mm to 5 mm, the current at the lithium dendrite upon internal short circuit triggering rises from 1.2 A to 7.2 A, the overall heat generation rate of the battery increases by 20.7 times, and the fusing trigger time is shortened from 6.8 s to 0.84 s. In this model, the critical radius for lithium dendrite fusing is 1.4 mm. When the lithium dendrite radius is less than 1.4 mm, the heat dissipation of the battery exceeds the heat generation, and fusing will not be triggered. When SOC increases from 0.2 to 1, the terminal voltage drop upon internal short circuit triggering rises from 0.138 V to 0.158 V, and the current density of lithium dendrites increases by 21.5%. This study provides a theoretical basis and research directions for the internal short-circuit fault diagnosis and safety early warning of lithium-ion batteries.

Keywords: lithium-ion battery; electrochemical-thermal-internal short circuit coupling model; lithium dendrite radius; heat generation rate; thermal runaway

“双碳”目标推动交通行业向低碳转型, 新能源电动汽车的大规模发展与应用已成为未来趋势^[1]。锂离子电池作为电动汽车的核心部件之一, 其在不良工况运行时, 易导致金属锂析出与锂枝晶的生长, 进而造成内短路故障, 甚至引发热失控和起火爆炸等安全事故^[2-3]。因此, 深入研究锂枝晶内短路故障的机理特征, 探索抑制热失控的方法, 对保障锂离子电池安全具有重要的意义。

目前, 国内外学者主要是通过实验与仿真方法研究锂离子电池内短路的故障机理。然而, 实验法通常仅能观测到内短路发生时, 电池外部现象, 难以直接捕捉内部的瞬态演化过程, 因此内短路仿真研究得以迅速发展^[4-5]。仿真研究主要分为等效电路模型与电化学模型两类, 其中, 等效电路模型结构简单, 但其不考虑电池内部的化学反应, 而是以电子元件的组合来描述电池的电气

性^[6-7]。Liu 等^[8]将等效电路模型与三维热模型耦合, 模拟了 20 A·h 锂电池的内短路特性。但该模型是通过并联电阻模拟内短路, 其本质上仍属于外短路。

电化学模型可模拟内短路过程中的电化学反应与离子迁移, 结合热模型能够精准表征内短路电池的电化学特性与热特性, 这种多物理场建模已成为研究内短路故障特征的重要手段。多位学者构建了不同维度的电化学-热-内短路耦合模型: 吴文涛等^[9]和Feng 等^[10]将一维电化学模型与三维热模型相耦合, 并通过在电化学模型中并联等效电阻模拟内短路故障。黎钦懿等^[11]采用与文献[10]相同的模型, 并加入热失控副反应。Zhang 等^[12]建立了二维电化学-三维热-内短路耦合模型, 验证了内短路的释热可触发热失控这一现象。Wang 等^[13]搭建了二维对称的电化学-热-内短路耦合模型, 分析了不同短路工况对热

失控的影响。崔志仙等^[14]和Deng等^[15]构建了三维电化学-热-内短路耦合模型,研究了内短路发生后0.2 s内的瞬时热特性。综上所述,电化学模型虽能描述内短路电化学反应,但需引入多项简化假设以保障模型的收敛,这些简化处理不仅将仿真时间窗口限制于内短路后极短时间内,还会使仿真结果与实际情况存在偏差,难以有效表征内短路的电化学与热特性。

针对上述问题,本文构建了考虑热失控副反应的三维电化学-热-内短路的耦合仿真模型,引入锂枝晶熔断机制,并通过非均匀的网格划分有效提升模型的收敛性。同时,由于摒弃了如下的传统内短路模型简化假设:□设置电池端电压恒定;□设置电池静置,无充放电电流;□锂枝晶电导率设为极小值;□忽略热失控相关副反应等。因此,本文搭建的三维电化学-热-内短路耦合模型能够更准确地描述内短路故障的电热特性。基于该模型,研究了4种类型内短路的危险程度、热失控副反应各阶段的

产热率,量化分析了不同锂枝晶半径及荷电状态(SOC)下,锂电池内短路的电化学特性(包括端电压、锂枝晶电压、电流密度分布)和热特性(包括最高温度、整体产热率、副反应产热率、温度分布、锂枝晶熔断触发时间)。

1 三维多物理场耦合模型的构建

由文献[16]可知,单体电池各电芯单元结构是独立的,化学反应间互不干扰。因此,为降低计算量、提高仿真效率,可将模型合理简化为单层电芯结构。基于COMSOL Multiphysics多物理场耦合仿真平台,构建了三元锂离子电池内短路模型,其结构如图1所示。该电池电解液为LiPF₆-EC:EMC(3:7),其模型由正极集流体(材质为铝)、镍钴锰酸锂(NCM)正极、隔膜、石墨负极、负极集流体(材质为铜)、正负极耳,以及中心位置的圆柱体锂枝晶组成。

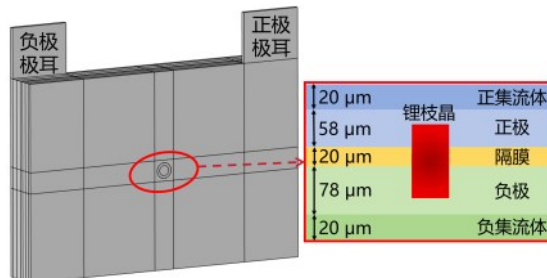


图1 锂离子电池三维电化学-热-内短路几何模型

Fig. 1 Three-dimensional electrochemical-thermal-internal short circuit geometric model of lithium-ion battery

考虑到短路点附近电流密度、温度场及锂离子浓度等物理量在不同位置存在显著差异,为实现精确的数值模拟,本研究采用非均匀网格划分策略,对短路区域进行精细化网格加密,如图2所

示。考虑到单个电芯单元的厚度属于微米级别,为便于观测模型内部结构,本研究对视图的厚度维度进行了100倍比例放大处理。

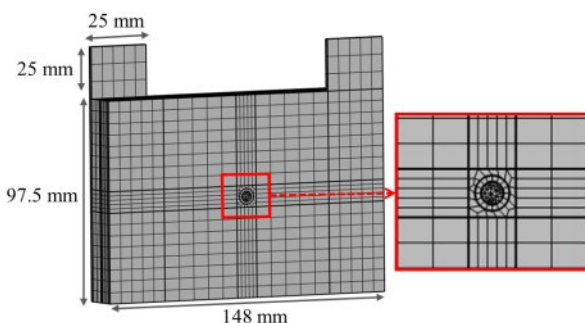


图2 锂离子电池三维模型的非均匀网格划分

Fig. 2 Non-uniform mesh division for three-dimensional models of lithium-ion batteries

1.1 电化学模型

电化学模型以多孔电极理论为基础,描述了锂离子电池内部的固-液两相体系。该体系遵循电化学基本守恒定律,其核心控制方程包括固相电荷守恒方程、液相电荷守恒方程、固相物质守恒方程、液相物质守恒方程及 Butler-Volmer 动力学方程等控制方程及边界条件^[10,15,17]。

