

腐蚀模块 ^{简介}

腐蚀模块简介

© 1998-2018 COMSOL 版权所有

受 cn.comsol.com/patents 中列出的专利和美国专利 7,519,518、 7,596,474、 7,623,991、 8,457,932、 8,954,302、 9,098,106、 9,146,652、 9,323,503、 9,372,673 及 9,454,625 的保护。专利申请中。

本文档和本文所述的程序根据 COMSOL 软件许可协议 (cn.comsol.com/comsol-license-agreement) 提供,且仅能按照许可协议的条款讲行使用和复制。

COMSOL、COMSOL 徽标、COMSOL Multiphysics、COMSOL Desktop、COMSOL Server 和 LiveLink 为 COMSOL AB 公司的注册商标或商标。所有其他商标均为其各自所有者的财产,COMSOL AB 及其子公司和产品不与上述商标所有者相关联,亦不由其担保、赞助或支持。相关商标所有者的列表请参见 cn.comsol.com/trademarks。

版本: COMSOL 5.5

联系信息

请访问 "联系 COMSOL"页面 cn.comsol.com/contact,以提交一般查询、联系技术支持或搜索我们的联系地址及号码。您还可以访问全球销售办事处页面 cn.comsol.com/contact/offices,以获取地址和联系信息。

如需联系技术支持,可访问 COMSOL Access 页面并填写在线申请表,位于: cn.comsol.com/support/case 页面。其他有用的链接还包括:

• 技术支持中心: cn.comsol.com/support

• 产品下载: cn.comsol.com/product-download

• 产品更新: cn.comsol.com/support/updates

• COMSOL 博客: cn.comsol.com/blogs

• 用户论坛: cn.comsol.com/community

• 活动: cn.comsol.com/events

• COMSOL 视频中心: cn.comsol.com/video

• 技术支持知识库: cn.comsol.com/support/knowledgebase

文档编号: CM023002

目录

简	介	.5
	应用	. 5
腐	蚀模块物理场接口	. 8
	根据空间维度和研究类型排列的物理场接口	11
钢	筋混凝土中钢的阴极保护	15
	模型定义	15
	结果和讨论	19
	参考文献	23

简介

腐蚀模块专门用来对水(电解质水溶液)中的金属结构腐蚀和腐蚀防护进行建模和模拟。

本模块可定义一维、二维和三维结构的组件,用于描述电化学反应、腐蚀反应 以及在金属结构和溶液之间的界面上发生的其他表面反应,在溶液中的离子和 中性粒子的传递,以及在金属结构中的电流传导。仿真可用于了解和避免腐蚀 的发生,以及设计和优化腐蚀防护。

腐蚀模块可以模拟具有不同尺度和不同层次细节的体系。举例来说,一个模型可能包含复杂的几何结构,例如,石油钻井平台或其他带有数百个牺牲阳极的水下结构。尽管结构可能很复杂,但由于海水是充分混合的电解质,因此我们可以简化对电解质的处理方式。另一方面,缝隙腐蚀模型的几何可能会很简单,但是却需要考虑溶液的复杂性,包括电解质溶液中所有的离子以及中性粒子,还要包含金属表面的多个竞争反应。对于上面描述的这些现象,无论是尺寸、几何复杂性,还是所描述的物理现象的复杂性,腐蚀模块都可以对这些极端情况进行建模。

应用

腐蚀模块能够对诸如原电池腐蚀、点蚀以及缝隙腐蚀等进行建模和模拟,常见应用还包括对阴极保护、牺牲阳极保护,以及阳极保护等体系的模拟。

图 1 是教程 App 中的绘图,位于腐蚀模块的 App 库中。图中显示了金属镁与钢之间的电接触形成原电池腐蚀,其中电解质溶液与两种金属表面同时发生接触。仿真考虑了两种金属表面上阳极和阴极反应的电极动力学。通过仿真,使用移动边界预测了由于镁的溶解而造成的金属表面形状的变形过程。这种类型的仿真对于汽车、船舶、石油和天然气以及炼油工业具有很大的意义,因为在这些工业领域,为了降低金属部件的重量,大量地将镁、铝和钢一起使用。当

电接触的不同材料浸没到水中时,对它们的使用寿命进行估算,作出风险提示就变得非常重要。

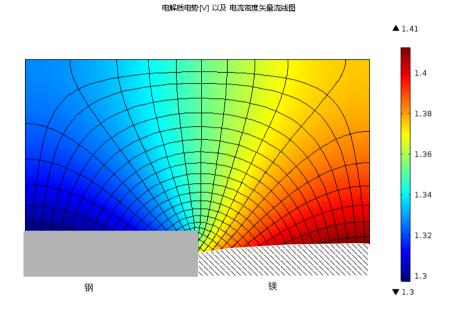


图 1: 金属镁与钢之间由于电接触和电解质接触而引起的原电池腐蚀。镁和钢表面的初始形状是平的面。

图 2 显示了浸没在海水中的石油钻井钢结构表面的电解质溶液电位。这种钢结构通过 40 个牺牲铝阳极进行保护。通过仿真,可以预测钢结构的所有区域是否都得到了牺牲阳极很好的保护。将钢结构和牺牲阳极部署在海中之前,可以利用模型将阳极的位置进一步优化,对钻井钢结构提供最好的保护。此外,还

可以预测牺牲阳极在不同位置时的寿命。您可以在**腐蚀模块**的 App 库中找到此模型。

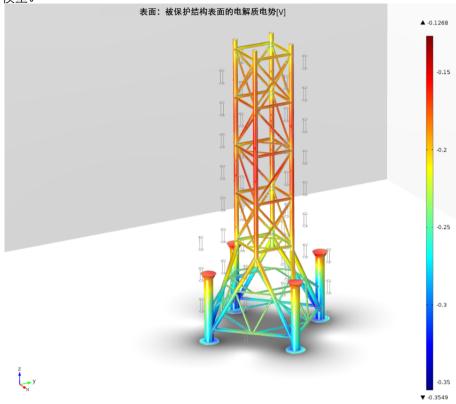


图 2: 石油钻井结构表面的电解质溶液电位。

腐蚀模块物理场接口

腐蚀模块具有一系列物理场接口,可以描述电解质水溶液中带电离子和中性粒子的传递和反应,表面反应(电化学和化学反应)及金属表面吸附粒子的成形或覆盖,也可以描述电解质和金属中电流的传递,薄层金属结构 (作为壳处理)中的电流传递,以及流体流动和传热。

