基于元胞自动机的铝合金多坑腐蚀 及疲劳寿命研究



华磊1,刘雪峰1,常冬梅2

1.中国民航大学, 天津 300300

2. 天津职业技术师范大学 天津市高速切削与精密加工重点实验室, 天津 300222

摘 要:将阴阳极反应分离的元胞自动机法引入到铝合金多坑腐蚀过程的模拟当中。通过腐蚀模拟得到了较为符合实际 特征的铝合金材料多坑腐蚀形貌图。通过计算不同腐蚀步数下的蚀坑形貌参数,发现蚀坑深度近似于随腐蚀时间线性 增加,同时腐蚀失重也随时间增加,但是增加的速度逐渐增加。将腐蚀形貌导入ANSYS软件中进行力学分析,给出了铝 合金材料腐蚀后的应力分布,并且由此计算了腐蚀后的剩余疲劳寿命。发现随着腐蚀时间的增加,剩余疲劳寿命大体上 呈逐渐减少的趋势。但是,由于蚀坑底端附近局部几何形貌造成应力集中的影响,这一趋势并不一定总是单调的。

关键词:铝合金;腐蚀;元胞自动机;疲劳

中图分类号:TG171 文献标识码:A

铝合金材料具有重量(质量)轻、比强度大等优点,因此 在航空航天领域得到广泛的应用。但是铝合金材料在服役 过程中容易发生腐蚀,从而影响材料的可靠性。因此,对铝 合金腐蚀问题的研究受到广泛的关注。过去对于铝合金腐 蚀问题的研究以试验方法为主,但是试验方法往往费时费 力,成本较高,因此近些年在腐蚀数值模拟方面的研究越来 越多。多数腐蚀数值模拟方法是针对一系列有关材料和环 境参数方程的求解,因此为确定性方法^{III}。确定性方法可 以较准确地模拟出材料的宏观腐蚀进程,但是,确定性方法 没有考虑到材料和环境在介观或微观尺度上的不均匀性, 因此不适合模拟由此造成的材料较小尺度上的不规则腐 蚀。而这种较小尺度的不规则腐蚀往往对材料的疲劳、断 裂等力学性质有较大的影响。因此,在研究铝合金的不规 则腐蚀以及其造成的应力集中等力学问题时,有必要引入 非确定性腐蚀模拟方法。

元胞自动机方法是一种典型的非确定性算法,最早被 用来模拟生物的生长问题,之后被应用于植被生长过程^[2]、

DOI: 10.19452/j.issn1007-5453.2021.09.009

交通流[3]和火灾蔓延过程[4]等很多方面的模拟。近年来,该 方法作为一种有效的非确定性方法被引入到金属材料的腐 蚀模拟中,取得了较好的效果。2004年, Vautrin等^[5]在元胞 自动机模型中允许阴极和阳极反应在不同位置同时发生反 应,很好地模拟了真实的电化学腐蚀过程,并且由此验证了 蚀坑内的氢离子浓度指数(pH)不均衡现象。Aarao等⁶⁰在 2006年对这一模型的相关参数进行了分析。之后出现了一 系列基于这一模型的研究^[7-9]。2016年, Pérez-Brokate 等^[10] 将该模型引入到三维情况下,得到了更符合实际的模拟结 果。2013年, Wang^[11]和Han^[12]将有限元与元胞自动机腐蚀 模型结合,研究了应力作用下的腐蚀模拟问题。随后将研 究引申到了双蚀坑的问题上。但是,到目前为止,基于元胞 自动机模拟得到的腐蚀形貌对材料力学性质的研究仍然很 少见到,而在这方面的研究有利于分析介观到宏观尺度腐 蚀对材料力学性质的影响。因此,本文将基于阴阳极分离 的元胞自动机腐蚀模型模拟铝合金多坑腐蚀形貌,并且在 此基础上研究铝合金疲劳寿命随腐蚀进程的变化。

基金项目: 航空科学基金(201902067004);中央高校基本科研业务费项目(3122018C008)

收稿日期: 2021-04-28; 退修日期: 2021-06-10; 录用日期: 2021-07-15

引用格式: Hua Lei, Liu Xuefeng, Chang Dongmei. Study on multi-pits corrosion of aluminum alloy and its fatigue life based on cellular automata[J].Aeronautical Science & Technology, 2021, 32(09):63-67. 华磊, 刘雪峰, 常冬梅. 基于元胞自动机的铝合金多坑腐蚀及 疲劳寿命研究[J]. 航空科学技术, 2021, 32(09):63-67.