固相电荷守恒方程与边界条件的表达式为

$$\begin{cases} -\frac{\partial i_s}{\partial x} = \sigma_s^{\text{eff}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \Phi_s}{\partial x} \right) = aFj \\ \frac{\partial \Phi_s}{\partial n} = 0 \end{cases} \quad (1)$$

式中: x 为沿厚度方向的坐标; i_s 为电流密度; σ_s^{eff} 为有效固相电导率; Φ_s 为固相电势; a 为有效固液界面; F 为法拉第常数; j 为固液界面处锂离子的流量密度; n 为边界法线方向。

液相电荷守恒方程与边界条件的表达式为

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} (\sigma_e^{\text{eff}} \frac{\partial \Phi_e}{\partial x}) = -aFj + \frac{2RT(1-t_+^0)}{F} \frac{\partial}{\partial x} (\sigma_e^{\text{eff}} \frac{\partial \ln C_e}{\partial x}) \\ \frac{\partial \Phi_e}{\partial n} = 0 \end{cases} \quad (2)$$

式中: σ_e^{eff} 为有效液相电导率; Φ_e 为液相电势; R 为气体常数; T 为周围环境

温度; t_+^0 锂离子液相扩散系数; C_e 为液相锂离子浓度。

固相物质守恒方程与边界条件的表达式为

$$\begin{cases} \frac{\partial C_s}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (D_s r^2 \frac{\partial C_s}{\partial r}) \\ D_s \frac{\partial C_s}{\partial r} \Big|_{r=R_s} = -j, \quad D_s \frac{\partial C_s}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0 \end{cases} \quad (3)$$

式中: C_s 为固相锂离子浓度; t 为时间; r 为固相活性颗粒沿半径方向上的位置; D_s 为固相扩散系数; R_s 为固相活性颗粒半径, 单位为 μm 。

液相物质守恒方程与边界条件表达式为

$$\begin{cases} \varepsilon_c \frac{\partial C_c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} (D_c^{\text{eff}} \frac{\partial C_c}{\partial x}) + (1 - t_+^0) a j \\ \frac{\partial C_c}{\partial n} = 0 \end{cases} \quad (4)$$

式中: ε_c 为液相孔隙率; D_c^{eff} 为有效液相扩散系数。

巴特勒-福尔默方程表达式为

$$j = i_0 \left\{ \exp\left(\frac{\alpha_{\text{neg}} F}{RT} \eta_s\right) - \exp\left(\frac{\alpha_{\text{pos}} F}{RT} \eta_s\right) \right\} \quad (5)$$

式中: i_0 为交换电流密度; α_{neg} 为负极

传递系数; α_{pos} 为正极传递系数; η_s 为活性颗粒表面过电势。 i_0 的计算公式为

$$i_0 = F k_{\text{pos}}^{\alpha_{\text{pos}}} k_{\text{neg}}^{\alpha_{\text{neg}}} (C_c)^{\alpha_{\text{neg}}} (C_{s,\text{max}} - C_{s,c})^{\alpha_{\text{neg}}} (C_{s,c})^{\alpha_{\text{pos}}} \quad (6)$$

式中: k_{pos} 为正极速率常数; k_{neg} 为负极速率常数; $C_{s,\text{max}}$ 为活性材料最大锂离子浓度; $C_{s,c}$ 为固液界面处锂离子浓度。 η_s 的计算公式为

$$\eta_s = \Phi_s - \Phi_e - U - j R_{\text{SEI}} \quad (7)$$

式中: U 为开路电压; R_{SEI} 为 SEI 膜内阻。

电化学模型中的参数均源自于同类电池模型的相关文献, 其中, 隔膜传递系数为 0.363, 初始电解液盐浓度为 $2000 \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$, 其余参数见表 1 和表 2。

表 1 电化学模型材料参数^[9,18]

Table 1 Electrochemical model parameters^[9,18]

电池组件	厚度/ μm	固相电导率 /($\text{S} \cdot \text{m}^{-1}$)	固相孔隙率	固相扩散系数 /($\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$)	液相孔隙率
正极集流体(Al)	20	3.77×10^7			
正极	58	3.8	0.43	4.9×10^{-11}	0.280
隔膜	20				0.400
负极	78	100	0.68	4.5×10^{-11}	0.286
负极集流体(Cu)	20	5.99×10^7			

1.2 热模型

基于热平衡理论建立的热模型控制方程可表述为能量守恒方程。该方程考

虑了电池运行过程中的多重产热机制, 包括欧姆产热、反应产热、极化产热以及内短路故障局部产热等^[19-20]。方程所需参数如表 3 所示, 其表达式为

$$\rho C_p \frac{dT}{dt} = \frac{\partial}{\partial x} (\lambda_x \frac{\partial T}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (\lambda_y \frac{\partial T}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z} (\lambda_z \frac{\partial T}{\partial z}) + Q \quad (8)$$

表2 电化学模型反应参数^[10,18]Table 2 Electrochemical model parameters^[10,18]

电极类型	颗粒半径 / μm	传递系数	速率常数 / $(\text{m}\cdot\text{s}^{-1})$	固相锂离子浓度 / $(\text{mol}\cdot\text{m}^{-3})$	最大电荷状态
正极	3.695	0.5	4.9×10^{-10}	46 061	0.975
负极	3.2	0.5	4.9×10^{-11}	34 103	0.98

式中： ρ 为电池材料密度； C_p 为电池定压比热容； λ_x 、 λ_y 、 λ_z 分别为 x 、 y 、 z 方向的导热率； y 、 z 分别为沿长、宽方向的坐标； Q 为电化学模型总产热功率。

欧姆产热 Q_{ohm} ，反应产热 Q_e ，浓度极化产热 Q_c 表达式分别为：

$$Q_{\text{ohm}} = \sigma_s^{\text{eff}} \left(\frac{\partial \Phi_s}{\partial x} \right)^2 + \sigma_e^{\text{eff}} \left(\frac{\partial \Phi_e}{\partial x} \right)^2 + \frac{2\sigma_e^{\text{eff}} RT(1-t_+^0)}{F} \left(\frac{\partial \ln C_e}{\partial x} \frac{\partial \Phi_e}{\partial x} \right) \quad (9)$$

$$Q_e = FajT \frac{\partial U}{\partial T} \quad (10)$$

$$Q_c = Faj(\Phi_s - \Phi_e - U - jR_{\text{SEI}}) \quad (11)$$

内短路处产热 Q_{short} 表达式为

$$Q_{\text{short}} = \sigma_{\text{Li}} \left(\frac{\partial \Phi_m}{\partial x} \right)^2 \quad (12)$$

式中： Φ_m 为内短路处电势； σ_{Li} 为锂枝晶电导率。

表3 热模型参数^[9,18]Table 3 Thermal model parameters^[9,18]