图 3 显示模型向导中可用于三维模型的物理场接口。

▲ 🎎 化学物质传递 🚅 稀物质传递 (tds) ▼ Nernst-Planck-Poisson 方程 多孔介质稀物质传递 (tds) 🎦 电泳输送 (el) ▶ 表面反应 (sr) ■ 1 电化学 ▲ 1 一次和二次电流分布 ─ 一次电流分布 (cd) 📃 电流分布,边界元 (cdbem) 电流分布, 壳 (cdsh) ▲ 🕌 三次电流分布 , Nernst-Planck ※ 三次分布,电中性(tcd) ※ 三次分布,水基电中性 (tcd) ※ 三次分布,支持电解质 (tcd) 🇽 电分析 (elan) 売电板 (els) 🛮 浑 腐蚀,变形几何 🥦 腐蚀,一次电流 💆 腐蚀 , 二次电流 篇 腐蚀,带电中性条件的三次电流 高蚀,含支持电解质的三次电流 ▷ ≫ 流体流动 ▶ # 传热

图 3: 模型向导中可用于三维模型的物理场接口列表。

电流分布接口

♪ ⇒ 结构力学♪ Δυ 数学

电化学接口包含一次电流分布() 、二次电流分布() 和三次电流分布, Nernst Planck () 接口。它们是可用于对大多数电化学电池进行建模的通用 物理场接口。 这些接口包含的功能可对电解液中的电流分布、沉积 / 溶解和电极表面薄层的厚度变化进行建模。然而请注意,如果这些层的厚度变化与电极几何细节的数量级相同(或低一级),则需要使用一个**腐蚀变形几何**接口 来代替(请参见下一节)。

- 一次电流分布(↓」)接口假设电解质完美混合,并忽略电荷转移反应中的活化 损耗,只能用于动力学过程较快的情况。电解质完美混合的假设意味着电解质 电导率不受电流大小的影响。
- 二次电流分布(山) 接口在分析中考虑了电化学反应的活化过电位。
- 一次和二次电流分布接口可与**化学物质传递**接口 (如下所述)结合使用,以合并电解质中的活性物质与电极表面吸附物种的动力学效应。

电流分布,边界元(□)接口可用于求解基于边(梁或线)和表面单元的几何中的一次和二次电流分布问题。该接口使用**边界元法**(BEM)公式对电导率恒定的电解质的电荷转移方程进行求解,其中,电极在边界上指定或在代表周围具有给定半径的管的边上指定。此接口通常用于在大型几何结构中缩短网格剖分和求解时间,其中,几何结构的重要部分可近似为使用边来表征的管。

三次电流分布,Nernst-Planck(当)接口可以模拟物质通过扩散、电迁移以及对流进行的输运,因此可以描述电镀过程中组分变化的影响。电化学反应的动力学表达式中,可以同时考虑活化过电位和浓度过电位。该物理场接口在描述物质和电流守恒的方程组中还使用了电中性方程。这也意味着电解质中的所有带电物质都需要在仿真时进行定义,除了那些浓度很低可以被忽略的物质。

腐蚀,变形几何接口

腐蚀,变形几何() 接口合并了上述一次、二次及三次电流分布接口与**变形几何**接口,用于追踪在电极表面由于沉积或溶解反应而引起的几何变化。请参见图 1 中的示例。值得注意的是,在这个案例中如果在阴极表面的沉积层厚度变化可以被忽略,则可以使用前面提到的通用电流分布接口来描述该问题。

电解分析接口

电解分析接口(☑)使用扩散-对流方程对电解液中稀物质的质量传递进行建模,并求解电活性物质的浓度,适用于含有大量"支持"电解质的电解质溶液,其中假设可以忽略欧姆损耗。该物理场接口包含非常适合处理循环伏安问题的功能。

化学物质传递接口

在化学物质传递分支下有一个**稀物质传递**接口(**1**)。如果与**二次电流分布**接口(**1**) 耦合,此物理场接口可用于对具有支持电解质的体系进行建模。在这些体系中,假设离子均匀分布,电流传导是其中的主导形式。这些物理场接口的一个典型应用是电解质溶液中溶解氧的输运,其中假设电解质中离子的浓度分布均匀目不变。

Nernst-Planck-Poisson 方程(﴿) 接口可用于研究不能假定电中性的电化学双层中电荷和离子的分布。使用此接口的一个必要条件是在网格中能够解析双电层(通常在几十纳米范围内)。

多孔介质稀物质传递接口(≥≥)可以描述饱和与变饱和多孔介质中液、固和气相间的物质传递。它可以描述在充满(饱和)或部分充满(不饱和)液体的多孔介质中,一种或多种物质随液体的运移。未被液体填充的孔隙包含静止气相。使用本接口,可以求解耦合有多孔介质类型的模型,它还适用于土壤和岩石中的金属结构的腐蚀和腐蚀防护建模,例如在石油、天然气和土木工程领域的应用。

电泳输送(素)接口可用于研究水溶剂中弱酸性、碱性和两性电解质的输送。 此物理场接口通常用于模拟各种电泳模式,例如区带电泳、等速电泳、等电聚 焦以及移动界面电泳,适用干涉及多个酸碱平衡的任何含水体系。

表面反应接口(▮) 可用于模拟表面 (吸附) 物质的反应和两侧输送。

多孔介质流动

流体流动接口(≥)可与**腐蚀模块**接口相互耦合,用于对腐蚀和腐蚀防护过程中的自然和强制对流进行建模。

达西定律接口(№)用于对多孔介质中的流体流动建模,将多孔介质和流体平均等效为一种介质。结合连续性方程和描述多孔液体(或气体)状态的方程,此物理场接口可用于对低速流动进行建模,压力梯度是其中主要的驱动力。多孔结构中气体的渗透是腐蚀和腐蚀防护问题中最常见的例子。