(2)

1 基于元胞自动机的多坑腐蚀形貌

1.1 元胞自动机模型

本文采用的元胞自动机模型类似于参考文献[13],将 其简化为二维情况。假设铝合金材料处于无氧的溶液环境 中,表面覆盖防腐涂层。随着时间的推移,防腐涂层随机的 在表面某些点失效,造成这些点下面的金属开始发生点蚀。 当阴极和阳极反应发生在不同位置时(SSE反应),对于阳 极反应,当附近为酸性或中性时的反应为:

$$Al^{3+} + H_2O \rightarrow AlOH_{aq} + H^+$$
(1)

 $Al^{3+} + OH^- \rightarrow AlOH_{solid} + e^-$

对于阴极反应,当附近为酸性或中性时的反应为:

$$\mathrm{H}^{+} + \mathrm{e}^{-} \rightarrow \frac{1}{2} \mathrm{H}_{2} \tag{3}$$

当附近为碱性时的反应为:

当附近为碱性时的反应为:

$$\mathrm{H}_{2}\mathrm{O} + \mathrm{e}^{-} \rightarrow \frac{1}{2}\mathrm{H}_{2} + \mathrm{OH}^{-} \tag{4}$$

当阴极和阳极反应恰好发生在同一位置(SJ反应),则 根据附近的酸碱性条件,为反应(1)、反应(3)或反应(2)、反应 (4)的结合。另外,当附近为酸性或中性时,再钝化产物可 能发生水解:

 $AlOH_{solid} \rightarrow AlOH_{aq}$ (5)

基于以上的电化学反应过程建立元胞自动机腐蚀模型。 本文考虑二维问题,将铝合金板的长方形横截面划分为L×M 个元胞。在本模型中,设置7种元胞类型:M、R、P、E、A、B、 C。其中M代表铝合金,R代表与溶液接触的铝合金,P代表 再钝化产物(Al(OH)₃),E代表水,A代表酸性元胞(H⁺),B代 表碱性元胞(OH⁻)。一个元胞的邻居元胞中A、B元胞的个数 可以用来表示该元胞的酸碱度。当A元胞个数多于B元胞的 个数时,该元胞为酸性,反之为碱性,而两种元胞个数相等时 为中性。C为防腐涂层元胞,在模型的第1层。由此定义,阳 极反应(1)、反应(2)可以分别表示为:

$$R \rightarrow A$$
 (6)

$$\mathbf{R} + \mathbf{B}_n \to \mathbf{P} + \mathbf{E}_n \tag{7}$$

式中:下角标n代表随机选取邻居元胞中的一个。而阴极 反应(3)、反应(4)可以分别表示为:

$$S + A_n \to S + E_n \tag{8}$$

$$S + E_n \rightarrow S + B_n$$
(9)

当反应(6)和反应(8)发生在同一位置时,可表示为:
R $\rightarrow E$
(10)

而当反应(7)和反应(9)发生在同一位置时,可表示为:
(10)

 $\mathbf{R} \to \mathbf{P} \tag{11}$

再钝化产物的水解(5)可表示为:

 $P \rightarrow E$

(12)

在酸性碱性元胞的扩散方面,假设A、B元胞在每个反 应步中会发生*N_{diff}*次布朗运动,当其运动到E元胞的位置, 则与之交换位置,而当A元胞运动到B元胞的位置或相反 时,A、B元胞中和,两个元胞均变为E元胞。每个反应步 中,每个C元胞都有一定概率发生失效,该元胞和其下面的 相邻M元胞变为E元胞。