电池组件	密度 / $(\text{kg}\cdot\text{m}^{-3})$	恒压热容 / $(\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$	导热系数 / $(\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$
正极集流体(Al)	2 700	897	238.00
正极	2 860	1 150	0.40
隔膜	525	2 050	0.50
负极	2 270	881	0.41
负极集流体(Cu)	8 960	385	395.00

1.3 热失控副反应模型

内短路产生的高温会引发电池副反应，从而产生大量的热，使电池内部温度急剧上升，进而引发热失控。按副反

应发生温度由低到高排序，依次为SEI膜分解反应、负极与电解液分解反应、正极与电解液分解反应以及电解液分解反应^[21-22]，各分解反应的参数设置见表4。

SEI膜分解反应方程表达式为

$$r_{d,SEI}(T, c_{SEI}) = -\frac{dc_{SEI}}{dt} = A_{SEI} \exp\left(-\frac{E_{a,SEI}}{RT}\right) c_{SEI} \quad (13)$$

式中: $r_{d,SEI}$ 为 SEI 膜分解速率; c_{SEI} 为亚稳态 SEI 膜所占比例; A_{SEI} 为 SEI 膜分解频率因子, $E_{a,SEI}$ 为 SEI 膜分解反应活化能。

负极材料与电解液分解反应方程表达式为

$$r_{d,neg}(T, c_{neg}) = -\frac{dc_{neg}}{dt} = A_{neg} \exp\left(-\frac{E_{a,neg}}{RT}\right) c_{neg} \quad (14)$$

式中: c_{neg} 为负极中参与反应的锂的占比; $r_{d,neg}$ 、 A_{neg} 、 $E_{a,neg}$ 分别为负极分解

反应速率、频率因子、反应活化能。

正极与电解液反应方程表达式为

$$r_{d,pos}(T, c_a) = -\frac{dc_a}{dt} = A_{pos} c_a (1 - c_a) \exp\left(-\frac{E_{a,pos}}{RT}\right) \quad (15)$$

式中: c_a 为已反应正极材料占比; $r_{d,pos}$ 、 A_{pos} 、 $E_{a,pos}$ 分别为正极分解反应速率、频率因子、反应活化能。

电解液自身分解反应方程表达式为

$$r_{d,ele}(T, c_{ele}) = -\frac{dc_{ele}}{dt} = A_{ele} \exp\left(-\frac{E_{a,ele}}{RT}\right) c_{ele} \quad (16)$$

式中: c_{ele} 为未反应电解液占比; $r_{d,ele}$ 、 A_{ele} 、 $E_{a,ele}$ 分别为电解液分解反应速率、频率因子、反应活化能。

表4 热失控副反应参数^[23]

Table 4 Thermal runaway side reaction parameters^[23]

反应类型	频率因子/s ⁻¹	活化能/(J·mol ⁻¹)	放热量/(J·kg ⁻¹)	碳含量/(kg·m ⁻³)	初始归一化浓度值
SEI膜分解反应	1.67×10 ¹⁵	1.35×10 ⁵	2.57×10 ⁵	413	0.15
负极与电解液分解反应	2.50×10 ¹³	1.35×10 ⁵	1.71×10 ⁶	413	0.75
正极与电解液分解反应	6.67×10 ¹³	1.40×10 ⁵	3.14×10 ⁵	1 300	0.04
电解液分解反应	5.14×10 ²⁵	2.74×10 ⁵	1.55×10 ⁵	500	1.00

1.4 内短路模型

耦合模型中, 锂枝晶的相关材料参数见表5, 内短路未触发时, 锂枝晶电导率 σ_{Li0} 应为0, 为避免模型计算过程出现除零错误, 本文引入无量纲常数 $a=1\times 10^{-16}$ 。由此, 未触发内短路时的锂枝晶电导率, 经过修正后, 可表示为

$$\sigma_{Li0} = \sigma_{Li} \cdot a, \text{ 从而使 } \sigma_{Li0} \text{ 趋近于 } 0。$$

通过引入平滑阶跃函数Step(t)与最大值函数max($\cdot$), 构建了锂枝晶电导率控制函数, 使电池内短路触发后0.1 ms内, 锂枝晶电导率快速提升至真实值, 以此增强模型的收敛性。同时, 设定电池环境温度为298.15 K, 初始SOC为

0.8, 放电倍率为0.5 C (表示电池以额定容量的电流放电, 可在2个小时放完), 内短路触发时间为0.1 s。控制函数表达式为

$$\sigma_{\text{Li}}(t) = \sigma_{\text{Li}} \cdot \max[a, \text{Step}(t)] \quad (17)$$

表5 金属锂材料参数^[9]

Table 5 Metallic lithium material parameters^[9]

参数	数值
电导率/(S·m ⁻¹)	1×10 ⁷
导热系数/(W·m ⁻¹ ·K ⁻¹)	85
恒压热容/(J·kg ⁻¹ ·K ⁻¹)	3 500
密度/(kg·m ⁻³)	535

本文建立了考虑热失控副反应的三维电化学-热-内短路模型, 模型之间的耦合关系如图3所示。由图可知, 电化学模型、内短路模型与副反应模型将产生的欧姆热、极化热、可逆热及副反应产热等热量输入至热模型中, 热模型则将温度分布结果反馈回其他模型; 电化学模型为内短路模型提供边界条件, 同时为副反应模型提供参与分解反应的各物质浓度分布; 内短路模型向电化学模型输出短路电流, 副反应模型向电化学模型提供电池结构的分解分布信息, 以此实现各模型的耦合。

1.5 模型验证

实验选用标称容量为51 A·h, 几何尺寸为148 mm×97.5 mm×26.5 mm的方壳三元锂电池, 其充电截止电压为4.2 V, 放电截止电压为2.8 V。同时, 将该电池的开路电压-荷电状态的实验数

据导入至仿真模型中, 数据曲线如图4所示。



图3 三维电化学-热-内短路模型的耦合方式

Fig. 3 Coupling methods for a three-dimensional electrochemical-thermal-internal short circuit model

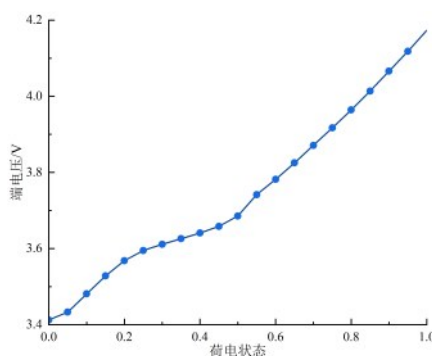


图4 开路电压-荷电状态曲线

Fig. 4 Open circuit voltage - state of charge curve

网格无关性验证表明: 内短路发生后, 电池最高温度受网格数量的影响较小, 随着网格数量的增加, 模型计算结果逐渐趋于稳定。当网格数为8 955时, 最高温度为462.71 K; 而当网格数分别为37 197、54 688时, 最高温度分别为463.47 K、463.51 K, 二者差异可