达西定律假设流体主要受到孔隙中的摩擦阻力的影响,常用于低速或孔隙率很小的情形。当孔隙较大且流体会受到自身的影响时,需要考虑流速梯度、压力及重力,这种情形需要使用 **Brinkman** 方程接口。

Brinkman 方程接口(**□**)用于对流速低于 0.3 马赫的可压缩流动进行建模,必须耦合密度和质量守恒。

自由和多孔介质流动接口(►)适用于既有自由对流又有多孔介质的情形,比如浸入水中的混凝土结构。

传热

传热接口(<mark>∭</mark>)提供了现成的公式,可用于计算焦耳热贡献及其他电化学损耗, 以及腐蚀和腐蚀防护中的热平衡。

各种**传热**接口的特征包括**流体传热**(**◎**)、**固体传热**(**◎**) 及**多孔介质传热**(**◎**),并解释了传导和对流传热。此外,这些特征无缝地相互影响,可以在一个模型中耦合使用。

有关这些物理场接口定义的详细方程和假设的信息,请参阅 Corrosion Module User's Guide 和 COMSOL Multiphysics Reference Manual。

数学 - 移动界面

水平集())接口可用于分析受拓扑变化影响的问题,包括变形电极。

根据空间维度和研究类型排列的物理场接口

下表列出了 COMSOL Multiphysics 基本许可证提供的物理场接口和特定于此模块的物理场接口。

物理场接口	图标	标记	空间维度	可用的预设研究类型
∷ 化学物质传递				
表面反应	-	sr	所有维度	稳态 (仅包括三维,二
KHI/L	- 180		/// Η -ŒIX	维,二维轴对称模型);
				瞬态

物理场接口	图标	标记	空间维度	可用的预设研究类型
稀物质传递	•	tds	所有维度	稳态;
				瞬态
多孔介质稀物质传递	4	tds	所有维度	稳态;
				瞬态
裂隙中的稀物质传递		dsf	三维; 二维;	稳态;
			二维轴对称	瞬态
电泳输送	1 1 1	el	所有维度	稳态;
				带初始化的稳态;
				瞬态;
				带初始化的瞬态
Nernst-Planck-Poisson 方	•	tds+es	所有维度	稳态;
程				瞬态;
				稳态源扫描;
				小信号分析,频域
反应流				
层流,稀物质		_	三维; 二维;	稳态;
			二维轴对称	瞬态
₩ 电化学				
一次电流分布	H	cd	所有维度	稳态;
				带初始化的稳态;
				瞬态;
				带初始化的瞬态;
二次电流分布				交流阻抗,初始值;
				交流稳态阻抗;
		ļ		交流瞬态阻抗
三次电流分布,		tcd	所有维度	稳态;
Nernst-Planck (电中性,				带初始化的稳态;
水基电中性,支持电解				瞬态;
质)				带初始化的瞬态;
				交流阻抗,初始值;
				交流稳态阻抗;
				交流瞬态阻抗

物理场接口	图标	标记	空间维度	可用的预设研究类型
电流分布,边界元		cdbem	所有维度	稳态; 带初始化的稳态; 瞬态; 带初始化的瞬态; 交流阻抗,初始值; 交流稳态阻抗; 交流瞬态阻抗
电流分布,壳	• 🗓 -	cdsh	所有维度	稳态; 带初始化的稳态; 瞬态; 带初始化的瞬态; 交流阻抗,初始值; 交流稳态阻抗; 交流瞬态阻抗
电分析		elan	所有维度	稳态; 瞬态; 交流阻抗,初始值; 交流稳态阻抗; 交流瞬态阻抗; 循环伏安法
売电极	*8-	els	三维; 二维; 二维轴对称	稳态; 瞬态
腐蚀,变形几何	•	•		
腐蚀,一次	<u></u>	siec + dg	所有维度	稳态; 带初始化的稳态; 瞬态;
腐蚀,二次	<u></u>			带初始化的瞬态; 交流阻抗,初始值; 交流稳态阻抗; 交流瞬态阻抗

物理场接口	图标	标记	空间维度	可用的预设研究类型
腐蚀,三次 (电中	<u>-</u>	tcdee +	所有维度	稳态;
性,支持电解质)	- +	dg		带初始化的稳态;
				瞬态;
				带初始化的瞬态;
				交流阻抗,初始值;
				交流稳态阻抗;
				交流瞬态阻抗
渝体流动				
🤡 多孔介质和地下水	流			
	1	1	1	T
Brinkman 方程	0	br	三维;	稳态;
			二维;	瞬态
			二维轴对称	
达西定律	A.	dl	所有维度	稳态;
				瞬态
自由和多孔介质流动		fp	三维;	稳态;
			二维;	瞬态
			二维轴对称	
∭ 传热				
	1	T		T
多孔介质传热		ht	所有维度	稳态;
				瞬态
移动界面				
水平集	\$\$ \$\$\$	Is	所有维度	包含相初始化的瞬态

钢筋混凝土中钢的阴极保护

阴极保护 (CP) 是一种防止混凝土结构 (诸如桥梁和停车库)中钢筋腐蚀的常用方法。使用阴极保护降低了腐蚀表面的电位,因此降低了本不希望发生的阳极腐蚀反应的速率。

本例对混凝土中一根钢筋的阴极保护进行建模。其中,腐蚀池包括锌阳极、作为电解质的混凝土及钢铁表面。模型中考虑了钢筋表面铁的氧化、水的还原(析氢),以及氧气的还原,另外还考虑了混凝土电解质中氧气和电荷的传递。

阳极和钢表面诵讨恒电位仪连接, 用来控制电池电压。

混凝土是一种多孔材料,其离子和气体的传递性质随水分含量而变化。因此,基于实验数据,在模型中使电解质的导电率和氧气扩散系数会随着混凝土多孔饱和度变化。在此模型中,研究了不同水分含量时的腐蚀速率。该模型基于Muehlenkamp等人的文章建立(参考文献1)。