以上反应的概率见表1。其中,N_{A-B}为邻居中A、B元胞 个数差,N_E为邻居元胞中液态元胞(A、B、E)的个数。在每 一步腐蚀模拟过程中,每次随机选取一对可以发生反应的 R元胞和S元胞,按照式(6)~式(9)发生反应,反复选取,直到 没有可供反应的元胞为止。然后进行N_{diff}步A、B元胞的扩 散模拟,每次随机选取一个A或B元胞进行扩散,直到所有 A、B元胞选取结束算作一个扩散步。N_{diff}步扩散步结束后, 算作一步腐蚀模拟结束,进行下一步腐蚀模拟,直到结束所 有模拟步。

表 1 反应概率 Table 1 Probabilities of reactions

反应	酸性	中性	碱性
SSE	$P_{\rm SSE}$	$P_{\rm SSE}$	$P_{\rm SSE}$
$R \rightarrow E$	$P_{\rm RE}{\cdot}N_{\rm A-B}$	0	0
$P \rightarrow E$	$P_{\rm PE}{\cdot}N_{\rm A-B}$	$P'_{PE} \cdot N_E$	0
$R \rightarrow P$	0	$\boldsymbol{P}_{\mathrm{RP}}{\cdot}\boldsymbol{N}_{\mathrm{E}}$	1
涂层失效	PB	PB	P _B

1.2 模拟结果

本文采用摩尔邻居, 元胞个数为1024×128个, 设P_B为 1/100000, P_{SSE}为0.2, P_{RE}为0, P_{PE}为1/8, P'_{PE}为1/800, 即为P_{PE} 的1/100。因此, 在中性条件下, 再钝化产物的水解概率为酸 性条件下的1/100。每个反应步中的扩散步数N_{dff}为200。在 MATLAB中编写程序, 由此得到500、1000和1500反应步后 的腐蚀形貌如图1(a)~图1(c)所示, 腐蚀形貌与实际腐蚀形貌 特征相符。由图可以明显地看到, 随着计算步数的增加, 蚀 坑逐渐增大, 而且有新的蚀坑逐渐产生。蚀坑边界具有明显 的不规则性, 接近于真实的蚀坑, 这与确定性方法得到的结 果是不同的。在第500步时, 横坐标0~100区域内有三个小 蚀坑。由图1(b)可见, 到第1000步时, 这三个小蚀坑已经合 并成为一个大蚀坑, 而且相比于其他蚀坑, 这个合并的大蚀 坑更不规则。在试验中经常会看到类似的蚀坑合并现象。

针对模型的随机性,每个步数进行5次计算取平均值, 得到平均腐蚀失重率随着步数的变化曲线如图2所示。其







中,腐蚀失重为A、B、E元胞个数除以总元胞个数。腐蚀失 重随时间逐渐增加,而且随着时间的增加,腐蚀失重增加的 速度有所增加。

除了材料的腐蚀失重率以外,蚀坑的深度也是受关注 的焦点。尤其是所有蚀坑中的最大深度,对材料的损伤情 况有较大的影响。本文中,将R和P元胞作为蚀坑表面,由 此将蚀坑表面的最低点与上表面的距离(元胞个数)作为最 大蚀坑深度。与前面相同,计算不同腐蚀步数情况下5次 模拟的最大蚀坑平均深度如图3所示。可以看到,最大蚀 坑平均深度近似随着腐蚀步数线性增加。

2 疲劳寿命分析

在本文中,利用有限元软件ANSYS进行铝合金腐蚀



后的疲劳寿命分析。首先需要将腐蚀形貌图导入到 ANSYS中。而ANSYS无法自动识别腐蚀形貌,需要用其 他软件将蚀坑边界信息提取出来再导入到ANSYS中建立 模型。