忽略不计。因此,本文选择网格数为 37 197 的模型进行后续仿真计算。

本文采用实验方法对耦合模型的电化学特性与热特性进行验证。图 5 为搭建的电池测试试验台,主要测试设备包括:巨孚 GF-9700S 型高低温试验箱、新威 CT-8004 充放电测试柜、温度传感器以及上位机。



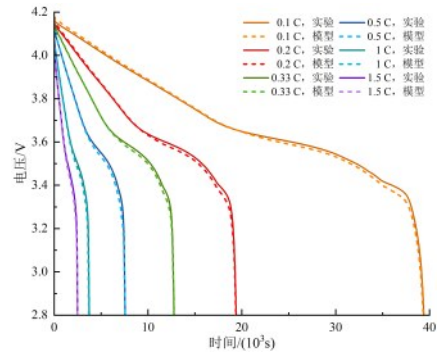
图 5 电池测试平台

Fig. 5 Schematic diagram of the battery test platform

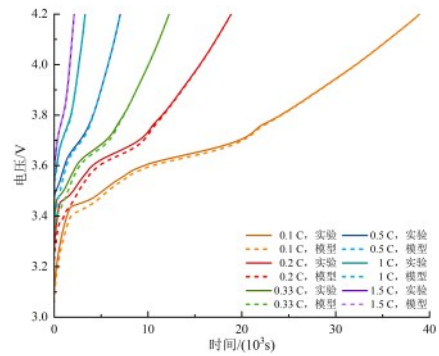
验证实验分为两部分:□ 在 25 °C 室温环境下,进行倍率分别为 0.1 C、0.2 C、0.33 C、0.5 C、1 C 及 1.5 C 的充放电实验,通过采集电池端电压数据,验证耦合模型的电化学特性。□ 在 0、25 和 45 °C 的环境温度下,进行倍率为 0.5 C 的充放电实验,通过采集电池表面温度数据,验证耦合模型的热特性。其结果如图 6 所示。

图 6 (a) 和 (b) 为所建模型电化学特性的验证结果。从不同充放电倍率展开分析,其结果表明:在不同倍率充电过程中电压平均误差均低于 4.48%,放电过程电压平均误差均低于 2.15%。

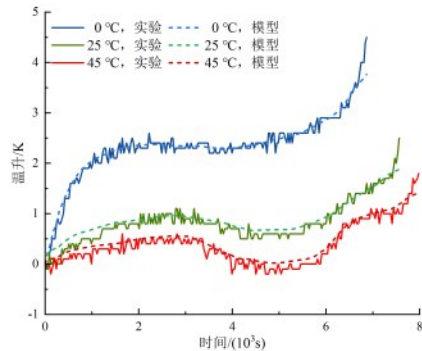
在不同环境温度下,图 6 (c) 和 (d) 对比了同一倍率充放电过程中电池表面温升的仿真值与实验值,结果表明,两者的温度误差均在 1 K 以内。



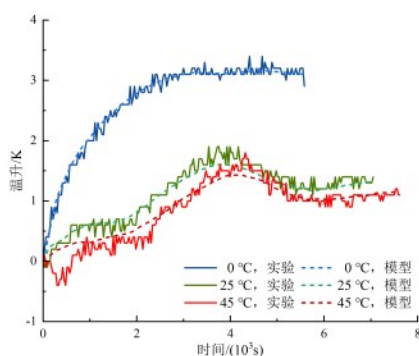
(a) 不同倍率下的放电验证



(b) 不同倍率下的充电验证



(c) 不同环境温度下 0.5 C 放电温度验证



(d) 不同环境温度下0.5 C充电温度验证

图6 电化学特性和热特性验证

Fig. 6 Verification of electrochemical and thermal properties

由于本文所构建的内短路模型是针对锂枝晶诱发的自发型内短路,而现有实验手段难以定量控制锂枝晶的生长,并精准复现此类内短路故障。因此,无法通过实验直接验证该模型的准确性。为进一步验证内短路模型的仿真精度,选取文献[22]中电化学参数与热参数与本文基本一致的三元锂离子电池,以室温环境下正极-负极型内短路模型的仿真数据作为参考,将本文轻度、中度内短路故障下,电池最高温度的仿真结果与文献[22]的仿真结果进行对比分析,结果如图7所示。由图可知,两者变化趋势一致,吻合度较高,最高温度平均相差小于5 K,这验证了该内短路模型的准确性与可靠性。

综上所述,本文所构建的三维电化学-热-内短路耦合模型在电化学特性、热特性及内短路特性方面的仿真结果,均与实验数据呈现出一致的变化趋势,且误差均在合理范围内。由此可见,此

模型能够有效模拟锂离子电池内短路故障的电热特性。

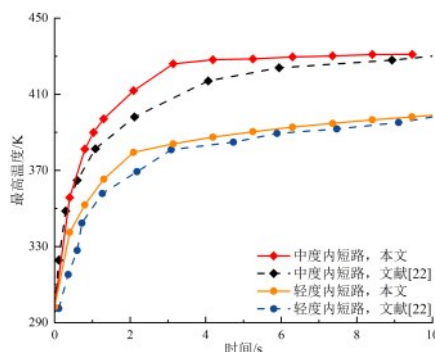


图7 内短路模型的验证

Fig. 7 Internal short circuit model verification

2 内短路故障类型及锂枝晶熔断

2.1 内短路类型

根据锂枝晶连接电池结构的差异,把内短路故障划分为4种类型:正极-负极内短路、正极-铜内短路、铝-铜内短路、铝-负极内短路。锂枝晶半径为1 mm时,4种内短路故障下,电池最高温度如图8所示。

由图8可知,4种类型内短路的产热能力从大到小的排序为:铝-铜内短路、铝-负极内短路、正极-铜内短路、正极-负极内短路。由表3可知,铜、铝集流体的导热系数远高于正负极材料,且铜导热性高于铝。因此,4种内短路的散热能力从大到小的排序为:铝-铜内短路、正极-铜内短路、铝-负极内短路、正极-负极内短路。综合产热

与散热特性, 4种类型的内短路对电池温升能力的影响从大到小的排序为: 铝-负极内短路、铝-铜内短路、正极-负极内短路、正极-铜内短路, 该结论与文献[4,22,24]的仿真与实验分析结果一致。尽管铝-负极内短路诱发热失控的风险最高, 但其特征显著易检测, 且实际发生概率远低于正极-负极内短路^[4]。因此, 后续研究将针对正极-负极内短路展开。

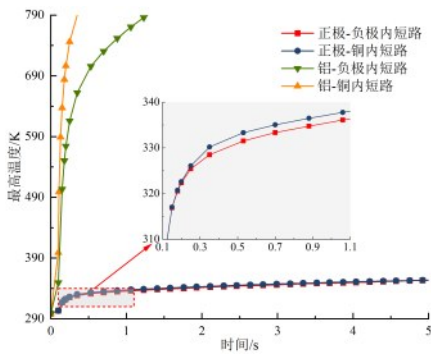


图8 不同类型内短路的最高温度差异

Fig. 8 Differences in maximum temperature among different types of internal short circuits