模型定义

几.何

图 4 显示了模型几何。该几何表示大型结构中一个周期性重复单元的二维横截面,其中大型结构简化成具有三个对称面 (顶面、底面和右面)的几何模型结构。

通过热喷涂的方法, 锌阳极被涂覆在混凝土上, 并假设其中渗透空气。

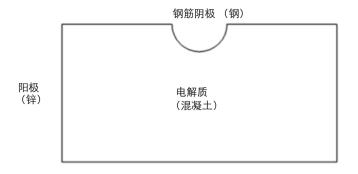


图 4: 模型几何。一个电解质域和两个电极表面。

混凝土域方程

使用二次电流分布接口对电化学电流进行建模。图 5 显示了随孔隙饱和度而变化的电解质导电率。

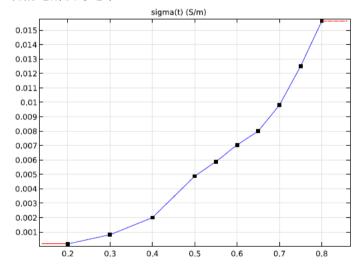


图 5: 电解质电导率 (S/m) 作为混凝土孔隙饱和度的函数。

混凝土域中氧气的传递是利用稀物质传递接口来描述,氧化扩散系数依赖于孔隙的孔隙饱和度,如图 6 所示。

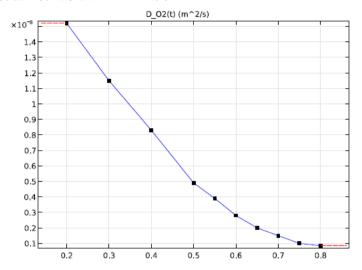


图 6: 混凝土中氧气扩散系数 (m²/s) 作为孔隙饱和度的函数。

边界条件

选择锌阳极的电位为接地。假设 Zn 阳极的反应动力学非常快,可以忽略极化,因此设置电解质电位为:

$$\phi_{l,Zn} = -E_{eq,Zn} + \phi_{s,Zn} = -E_{eq,Zn}$$

其中 $E_{\rm eq,Zn}$ 是热喷涂锌 / 混凝土电极的经验测量平衡电位。在此模型中, $E_{\rm eq,Zn}$ 设为 -0.68 V。

Zn 阳极上的氧气浓度设为大气中的浓度值:

$$c_{\text{O}_2, \text{Zn}} = c_{\text{O}_2, \text{ref}}$$

在钢筋边界上考虑三个不同的电极反应:铁氧化、氧还原及析氢反应:

$$Fe \rightarrow Fe^{2+} + 2e^{-}$$

$$O_2 + 2H_2O + 4e^{-} \rightarrow 4OH^{-}$$

$$2H_2O + 2e^{-} \rightarrow H_2 + 4OH^{-}$$

这些反应的动力学通过**电极表面**节点进行建模,在该边界条件上,钢筋的外电位 $\phi_{x,steel}$ 设为施加的电池电位 -1 V。

钢筋反应的电极动力学根据 Tafel 表达式描述:

$$\begin{split} i_{\text{Fe}} &= i_{0, \text{ Fe}} \times 10^{A_{\text{Fe}} \eta_{\text{Fe}}} \\ i_{\text{O}_2} &= -\frac{c_{\text{O}_2}}{c_{\text{O}_2, \text{ref}}} i_{0, \text{O}_2} \times 10^{A_{\text{O}_2} \eta_{\text{O}_2}} \\ i_{\text{H}_2} &= -i_{0, \text{H}_2} \times 10^{A_{\text{H}_2} \eta_{\text{H}_2}} \end{split}$$

使用表中显示的参数,其中每个反应的过电位都根据以下公式计算:

$$\eta = \phi_{s, \text{ steel}} - \phi_l - E_{eq}$$

参数	单位	Fe	02	H ₂
平衡电位,E _{ea}	V	-0.76	0.189	-1.03
交换电流密度, <i>i</i> ₀	A/m ²	7.1x10 ⁻⁵	7.7x10 ⁻⁷	1.1x10 ⁻²
Tafel 斜率,A	V/decade	0.41	-0.18	-0.15

根据法拉第定律,在钢表面发生的氧还原反应产生氧气通量,要设置这一通量,在**电极反应**节点中输入化学当量系数。

其他边界都应用绝缘类型的对称边界条件。

大气浓度则用作氧气浓度的初始值。

研究

该模型在稳态求解器中利用参数化扫描进行求解,其中孔隙饱和度参数的扫描 范围是 0.2 到 0.8。

结果和讨论

图 7 显示了孔隙饱和度为 0.8 时的电解质电位,图中的结果表明电解质电位在钢筋的右端较低。

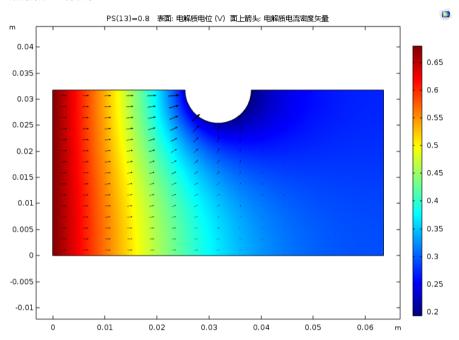


图 7: 孔隙饱和度(湿度)为 0.8 时的电解质电位

下页中的图 8 显示了孔隙饱和度为 0.8 时,电解质中的氧气浓度。钢筋附近的浓度非常低,表明在这种孔隙饱和度条件下,氧气的反应受到质量传递的限制。离钢筋向右方向越远,浓度越低。

影响钢筋腐蚀速率的一个重要因素是工作电极电位,它是电极电位 (这里的电位由恒电位仪提供)和电解质电位之差。下页中的图 9 显示了钢筋表面三个不同位置点 (前、中、后)在不同孔隙饱和度情况下的工作电极电压。在孔隙饱和度为 0.65 时,电位显著降低。

