

仿真指导腐蚀防护方法

腐蚀每年耗费数十亿美元，是人类共同面对的问题。美国海军研究实验室在腐蚀科学方面的基础研究将使科学家们可以设计出固有抗腐蚀能力的材料。

作者：JENNIFER A. SEGUI

腐蚀是一个复杂的多物理场问题，华盛顿哥伦比亚特区海军研究实验室 (NRL) 的机械工程师 Siddiq Qidwai 和他的同事们目前正在研究这个问题。“从长远来看，如果我们的研究取得成功，将可以确定微结构与腐蚀的相关性，使材料设计人员可以在开发新的耐腐蚀材料时增加或排除某些特性，” Qidwai 解释道。

美国国家研究委员会 2011 年的国家科学院报告指出，“对于腐蚀尚缺乏基本的了解，它在实际中的应用直接反

映在腐蚀带来的高社会成本方面。”根据 2010 年 12 月报道的数字，用于修复或防止腐蚀损坏的花费高达 6000 亿美元，达到了美国国民生产总值的 2% 到 4%。

腐蚀对海运、空运和陆运等交通行业的影响尤为严重，用于保护乘客安全和车辆寿命的维护费用极高。“特别是对于海军来说，腐蚀是首要的维护问题，” Qidwai 说。

小晶粒的大影响

当相邻的电解质溶液中发生电化学反应和传质，导致局部材料损失时，金属中会发生点蚀，如图 1 所示。Qidwai 说：“凹坑会不断地生长，最终材料或部件会不堪重负而发生故障，”突出反映了腐蚀对材料强度和完整性的影响。

Qidwai 和他的同事想出了一种创新而全面的方法来更好地了解点蚀。“我

“我们的目标是对施加机械力的凹坑生长进行完全耦合的多物理场模拟，量化对结构完整性的整体影响。”

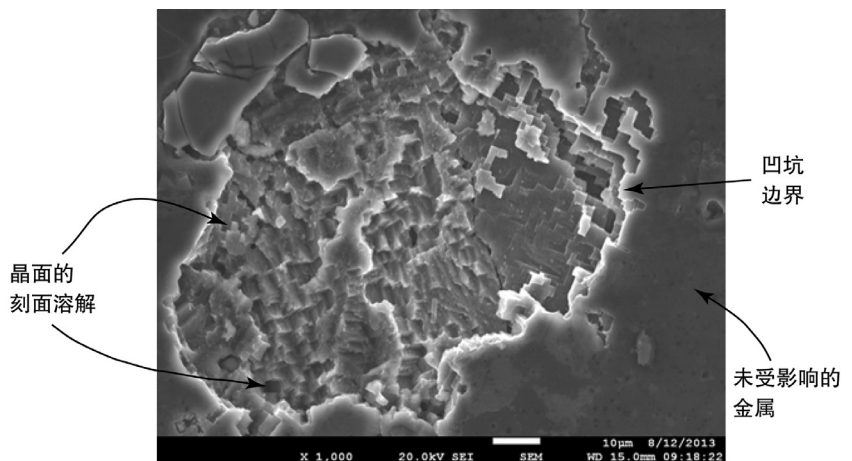


图 1：铝合金中的点蚀示例（俯视图）清楚地说明了材料的局部损失特性。凹坑的形成会降低材料的强度。图片由 NRL 的 C.Feng 和 S. Policastro 提供。