2.2 锂枝晶熔断与热失控副反应

金属锂的熔点为453.69 K, 当短路点温度超过此熔点时, 锂枝晶熔断, 内短路故障中断, 电池恢复正常。然而, 随着熔断点温度的降低, 锂枝晶会重新生长, 导致内短路故障的复发, 锂枝晶就这样不断进行着熔断-再生长的循环过程^[24-25]。由于熔断-再生长的循环次数具有不确定性, 锂枝晶可能在尚未熔断时便触发热失控。因此, 内短路从首次

发生到热失控(443.15 K)副反应大量放热前是开展故障诊断和阻断的最佳时机。

本文在锂枝晶半径为2.5 mm、金属锂熔化潜热为432.2 kJ·kg⁻¹的条件下, 定量计算了考虑与未考虑熔化潜热时, 锂枝晶的熔断时间和电池的最高温度, 结果表明: 未考虑熔化潜热时, 锂枝晶熔断时间为2.50 s, 电池最高温度为462.89 K; 引入熔化潜热后, 锂枝晶熔断时间为2.56 s, 电池最高温度为461.16 K。上述结果显示, 由于锂枝晶几何尺寸较小, 熔化潜热对熔断时间的影响较小。本文综合考虑模型的计算效率与精度, 对锂枝晶的熔化潜热采取简化处理, 即设定当锂枝晶平均温度达到453.69 K时瞬间熔断, 由于仿真时间较短, 锂枝晶熔断后未涉及再生长, 内短路故障结束。

内短路触发热失控副反应的产热率如图9所示, 其中, SEI膜分解温度决定了热失控的起始温度约为363.15 K, SEI膜分解放出部分热, 并使负极与电解液接触; 当温度高于393.15 K时, 负极与电解液反应持续并放出大量热, 电池温度迅速上升; 当温度达到443.15 K时, 正极与电解液开始反应, 电池温度急剧上升; 当温度升高到473.15 K时, 电解液发生分解反应。其中, 负极与电解液分解反应的累积产热量最多, 但正极与电解液的分解反应在短时间内释放的大量热, 使电池温度迅速升高, 并推动热失控进入了不可逆阶段。

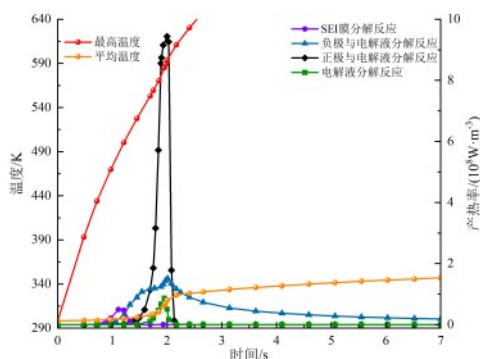


图9 正极-负极内短路副反应产热率

Fig. 9 Heat generation rate of side reactions in cathode-anode internal short circuits

因此, 本文将聚焦内短路发生后至热失控不可逆阶段前, 通过分析内短路的故障特征, 筛选有效诊断参数, 从而实现故障的快速诊断, 规避热失控风险^[21-22]。

3 内短路仿真结果分析

3.1 锂枝晶半径对电热特性的影响

图10展示了不同锂枝晶半径下电热特性的仿真结果。锂枝晶引发的内短路本质是枝晶尖端刺破隔膜形成了导电通道, 锂枝晶处的电流随之改变。导体接触电阻 R_{cont} 的计算式为 $R_{\text{cont}} = \rho_{\text{cont}} L / S$ 。其中 ρ_{cont} 为电阻率; L 为锂枝晶长度; S 为锂枝晶横截面积, 与接触电阻 R_{cont} 成反比。如图10(a)和图10(b)所示, 随着锂枝晶半径的增大, 其横截面积呈平方关系增加, 电阻相应降低, 短路电流幅值随之增大。与锂枝晶半径为2

mm相比, 半径为5 mm时, 短路电流为7.2 A, 增大了6倍。短路电流的增大导致内短路故障的加剧, 端电压下降幅度显著增加。由图10(c)可知, 当锂枝晶半径为0.5 mm时, 发生了微内短路, 由于锂枝晶横截面积较小, 仅为 0.79 mm^2 , 从而导致接触电阻较大, 短路瞬间端电压压降仅0.007 V; 而当锂枝晶半径增至5 mm时, 横截面积增至 78.54 mm^2 , 接触电阻大幅降低, 短路瞬间端电压压降达0.33 V, 两者相差近50倍。因此, 可依据内短路瞬间电池端电压骤减特征进行故障诊断, 并通过压降值对内短路进行分级。

由图10(d)可知, 随着锂枝晶半径的增大, 温升速率加快。由图10(e)可知, 在内短路发生0.1 s后, 与锂枝晶半径为2 mm时相比, 当锂枝晶半径增大到3 mm时, 整体产热率为 $3.5 \times 10^6 \text{ W} \cdot \text{m}^{-3}$, 增长了8.3倍; 当枝晶半径增大到5 mm时, 整体产热率为 $9.1 \times 10^6 \text{ W} \cdot \text{m}^{-3}$, 增长了21.7倍。如图10(f)所示, 正负极产热是内短路初期主要的热量来源。锂枝晶半径(由 r_{ld} 表示)的增大, 使短路区域电流上升, 从而导致正极、负极产热率的增加。随着热量的不断累积, 电池短路区域温度逐渐上升, 当温度达到临界值时, 热失控前期副反应触发, 副反应产热率如图10(g)所示, 受副反应产热影响, 整体产热率逐渐上升。当锂枝晶半径从2 mm增至5 mm时, 整体产热率峰值由 $2.6 \times 10^6 \text{ W} \cdot \text{m}^{-3}$ 提升至 $16.3 \times 10^6 \text{ W} \cdot \text{m}^{-3}$ 。可以

看出, 锂枝晶半径越大, 副反应触发越早, 从而促使整体产热率的迅速上升, 进而缩短锂枝晶的熔断触发时间。如图 10 (h) 所示, 当锂枝晶半径为 1.5 mm 时, 熔断触发时间为 46.5 s; 当半径为 2 mm 时, 熔断触发时间为 6.8 s; 而当半径为 5 mm 时, 熔断触发时间仅为 0.84 s。这是因为锂枝晶半径越大, 短路区域产热越多, 锂枝晶温度升高越快, 熔断触发时间越短。然而, 当锂枝晶半径过小时, 短路电阻过高, 会限制短路电流, 此时的散热量将大于产热量, 无法触发熔断。如图 10 (i) 所示, 当锂枝晶半径小于等于 1.4 mm 时, 内短路发生 90 s 后, 锂枝晶处最高温度均低于 450 K, 未发生熔断, 即在本模型中, 锂枝晶半径为 1.4 mm 时, 是触发熔断的临界点。锂枝晶熔断后, 内短路产热降为 0, 短路区域温度快速降低, 这一现象从图 10 (d) 和图 10 (e) 均可看出, 整体产热率在熔断后迅速下降, 最终通过散热使电池温度降至正常。