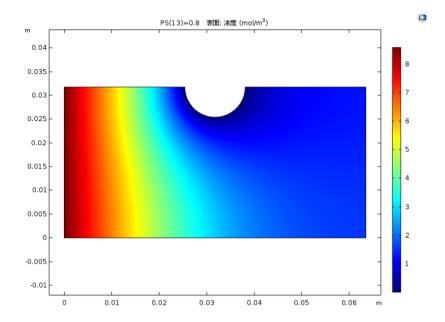


图 8: 孔隙饱和度(湿度)为 0.8 时的氧气浓度。

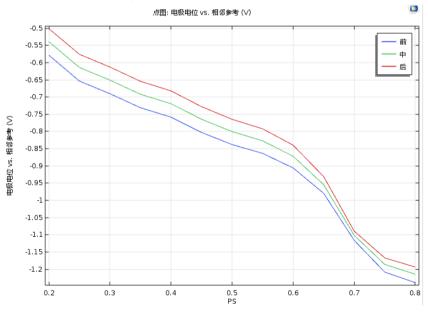


图 9: 钢筋 - 混凝土界面三个不同位置点处的工作电极电位。

图 10 显示了在不同孔隙饱和度时钢筋上的局部氧气浓度。孔隙饱和度越高,浓度下降得越明显。这是因为当孔隙饱和度增加时,会降低混凝土中的氧气扩散速率。

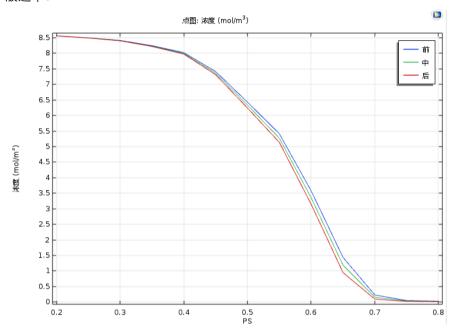


图 10: 钢筋 - 混凝土界面处的局部氧气浓度。

图 11 显示了在钢筋上的局部氧还原电流密度。当孔隙饱和度在 0.6-0.65 范围时,还原电流的绝对值最大。在此之前,电流密度会随着电解质电导率的升高而增加。但如果孔隙饱和度继续增大,电流密度会因为氧气扩散速率的下降而降低。

图 12 显示了析氢反应电流。在孔隙饱和度低于 0.65 时,析氢是非常有限的。在这种饱和度条件下,析氢反应的电极电位低于平衡电位 $(1.03~\mathrm{V})$,请参见图 9。

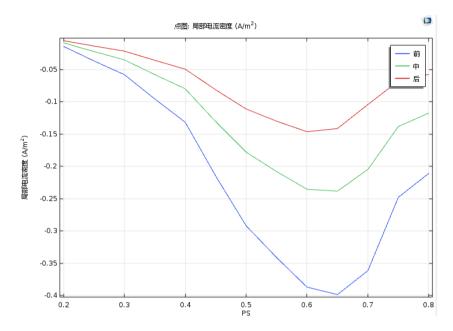


图 11: 钢筋 - 混凝土界面处的局部氧还原电流密度。

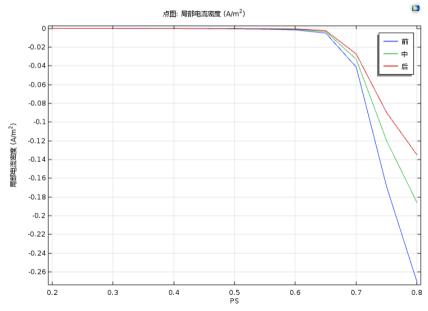


图 12: 钢筋 - 混凝土界面处的局部析氢电流密度。

最后,图 13 显示的是铁氧化电流密度。在较低的孔隙饱和度时腐蚀电流密度 更高,这是因为低孔隙饱和度时会有更高的电极电位(图 9)。通常情况下, 铁氧化电流越低,意味着钢筋得到了越好的保护。

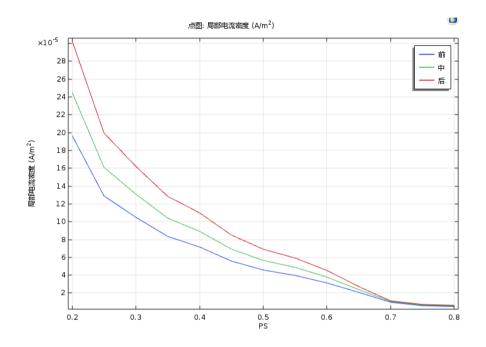


图 13: 钢筋 - 混凝土界面处的铁腐蚀电流密度。

参考文献

1. E.B. Muehlenkamp, M.D. Koretsky, and J.C. Westall, "Effect of Moisture on the Spatial Uniformity of Cathodic Protection of Steel in Reinforced Concrete", *Corrosion*, vol. 61, no 6. pp. 519–533, 2005.

模型向导

注: 这些操作说明基于 Windows 用户界面,但同样适用于 Linux 和 Mac, 只是略有差别。

1 双击桌面上的 COMSOL Multiphysics 图标启动软件。当软件打开后,可以 选择使用**模型向导**创建一个新的 COMSOL Multiphysics 模型或使用**空模型** 来手动创建。对于本教程,单击**模型向导**按钮。

如果 COMSOL Multiphysics 已打开,您可以选择**文件**菜单中的**新建** 🗋 ,然 后单击**模型向导** 💿 开始创建模型。

模型向导将指导您创建模型的最初几个步骤。下一个窗口可供您选择建模空间的维度。

- 2 在**空间维度**窗口中单击**二维**按钮 。
- **3** 在**选择物理场**树中,单击**电化学 > 三次电流分布,**Nernst Planck > 三次分布, 支持电解质 **汕**。



- 4 单击添加。
- 5 在**物质数**文本框中, 键入 1。
- 6 在浓度表格中,输入 c。
- 7 单击研究 ♠ 按钮。
- 8 在树中的一般研究下,单击稳态 ≥。
- 9 单击完成 ▼。

全局定义

从文本文件加载模型参数。

注:本练习使用的文件的位置取决于 COMSOL Multiphysics 的安装。例如,如果是安装在硬盘上,则文件的位置可能如下 C:\Program Files\COMSOL54\applications\。

参数

1 在**主屏幕**工具栏,单击参数 P_i 并选择参数 1 P_i。

 $oldsymbol{\dot{z}}$: 在 Linux 和 Mac 下,**主屏幕**工具栏是指 Desktop 顶部附近的一组特定 控件。

- 2 在**参数的设置**窗口中,单击**从文件加载**按钮 📂。
- 3 浏览至 App 库文件夹 Corrosion Module>Cathodic Protection, 双击文件 cathodic protection in concrete parameters.txt。