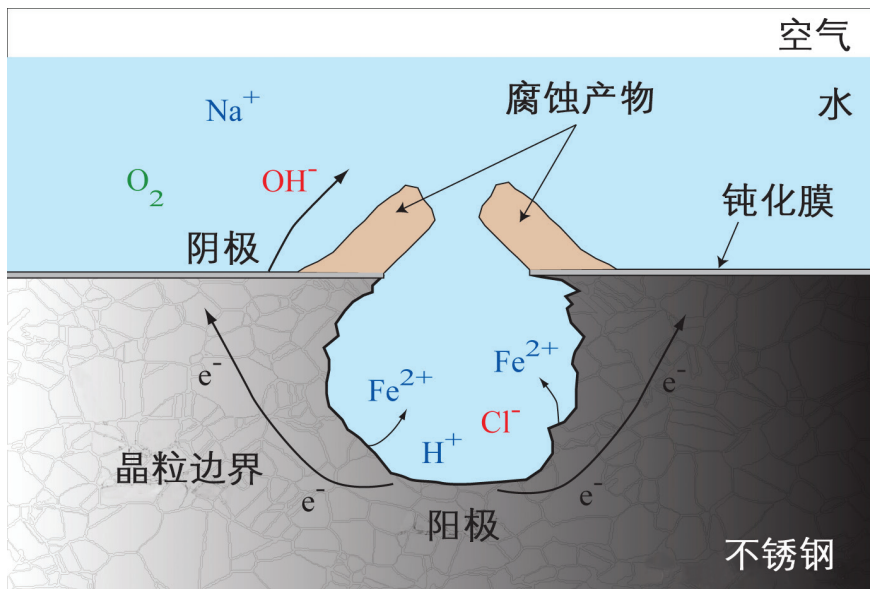


图 2：不锈钢之类金属中的腐蚀是电解质溶液中发生电化学反应和传质的结果。由于材料的微结构，形成了不规则的腐蚀锋面。

们对海水环境中金属腐蚀凹坑的生长进行了建模”，他解释道：“在以前的工作中，金属的微结构不属于关注的焦点，因此未考虑由于微结构而形成的不规则生长所带来的难题。我们的目标是对施加机械力的凹坑生长进行完全耦合的多物理场模拟，量化材料微结构对结构完整性的整体影响。”

图 2 示意图显示了由于金属微结构而出现的不规则腐蚀生长，这是由于每个晶粒独特的尺寸与形状而引起的。每个晶粒还具有特殊的晶体取向，这会影响局部的腐蚀速率或锋面运动。第二相、析出物和孪晶界是其他一些影响腐蚀凹坑形成和生长的金属特性。

腐蚀仿真与金属微结构

“完整地描述凹坑生长需要耦合多种离子物质的电化学反应和传质方程，以及描述电解液中反应速率和物质扩散的本

构方程，同时追踪金属 - 电解质界面或腐蚀锋面，而腐蚀锋面的运动取决于之前的结果，” Qidwai 解释道。图 2 描绘了 Qidwai 在 COMSOL Multiphysics® 中仿真的复杂腐蚀机理，图 3 显示了用于预测金属中凹坑生长的相应模型几何。

“在开发一个复杂模型时，我们的策略是从较简单的数值求解开始。目前在我们的仿真中，我们分别单独求解电化学和传质方程。在今后的工作中，我们将为腐蚀创建完全耦合的电化学传质模型。”为了创建模型，他们使用稀物质传递物理场来描述传质过程，使用拉普拉斯和泊松方程来描述电势分布，使用移动网格 (ALE) 技术来描述腐蚀锋面。“您可以使用 COMSOL Multiphysics 与腐蚀模块来解决这个问题，” Qidwai 说：“所

“您可以使用 COMSOL Multiphysics 与腐蚀模块来解决这个问题。所有以前看似很难的工作，现在是如此简单，因为模块为您完成了很多工作。”

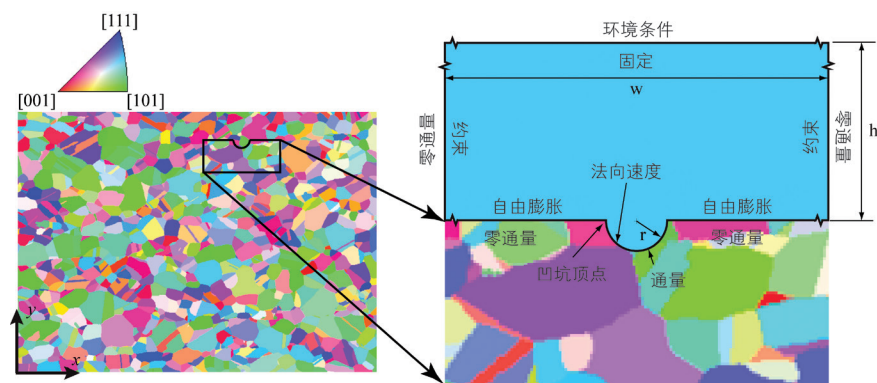


图 3：右侧是在 COMSOL Multiphysics 中创建的模型几何，用于预测金属中的凹坑生长。左侧是重构的金属微结构，它是使用 NRL 的定向成像显微镜确定的。彩色图例对应于每个晶粒的晶体取向。