首先,识别蚀坑的边界。如图1可以看到,蚀坑的边界 实际上是由点描绘的图形。这里采用软件R2V提取材料的 边界,然后将结果导入AutoCAD,以图1(b)中的1000步的 腐蚀形貌图为例,得到边界图如图4所示。



在AutoCAD中调整边界尺寸,假设每个元胞的边长为 2μm,则整个模型的尺寸为2048μm×256μm。将图形保存后 导入ANSYS进行受力分析。选取的铝合金材料杨氏模量 为7.17×10⁴MPa,泊松比0.3,左侧固定,右侧施加10N/μm的 拉应力,进行计算得到x方向的应力云图如图5所示。可以 看到,在蚀坑底端附近出现了明显的应力集中现象,通常在 较大的蚀坑底端的应力集中更明显。

应力集中会大大影响材料的疲劳寿命。以计算得到的 应力为基础,可以进一步计算铝合金材料腐蚀后的剩余疲 劳寿命。基于ANSYS疲劳分析模块,以模型的最大 Mises 应力作为疲劳分析的最大应力,以0作为最小应力计算疲 劳寿命,*S*—N曲线数值表见表2。其中参数由试验数据进 行拟合得到,由于本文中主要针对疲劳寿命的趋势问题进 行定性研究,因此具体的参数选择仅取为典型值即可。

在本例中,由此得到其对应的疲劳寿命为2.43×10⁵次。



图5 x方向Mises应力云图 Fig.5 Mises stress nephogram in the *x* direction

表2 铝合金的 S-N曲线数值表

Table 2S-N curve of aluminum alloy

循环次数/次	交变应力/MPa	循环次数/次	交变应力/MPa
100	250	100000	130
200	240	150000	100
500	230	200000	90
1000	220	250000	80
1500	210	300000	60
2000	200	350000	50
10000	195	400000	30
15000	190	450000	25
30000	170	480000	18
60000	150	500000	12

按照以上步骤,重新进行一次腐蚀进程模拟,分别将步数为500、600、800、1000、1200、1400、1500时的腐蚀形貌导入ANSYS中,得到材料疲劳寿命随腐蚀步数的变化曲线如图6所示。随着腐蚀步数的增加,疲劳寿命大体上是逐渐



减少的。但是,这一趋势并不是线性的,甚至当腐蚀步数为 600步时的疲劳寿命还高于500步时。这是因为在这种条 件下的疲劳寿命变化主要与应力集中有关,而应力集中除 取决于蚀坑深度外,也与局部的腐蚀形貌有很大关系。在 有些时候尽管蚀坑深度已经较大,但是蚀坑底端的表面形 貌比较光滑,因此局部应力反而有所减小。例如,在本例 中,腐蚀步数为500和600步时,最大应力分别为32.14MPa 和30.03MPa,由于在500步时应力集中造成的最大应力更 大,因此在500步时计算得到的疲劳寿命反而更少。但是 由于蚀坑深度是单调增加的,因此疲劳寿命的整体趋势随 腐蚀步数的增加而逐渐减少。

3 结论

本文基于元胞自动机法模拟了铝合金材料的多坑电化 学腐蚀过程,在算法中允许阴阳极反应发生在不同位置。 通过模拟,成功得到了较符合实际特征的腐蚀形貌图。在 此基础上,将腐蚀形貌进行处理后导入ANSYS软件中进行 力学分析,得到了铝合金材料腐蚀后的应力分布,并由此分 析了铝合金材料腐蚀后的疲劳寿命,得到了以下结论:

(1)运用阴阳极反应分离的元胞自动机算法可以成功 模拟铝合金的腐蚀进程,并且可以观测到实际应用中常见 到的蚀坑合并现象。

(2) 在本算法模拟的条件下, 铝合金的腐蚀失重随时 间逐渐增加, 而且增速逐渐加大, 蚀坑的最大深度接近于随 时间线性增加。

(3) 铝合金腐蚀后的剩余疲劳寿命大体上随腐蚀时间 减少,但是并不完全单调递减。这是因为疲劳寿命与应力 集中现象有关,而应力集中除取决于蚀坑深度以外,也受到 蚀坑底部局部几何形貌的影响,而这随着腐蚀过程而剧烈 变化。