图片显示了加载文本文件后的参数列表。可以手动编辑参数列表,还可以将其保存为文本文件,以在其他模型中反复使用。(要创建自己的文本文件,单击保存到文件按钮 🔲)。

▼ 参数			
* 名称	表达式	值	描述
A_Fe	0.41[V]	0.41 V	Tafel sl
A_H2	-0.15[V]	-0.15 V	Tafel sl
A_O2	-0.18[V]	-0.18 V	Tafel sl
C_O2_ref	8.6[mol/m^3]	8.6 mol/m³	Oxygen
Eeq_Fe	-0.76[V]	-0.76 V	Iron ox
Eeq_H2	-1.03[V]	-1.03 V	Hydrog
Eeq_O2	0.189[V]	0.189 V	Oxygen
i0_Fe	7.1e-5[A/m^2]	7.1E-5 A/m ²	Iron ox
i0_H2	1.1e-2[A/m^2]	0.011 A/m ²	Hydrog
i0_O2	7.7e-7[A/m^2]	7.7E-7 A/m ²	Oxygen
Eeq_Zn	-0.68[V]	-0.68 V	Zn equi
L	3.175e-2[m]	0.03175 m	Concre
R_rebar	0.635e-2[m]	0.00635 m	Reinfor
S	2.54e-2[m]	0.0254 m	Concre
W	6.35e-2[m]	0.0635 m	Width
PS	0.6	0.6	Pore sa
E_app	-1[V]	-1 V	Applie

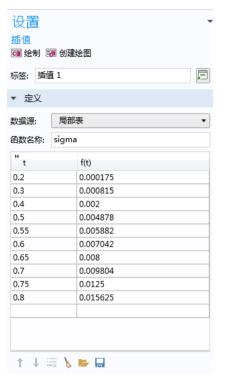
定义

利用内插函数创建与孔隙饱和度相关的电解质电导率和氧气扩散系数,从另一文本文件加载数据。

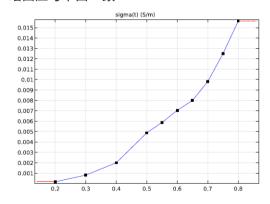
内插 1

- 1 在**主屏幕**工具栏上,单击函数 f(x) ,然后选择局部 > 内插 🔩 •
- 2 在**模型开发器**窗口的**定义**下,单击**内插 1 🔨。**

- **3** 在**内插**的**设置**窗口找到**定义**栏,选择**从** 文件加载。
- 4 单击**浏览**,进入 App 库文件夹 Corrosion Module>Cathodic Protection。 双击文件 cathodic_protection_in_concrete sigma.txt。
- 5 单击导入。
- 6 在**内插**的**设置**窗口的**函数名称**文本框中,输入 sigma (替换默认值)。
- 7 找到**单位**栏,在**函数**文本框输入 S/m。
- 8 单击绘制按钮 ፴ 。



绘图应与下图一致:

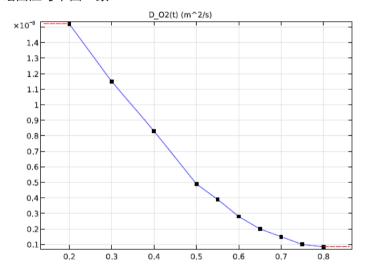


内插 2 以相同的方式创建另一个内插函数。

1 在**主屏幕**工具栏,单击函数 f(x) ,并选择局部内插 <1.。

- 2 在模型开发器中单击内插 2 << 。。
- 3 在**内插的设置**窗口,找到**定义**栏,选择**从文件加载。**
- 4 单击**浏览**, 进入 App 库文件夹 Corrosion Module>Cathodic Protection。双击 文件 cathodic protection in concrete D 02.txt。
- 5 单击导入。
- 6 在**内插**的设置窗口的函数名称文本框中,输入 D_02。
- 7 找到**单位**栏,在**函数**文本框中输入 m^2/s。
- 8 单击绘制按钮 ፴ 。

绘图应与下图一致:



几何1

现在使用矩形和圆创建几何。

矩形 1

1 在模型开发器窗口,右键单击几何 1 🖰 ,并选择矩形 🔲 。

- 2 在矩形的设置窗口的大小栏:
 - 在宽度文本框输入 W。
 - 在高度文本框输入 L。
- 3 单击**构建选定对象**按钮 ,如果需要,可以在**图形**工具栏上单击**缩放到窗口大小**按钮 ♠。

圆 1

- **1** 在**模型开发器**窗口,右键单击 **几何 1** ¼ ,并选择**圆** ○ 。
 - 在**圆的设置**窗口的**大小和形状**栏, 在**半径**文本框输入 R rebar。
- **2** 在**位置**栏:
 - 在 x 文本框输入 S+R rebar。
 - 在 y 文本框输入 L 。
- 3 单击构建选定对象按钮 ■。





差集1

- 1 在模型开发器窗口,右键单击 几何 1 ¼,并选择布尔运算 > 差集 □。
- 2 选择对象 rl(矩形)。在图形窗口,单 击 rl 和添加 →,将其添加到差集设 置窗口的要添加的对象列表。
- 3 在**差集的设置**窗口,找到**差集**栏。
- 4 单击要减去的对象下的激活按钮。
- 5 使用与添加矩形相同的方法将对象 cl (圆)添加至**要减去的对象**列表。
- 6 单击全部构建按钮 。几何应与图 4 一致。



三次电流分布, Nernst-Planck (TCD)

现在,设置三次电流分布的物理场接口。从域传递属性开始。

电解质1

- 1 在**模型开发器**窗口,展开**组件 1 (comp1) > 三次电流分布,** Nernst-Planck (tcd),然后单击**电解质 1 꽅**。
- 2 在**电解质的设置**窗口中找到**扩散**栏。在 **Dc** 文本框中,键入 D O2(PS)。