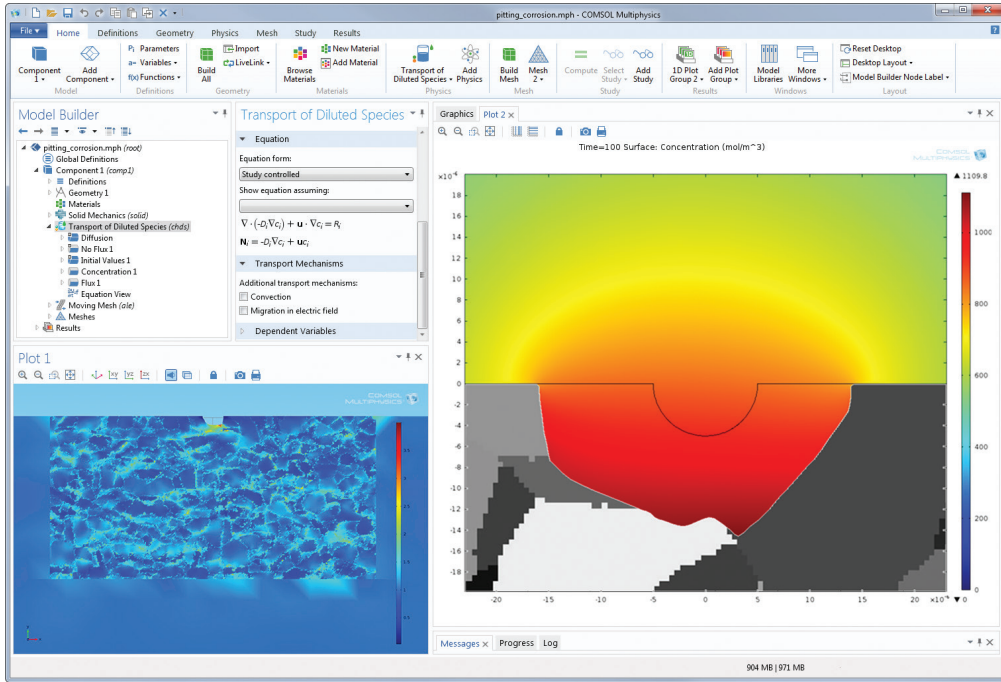


图 4 : COMSOL 环境的屏幕截图。绘图 1 显示了金属中的 von Mises 应力，凹坑周围的区域具有较高的应力。绘图 2 显示了具有不规则腐蚀锋面的凹坑生长，并显示了电解液中平均金属浓度的分布。

有以前看似很难的工作，现在是如此简单，因为模块为您完成了很多工作。”

将微结构导入点蚀的多物理场模型是一个艰巨的挑战，NRL 最初的处理方法是通过定向成像显微镜 (OIM) 来获取金属微结构的三维图像。图 3 显示了钢的 OIM 重构图像。他们使用了一种综合的方法将 316 钢的微结构导入到 COMSOL 环境中实现点蚀多物理场模拟。“在沿腐蚀锋面的每个位置，我们必须确定晶粒取向，以计算相应的点蚀电势，而该电势又将决定腐蚀速率和锋面的运动，” Qidwai 说。特定晶粒取向的点蚀电势在 MATLAB® 中确定，并最终由 COMSOL 模型用于计算腐蚀速率和腐蚀锋面的运动。“对于我们来说，LiveLink™ for MATLAB® 是一个必不可少的功能，我们使用它来考虑金属微结构的影响。”在模型中，316 钢的属性是

用户定制的。图 4 给出了 COMSOL 环境中的仿真结果，显示了材料由于点蚀而发生的局部损失。

在开发点蚀多物理场模型的过程中，Qidwai 发现：“COMSOL 是如此通用，即使对于非常复杂的应用，它也可以给出结果。这种情况下，实验验证是



从左到右：Siddiq Qidwai (NRL)、Virginia DeGiorgi (NRL) 和 Nithyanand Kota (Leidos Corp.) 正在研究金属中腐蚀的基本机理。

关键。”通过仿真得到的结果为微米尺度下腐蚀预测的实验方法开发提供了推动力。实验结果将用于验证模型的有效性，并建立微结构、凹坑形状和生长速度之间的关系。

腐蚀防护的未来发展

腐蚀模型已经过验证并且会进一步发展，将来腐蚀模型还会耦合结构力学分析来预测凹坑的生长对金属强度和可靠性的影响。目前，已成功实现了不考虑耦合的微结构钢的结构分析，如图 4 所示。Qidwai 和他在 NRL 的团队也在积极开发一些方法来确定微结构、凹坑生长和力学性能之间的定量关系。“建立这种关系是我们的最终目标，这将使材料设计人员可以创造出能够更好地抵抗甚至防止腐蚀的材料，从而降低所有人共同面对的高昂成本和不便。” ■