图 11 为不同半径锂枝晶引发内短路后, 电池中心切面的温度分布。在内短路发生后, 电池最高温度集中于短路区域, 且随锂枝晶半径的增大而增大, 其余区域温度均未发生明显变化。随着短路区域温度的升高, 触发了热失控副反应, 产生大量热, 这些热量向四周扩散, 使得短路区域周围温度升高, 但电池其他部分的温升并不明显。锂枝晶熔断后, 短路区域最高温度开始降低, 受

传热影响, 热量逐渐向周围扩散, 最终温度分布趋于正常。当锂枝晶半径为 1 mm 时, 不会触发熔断, 短路区域的最高温度会持续上升并向四周扩散。

3.2 电池荷电状态对电热特性的影响

在环境温度为 298.15 K、锂枝晶半径为 2.5 mm 的条件下, 研究了不同荷电状态对内短路故障的影响。图 12 (a) 和图 12 (b) 是内短路发生时, 电解质电流密度和电极电流密度的分布情况。其中, 电解质电流是电解质中的锂离子迁移传输所产生, 而电极电流则由金属集流体上的电子迁移运动所产生。可以看出, 内短路区域的电解质电流密度和电极电流密度都较高。这是因为在放电工况下, 负极的极耳因电流汇聚而出现较高的电流密度, 同时, 锂枝晶的存在为电子迁移提供了额外路径, 大量电子通过锂枝晶快速从铜集流体迁移至铝集流体, 这一过程促使短路区域负极脱嵌出大量的锂离子, 并通过电解质运输至正极, 使短路区域的锂离子传输与电子传导加强, 最终导致内短路区域的电化学反应速率显著高于正常区域。

不同荷电状态下, 锂枝晶的电流密度如图 13 (a) 所示。由图可知, 内短路触发后 0.1 s, 荷电状态越大, 锂枝晶处电流密度越大。当荷电状态 $S_{\text{soc}}=1$ 时, 锂枝晶电流密度为 $9.71 \times 10^4 \text{ A} \cdot \text{m}^{-2}$, 比 $S_{\text{soc}}=0.2$ 时增长了 21.5%。端电压变化如图 13 (b) 所示, 荷电状态对端电

压压降有影响,当 $S_{\text{soc}}=0.2$ 时,端电压压降为0.138 V;当 $S_{\text{soc}}=1$ 时,端电压压降为0.158 V,增大了14.45%。此

外,荷电状态越小,触发熔断越慢,短路电压持续降低的时间越长。

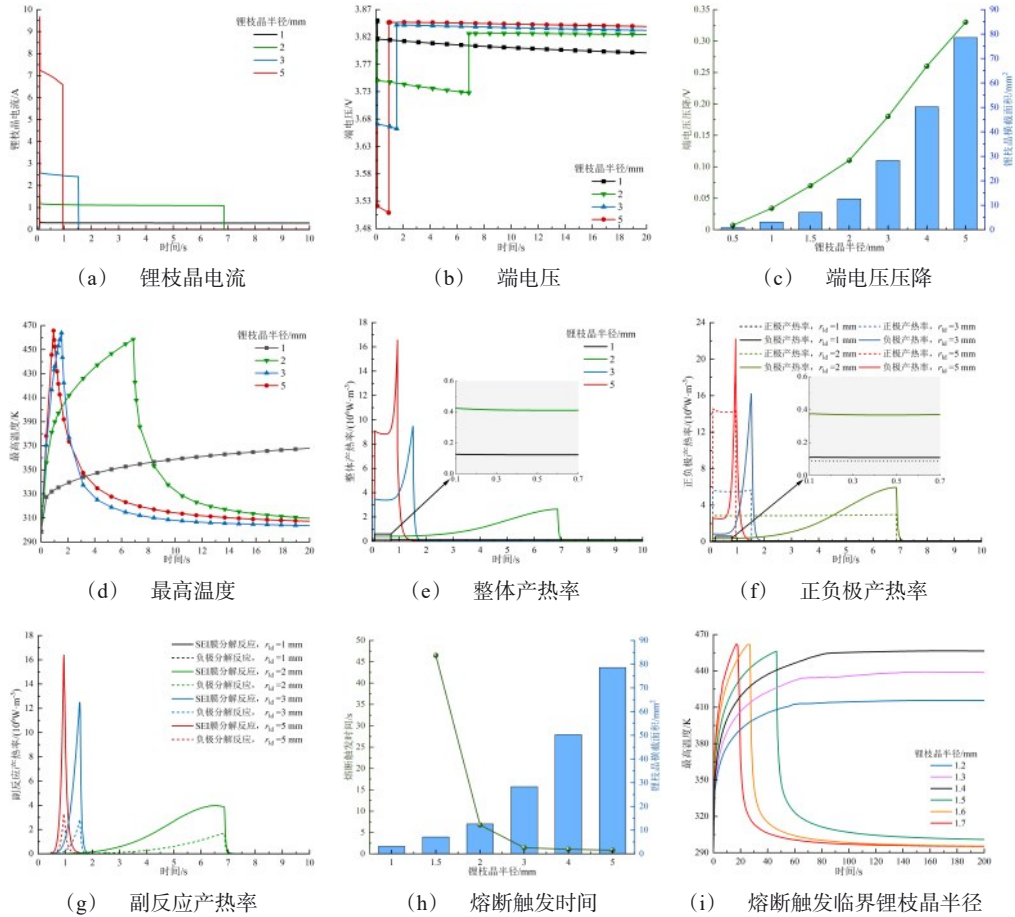


图10 不同锂枝晶半径下电热特性的仿真结果

Fig. 10 Simulation Results of Electrothermal Characteristics under Different Lithium Dendrite Radii

由图 13 (c) 和图 13 (d) 可知,在短路初期,电池整体产热率主要由正负极产热贡献,荷电状态越高,正负极产热率越大,电池整体产热率越大。在短路发生后 0.1 s 时,当 $S_{\text{soc}}=1$ 时,电池整体产热率为 $2.83 \times 10^6 \text{ W} \cdot \text{m}^{-3}$,相较于

$S_{\text{soc}}=0.2$ 的整体产热率增大了38%。由图 13 (e) 可知,随着副反应的触发,整体产热率逐渐上升至峰值。当 $S_{\text{soc}}=1$ 时,整体产热率峰值为 $8.23 \times 10^6 \text{ W} \cdot \text{m}^{-3}$;当 $S_{\text{soc}}=0.2$ 时,整体产热率峰值为 $4.74 \times 10^6 \text{ W} \cdot \text{m}^{-3}$ 。可以看出,荷电状态越大,