3 在模型开发器窗口中, 单击电解质 1。



- 4 在电解质的设置窗口中,找到电解质电流传导栏。
- 5 从 σ_l 列表中选择**用户定义**,在对应的文本框中键入 sigma(PS)。

注:函数 sigma 的变元 PS 为孔隙饱和度参数,请参见全局定义**参数**列表中的定义。

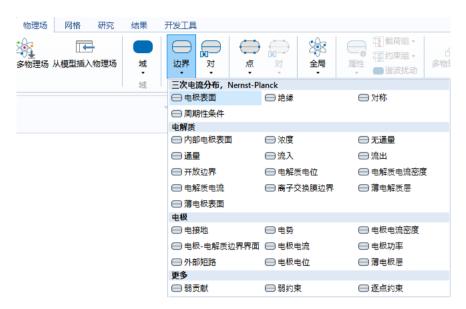


初始值1

- 1 在**模型开发器**窗口中,展开**组件** 1 (comp1) > 三次电流分布, Nernst-Planck (tcd), 然后单击初始值 1。
- 2 在初始值的设置窗口中,找到初始值栏。
- 3 在 c 文本框中, 键入 C O2 ref。

电极表面1

1 在模型开发器窗口中,右键单击三次电流分布, Nernst-Planck (tcd), 并选 择电极表面。



2 仅选择边界1 (几何的左边界)。

电极反应1 (锌氧化)

假设在阳极表面通过描述平衡势设置了快速反应动力学 (恒定电势),并且在 **电极反应**子节点使用**首要条件 (热力学平衡**)类型的电极动力学。

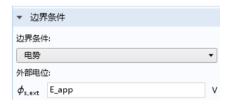
- 1 在**模型开发器**窗口展开**电极表面**1节点。
- 2 右键单击**电极反应** 1 并选择**重命名**。
- **3** 在**重命名电极反应**对话框的**新标签**文本框中,输入氧化锌。
- **4** 单击**确定**。
- 5 在**电极反应**的**设置**窗口,找到**平衡电位**栏。
- 6 在 Eeq 文本框中输入 Eeq_Zn。

7 找到**电极动力学**栏,从**动力学表达式类型**列表中选择**热力学平衡**。



申极表面 2

- 1 在物理场工具栏上单击边界 ─ ,选择电极表面 ─ 。
- 2 在模型开发器窗口的二次电流分布下,单击电极表面 2 ← 。
- 3 仅选择边界 6 和 7 (钢筋的左右边)。
- 4 在电极表面的设置窗口,找到边界条件栏。



5 在 $\phi_{s,ext}$ 文本框输入 E_app。

电极反应1 (氧还原)

在此电极表面有三个不同的反应发生: 氧还原、铁氧化及析氢反应。

- 1 在模型开发器窗口展开电 极表面 2 节点,单击电极 反应 1。
- 2 按键盘上的 F2 键,以重命 名该节点(或右键单击该 节点并选择**重命名**)。输 入**氧还原**作为新名称。
- 三次电流分布 , Nernst-Planck: 三次电流分布 , Nernst-Planck (tcd)
 电解质 1
 □ 无通量 : 无通量 1
 □ 给緣 1
 □ 初始值 1
 □ 电极表面 : 电极表面 1
 □ 电极表面: 电极表面 2
- 3 在电极反应的设置窗口 (新命名的氧还原节点),找到平衡电位栏。在平衡电位 *E*ea 文本框中输入 Eeq_02。

- 4 在电极动力学栏下的动力学 表达式类型列表中选择阴极 Tafel 方程。
 - 在**交换电流密度 i** 文本框中输入 c/ C_02_ref*i0_02。 交换电流密度因此取决于 氧气浓度。
 - 在**阴极 Tafel 斜率** (<0) **Ac** 文本框输入 A 02。
- ▼ 电极动力学

 动力学表达式类型:

 阴极 Tafel 方程
 ▼

 交换电流密度:
 i₀ c/C_O2_ref*i0_O2
 A/m²

 阴极 Tafel 斜率 (<0):</td>
 Ac

 A_O2
 V

 i₁oc = -i₀ × 10^{η/Ac}
 U

 极限电流密度
 V
- 5 在**电极反应**的**设置**窗口中,定位到**化学当量系数**栏。
 - 在参与电子数字段中输入 4。
 - 在**化学当量系数**字段中输入 -1。

接下来,添加、重命名和定义另外两个电极反应节点。

申极反应2 (铁氧化)

- 1 在物理场工具栏单击属性,并选择电极反应 ─ 。
- 2 按 F2 键将电极反应 2 重命名为铁氧化。单击确定。
- 3 在电极反应的设置窗口的平衡电位下,在平衡电位 $E_{
 m eq}$ 文本框中输入 $E_{
 m eq}$ Fe。
- 4 在电极动力学栏下的动力 学表达式类型列表中,选 择阳极 Tafel 方程。
 - 在**交换电流密度** *i*₀ 文本 框中输入 i0 Fe。
 - 在**阳极 Tafel 斜率(A>0)** A_a 文本框中输入 A_a Fe。



电极反应3 (析氢反应)

- 1 在**模型开发器**窗口中,展开**组件 1 (comp1) > 三次电流分布, Nernst-Planck** (tcd),右键单击电极表面 2 并选择电极反应。
- 2 按 F2 键将电极反应 3 重命名为析氢反应。单击确定。

- **3** 在**电极反应**的**设置**窗口找 到**平衡电位**栏。在**平衡电** 位 *E*_{eq} 文本框中输入 Eeq H2。
- 4 在电极动力学栏下的动力 学表达式类型列表中,选 择阴极 Tafel 方程。



- 在**交换电流密度** *i*₀ 文本框中输入 i0 H2。
- 在**阴极 Tafel 斜率** (<0) A_c 文本框中输入 A H2。

混凝土的左侧边界与空气接触,因此,该边界处的浓度是恒定值。

浓度 1

- 1 在**模型开发器**窗口中,右键单击**三次电流分布, Nernst-Planck** (tcd), 然后 选择**电解质** > **浓度**。
- 2 仅选择边界 1。
- 3 在浓度的设置窗口中,找到浓度栏。
- 4 选中**物质**复选框
- 5 在 c_{0.c} 文本框键入 C_02_ref。

网格1

使用通过超细化网格大小设置的物理场控制的网格。

- 1 在模型开发器窗口单击网格 1 ▲。
- 2 在**网格的设置**窗口的**单元大小**列表,选择**超细化**。

研究 1

现在,问题已准备好求解。使用**辅助扫描**来求解一定孔隙饱和度范围内的结果。

设置稳态研究步骤并计算

1 在模型开发器窗口中的研究 1 下,单击步骤 1: 稳态 🔀 。

▼ 研究扩展

扫描类型:

☑ 辅助扫描

** 参数名称 指定组合

PS (Pore sa ▼ range(0.2,0.05,0.8)

参数值列表

参数单位

- 2 在**稳态**的**设置**窗口中,单击 以展开**研究扩展**栏,选中**辅 助扫描**复选框。
- 3 单击**添加**按钮 十,选择 PS (Pore saturation)作为**助** 参数。
- 4 在**参数值列表**中输入 range(0.2, 0.05, 0.8) 。 这将在 0.2 到 0.8 的范围内,使用步长 0.05 计算孔隙饱和度值。
- 5 在**主屏幕**工具栏单击**计算** = (或单击**研究** 1, 然后按 F8)。

结果

现在模型已求解,并自动添加默认绘图。请遵循以下步骤来重现结果和讨论章节的绘图。

- 一维绘图组6 (钢筋电位)
- 1 在主屏幕工具栏单击添加绘图组 📭 ,选择一维绘图组 🔷 。
- 2 在一维绘图组 6 工具栏单击点图 ≥。



- 3 在模型开发器窗口单击点图 1 ∼。
- 4 仅选择点 3、4和5。这些点在钢筋的边上。
- 5 在**点图的设置**窗口,单击 y **轴数据**栏右上角的**替换表达式 □ · · ·** 。从菜单中 选择**模型 > 组件 1 > 三次电流分布,N**ernst-Planck > tcd.Evsref **电极电位** vs. 相邻参考。
- 6 单击以展开**图例**栏。选中**显示图例**复选框。

7 在**图例**列表选择**手动**。在表中的每行分别输入如图所示的:前、中、后。



- **8** 在**模型开发器**窗口中,单击**一维绘图组 6** ∼ 节点。按 F2 键,将节点重命名为:**钢筋电位**。
- 9 单击绘制按钮 ፴ 。绘图应与图 9 一致。

接下来,再添加四个一维绘图组。除表达式不同以外,其他设置均相同。因此,可以复制已创建的一维绘图组节点,减少所需步骤数。

一维绘图组7 (氧气浓度)

- 1 右键单击**钢筋电位** \sim (第三个绘图组节点),选择**生成副本** \square 。
- $\mathbf{2}$ 单击**钢筋电位** $\mathbf{1}$ \sim , 并按 $\mathbf{F2}$ 键。
- **3** 在**重命名一维绘图组**对话框的**新名称**文本框中,输入:**氧气浓度。** 单击**确定。**
- 4 在模型开发器窗口中,展开结果>氧气浓度节点,单击点图 1 ≥。
- 5 在点图的设置窗口,单击替换表达式 Arr Arr (在 y- 轴数据栏的右上角),选择 模型 > 组件 1 > 三次电流分布,Nernst-Planck > c- 浓度。
- 6 单击绘制按钮 ፴。绘图应与图 10 一致。

一维绘图组8(氧还原电流密度)

- 1 在模型开发器窗口中右键单击**氧气浓度** ~,并选择**生成副本** 🔄 。
- $\mathbf{2}$ 单击**氧气浓度** $\mathbf{1} \sim$ 并按 F2 键。
- **3** 在**重命名一维绘图组**对话框的**新标签**文本框中,输入:**氧还原电流密度**,并单击**确定**。

4 在模型开发器窗口,展开结果 > 氧还原电流密度节点,单击点图 1 ℃。



- 5 在设置窗口的 y- 轴数据栏单击替换表达式 ▶ √,然后选择模型 > 组件 1> 三次电流分布,Nernst-Planck > 电极动力学 > tcd.iloc er1 局部电流密度。
- 6 单击绘制按钮 ፴ ,更新图形窗口中的绘图。绘图应与图 11 一致。
- 一维绘图组9 (铁氧化由流密度)
- 1 在模型开发树中,右键单击**氧还原电流密度** \sim 并选择**生成副本** \blacksquare 。
- $\mathbf{2}$ 单击**氧还原电流密度** $\mathbf{1} \sim$ 并按 F2 键。
- 3 在重命名一维绘图组对话框的新名称文本框中,输入铁氧化电流密度。单击确定。
- 4 在模型开发器窗口中,展开结果 > 铁氧化电流密度节点,单击点图 1 ~ 。
- 5 在设置窗口的 y- 轴数据栏单击替换表达式 ▶ √,然后选择模型 > 组件 1> 三次电流分布,Nernst-Planck > 电极动力学 > tcd.iloc_er2 局部电流密度。



6 单击绘制按钮 ፴,更新图形窗口的绘图。绘图应与图 13 一致。

一维绘图组 10 (析氢反应电流密度)

- 1 在模型开发器窗口右键单击铁氧化电流密度 \sim ,选择生成副本 \Box 。
- $\mathbf{2}$ 单击**铁氧化电流** $\mathbf{1} \sim \text{ 并按 F2 键}$ 。
- **3** 在**重命名一维绘图组**对话框的**新标签**文本框中,输入:**析氢反应电流密度。** 单击**确定**。
- 4 在模型开发器窗口中,展开结果>析氢反应电流密度节点,单击点图 1 ℃。
- 5 在设置窗口的 y- 轴数据栏单击替换表达式 Arr , 然后从菜单中选择模型 > 组件 1 > 三次电流分布 > 电极动力学 > tcd.iloc er3 局部电流密度。
- 6 单击绘制按钮 ፴,更新图形窗口的绘图。绘图应与图 12 一致。

结果下的最终绘图组应与下图一致。

- ▲ ፴ 结果
 - ▶数据集
 - √ 视图
 - 8:85 派生值
 - 表格
 - ▶ 电解质电位 (tcd)
 - ▷ 电解质电流密度 (tcd)
 - ▶ 电极电位 vs. 接地 (tcd)
 - ▶ 电极电位 vs. 相邻参考 (tcd)
 - ▶ 浓度 (tcd)
 - ▶ ~ 钢筋电位
 - ▶ ~ 氧气浓度
 - ▷ ~ 氧气还原电流密度
 - ▷ ~ 铁氧化电流密度
 - ▷ ~ 氢析出电流密度