整体产热率峰值越大。如图 13 (f) 所示, 荷电状态越大, 短路区域产热量越多, 温度上升越快, 热失控副反应触发

时刻越早, 从而更快地触发锂枝晶熔断, 锂枝晶熔断后最高温度开始下降。

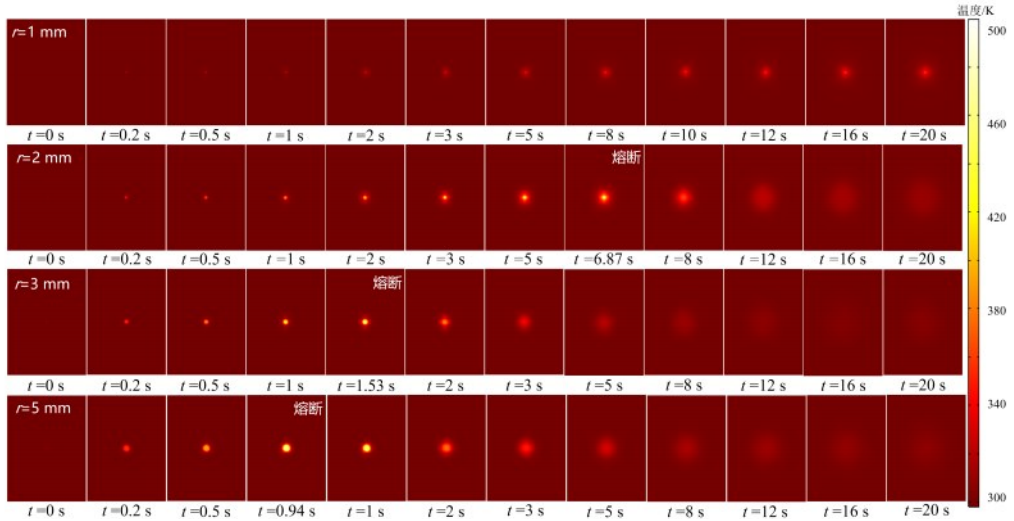


图 11 内短路发生后电池的中心切面温度

Fig. 11 Temperature of the battery's central cross-section after internal short circuit

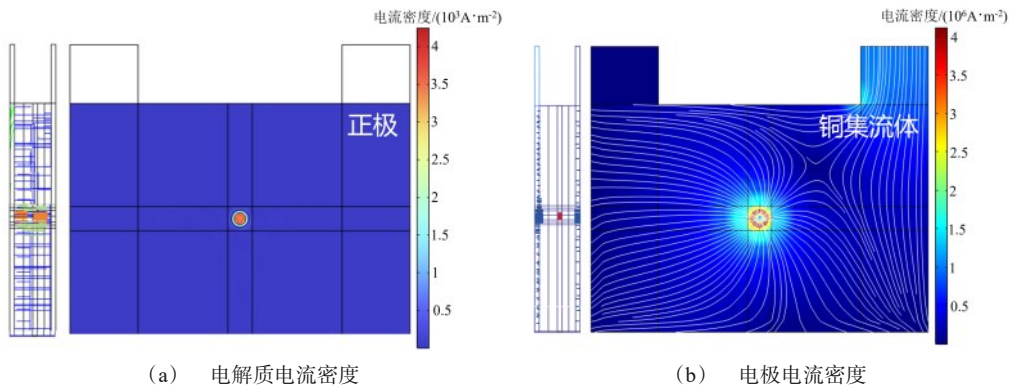


图 12 电解质电流密度和电极电流密度的分布

Fig. 12 Distribution of electrolyte current density and electrode current density

4 结论

本文构建了考虑热失控副反应的三维电化学-热-内短路耦合模型, 针对锂

枝晶引发的正极-负极内短路进行模拟, 分析了在不同锂枝晶半径和荷电状态下的内短路故障电热特性, 得到以下

结论。

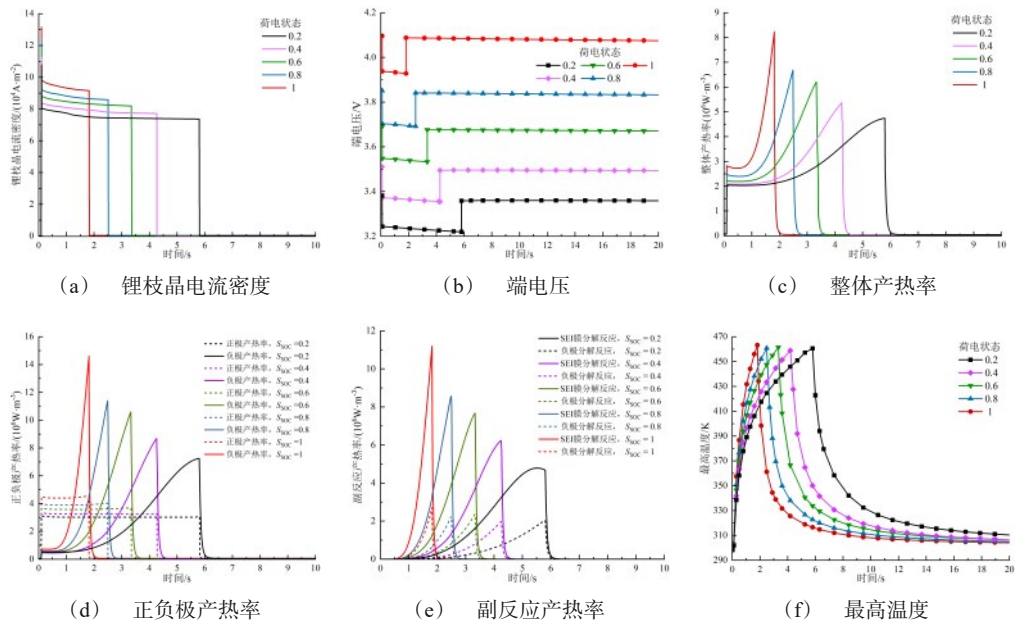


图13 不同荷电状态下电热特性仿真结果

Fig. 13 Simulation results of electrothermal characteristics under different states of charge

(1) 4种类型内短路的电池温升能力从大到小的排序为：铝-负极内短路、铝-铜内短路、正极-负极内短路、正极-铜内短路。内短路初期产热主要为正负极产热，该热量的累积会导致短路区域温度的升高，进而引发一系列副分解反应。其中，正极-电解液分解反应会产生大量的热，推动热失控进入不可逆阶段，因此故障诊断和阻断需在此阶段之前完成。

(2) 锂枝晶半径对热失控进程影响显著。锂枝晶半径越大，通过锂枝晶的电流越大，当锂枝晶半径从2 mm增至5 mm时，锂枝晶处电流由1.2 A增至

7.2 A，端电压压降由0.11 V增至0.33 V，电池整体产热率由 $0.42 \times 10^6 \text{ W} \cdot \text{m}^{-3}$ 提升至 $9.1 \times 10^6 \text{ W} \cdot \text{m}^{-3}$ ，熔断触发时间由6.8 s缩短至0.84 s。在本模型中，锂枝晶半径为1.4 mm时，是熔断触发的临界点。当锂枝晶半径小于等于1.4 mm时，电池散热量大于产热量，不会触发锂枝晶熔断。

(3) 锂离子电池发生内短路故障时，荷电状态越高，短路区域电解质电流密度和电极电流密度越大。当荷电状态从0.2升高至1时，锂枝晶电流密度增大了21.5%，端电压压降增大了14.45%，整体产热率增大了38%。电

池荷电状态越高,短路区域电流密度越大,短路区域欧姆产热和电化学反应产热加剧,从而导致电池整体产热率的增大、温升的加快即峰值温度的升高。

参考文献

- [1] LI D, LAU AD, GONG Y. Electric Vehicles Empowering the Construction of Green Sustainable Transportation Networks in Chinese Cities: Dynamic Evolution, Frontier Trends, and Construction Pathways[J]. *Energies*, 2025, 18(8): 1943.
- [2] WANG K, ZHANG J, CHANG C, et al. Thermal runaway evolution of a 4S4P lithium-ion battery pack induced by both overcharging and unilateral preheating[J]. *Case Studies in Thermal Engineering*, 2024, 63: 105324.
- [3] 李致远, 鲁锐华, 余庆华, 等. 动力电池热失控特征及防控技术研究分析[J]. *汽车工程*, 2024, 46(01): 139-150.
- LI Z, LU R, YU Q, et al. Research and Analysis of Thermal Runaway Characteristics and Prevention and Control Technology of Power Battery[J]. *Automotive Engineering*, 2024, 46(01): 139-150.
- [4] LIU L, FENG X, ZHANG M, et al. Comparative study on substitute triggering approaches for internal short circuit in lithium-ion batteries[J]. *Applied Energy*, 2020, 259(C): 114143-114143.
- [5] ZHANG L, LIU Y, HUANG X. Dynamic thermal runaway evolution of Li-ion battery during nail penetration[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2024, 233: 126020.
- [6] FENG X, PAN Y, HE X, et al. Detecting the internal short circuit in large-format lithium-ion battery using model-based fault-diagnosis algorithm[J]. *Journal of Energy Storage*, 2018, 18: 26-39.
- [7] PAN T, YU Z, MA S, et al. Detection of internal short circuit in lithium-ion batteries based on electrothermal coupling model[J]. *Journal of Energy Storage*, 2025, 106: 114685.
- [8] LIU X, ZHOU Z, WU W, et al. Three-Dimensional Modeling for the Internal Shorting Caused Thermal Runaway Process in 20Ah Lithium-Ion Battery[J]. *Energies* 2022, 15, 6868.
- [9] 吴文涛, 乔冬冬, 王学远, 等. 基于电化学机理模型的锂离子电池早期内短路电热特征研究[J]. *上海理工大学学报*, 2024, 46(01): 10-20.
- WU W, QIAO D, WANG X, et al. Electrical and thermal characteristics of early stage internal short circuit of lithium-ion batteries based on electrochemical mechanism model[J]. *Journal of University of Shanghai for Science and Technology*, 2024, 46(01): 10-20.
- [10] FENG X, HE X, LU L, et al. Analysis on the fault features for internal short circuit detection using an electrochemical-thermal coupled model[J]. *Journal of The Electrochemical Society*, 2018, 165(2): A155.
- [11] 黎钦懿, 杨林, 羌嘉曦. 融合内部温度估计的锂电池内短路建模与诊断[J]. *机电一体化*, 2021, 27(04): 31-40.
- Li Q, YANG L, QIANG J. Modeling and Diagnosis of Internal Short Circuit in Lithium Batteries with Fusion of Internal Temperature Estimation[J]. *Mechatronics*, 2021, 27(04): 31-40.
- [12] ZHANG L, ZHAO P, XU M, et al. Computational identification of the safety re-

- game of Li-ion battery thermal runaway[J]. *Applied Energy*, 2020, 261: 114440.
- [13] WANG W, ZUO F, LI Y. Research on influencing factors about temperature of short circuit area in lithium-ion power battery[J]. *Journal of Electrochemical Energy Conversion and Storage*, 2021, 18(2): 020910.
- [14] 崔志仙, 王青松, 孙金华. 锂枝晶导致的锂离子电池内短路模拟研究[J]. *火灾科学*, 2019, 28(02): 101-112.
- CUI Z, WANG Q, SUN J. Numerical study on lithium dendrite-induced internal short circuit of lithium ion battery[J]. *Fire Safety Science*, 2019, 28(02): 101-112.
- [15] DENG J, YANG X, ZHANG G. Simulation study on internal short circuit of lithium ion battery caused by lithium dendrite[J]. *Materials Today Communications*, 2022, 31: 103570.
- [16] 张妹. 高比能锂电池的内短路特性分析[D]. 北京交通大学, 2023.
- [17] 笱文达, 张睿, 丁飞. 锂离子电池电化学模型发展与应用[J]. *储能科学与技术*, 2023, 12(07): 2302-2318.
- ZAN W, ZHANG R, DING F. Development and application of electrochemical models for lithium-ion batteries[J]. *Energy Storage Science and Technology*, 2023, 12(07): 2302-2318.
- [18] 赵帅. 锂离子动力电池内短路机理与诊断方法研究[D]. 吉林大学, 2022.
- [19] JIANG G, ZHUANG L, HU Q, et al. An investigation of heat transfer and capacity fade in a prismatic Li-ion battery based on an electrochemical-thermal coupling model[J]. *Applied Thermal Engineering*, 2020, 171: 115080.
- [20] 张雪楠. 基于电化学-热耦合模型的锂电池安全分析研究[D]. 北京交通大学, 2022.
- [21] 黄文才, 胡广地, 张琦, 等. 锂离子电池高温热模拟及热行为[J]. *电池*, 2018, 48(06): 410-413.
- HUANG W, HU G, ZHANG Q, et al. High temperature thermal simulation and thermal behavior of Li-ion battery[J]. *Battery Bimonthly*, 2018, 48(06): 410-413.
- [22] 乔亚军, 任怡茂, 谭子健, 等. 锂离子电池单层电芯内短路建模与热失控触发特性[J]. *储能科学与技术*, 2024, 13(10): 3491-3503.
- QIAO Y, REN Y, TAN Z, et al. Modeling internal short circuit and thermal runaway triggers in single-layer lithium-ion battery cells[J]. *Energy Storage Science and Technology*, 2024, 13(10): 3491-3503.
- [23] KONG D, WANG G, PING P, et al. Numerical investigation of thermal runaway behavior of lithium-ion batteries with different battery materials and heating conditions[J]. *Applied Thermal Engineering*, 2021, 189: 116661.
- [24] 张明轩. 汽车动力电池系统内短路问题研究[D]. 清华大学, 2018.
- [25] ZHANG M, LIU L, STEFANOPOULOU A, et al. Fusing phenomenon of lithium-ion battery internal short circuit[J]. *Journal of the electrochemical society*, 2017, 164(12): A2738.