参考文献

- Walton J C, Cragnolino G, Kalandros S K. A numerical model of crevice corrosion for passive and active metals[J]. Corrosion Science, 1996, 38(1): 1-18.
- [2] Dunn A G, Majer J D. Simulating weed propagation via hierarchical, patch-based cellular automata[C]//Computational Science-ICCS 2007: 7th International Conference Proceedings, 2007: 762-769.
- [3] 彭麟,谭惠丽,孔令江,等.开放性边界条件下双车道元胞自动机交通流模型耦合效应研究[J].物理学报,2003,52(12): 3007-3013.

Peng Lin, Tan Huili, Kong Lingjiang, et al. A study of coupling effect in cellular automata model of traffic flow for two-lane with open boundary conditions[J]. Acta Physica Sinica, 2003, 52(12): 3007-3013.(in Chinese)

[4] Encinas A H, Encinas L H, White S H, et al. Simulation of

forest fire fronts using cellular automata[J]. Advances in Engineering Software, 2007, 38: 372-378.

- [5] Vautrin-Ul C, Chausse A, Stafiej J, et al. Simulations of corrosion processes with spontaneous separation of cathodic and anodic reaction zones[J]. Polish Journal of Chemical Technology, 2004, 78(9): 1795-1810.
- [6] Aarao F D A, Stafiej J, Badiali J P. Scaling theory in a model of corrosion and passivation[J]. The Journal of Physical Chemistry B, 2006, 110(35): 17554-17562.
- [7] Vautrin-Ul C, Taleb A, Stafiej J, et al. Mesoscopic modelling of corrosion phenomena: coupling between electro chemical and mechanical processes, analysis of the deviation from the Faraday law[J]. Electrochimica Acta, 2007, 52 (17): 5368-5376.
- [8] Di Caprio D, Stafiej J. Cellular automata approach to corrosion and passivity phenomena[J]. Pure and Applied Chemistry, 2010, 85(1): 62-67.

- [9] Bartosik Ł, Di Caprio D, Stafiej J. Cellular automata approach to corrosion and passivity phenomena[J]. Pure and Applied Chemistry, 2013, 85(1): 247-256.
- [10] Pérez-Brokate C F, Di Caprio D, Féron D. Three dimensional discrete stochastic model of occluded corrosion cell[J]. Corrosion Science, 2016, 111: 230-241.
- [11] Wang H, Han E. Simulation of metastable corrosion pit development under mechanical stress[J]. Corrosion Science, 2013, 90: 128-134.
- [12] Wang H, Han E. Computational simulation of corrosion pit interactions under mechanochemical effects using a cellular automaton/finite element model[J]. Corrosion Science, 2016, 103: 305-311.
- [13] Liu X F, Hua L, Chang D M. Simulation of pit interactions of multi-pit corrosion under an anticorrosive coating with a threedimensional cellular automata model[J]. Modelling and Simula tion in Materials Science and Engineering, 2021,29(6):065018.

Study on Multi-Pits Corrosion of Aluminum Alloy and Its Fatigue Life Based on Cellular Automata

Hua Lei¹, Liu Xuefeng¹, Chang Dongmei²

1. Civil Aviation University of China, Tianjin 300300, China

2. Tianjin Key Laboratory of High Speed Cutting and Precision Machining, Tianjin University of Technology and Education, Tianjin 300222, China

Abstract: In this paper, the cellular automata method of reaction separation between anode and cathode is introduced into the simulation of multi-pit corrosion process of aluminum alloy. Through corrosion simulation, the multi-pit corrosion morphology of aluminum alloy was obtained. It is found that the pit depth increases linearly with the corrosion time approximately, and the corrosion weight loss also increases with the corrosion time, but the increasing speed increases with time gradually. The corrosion morphology is imported into ANSYS software for mechanical analysis, the stress distribution of aluminum alloy after corrosion is obtained, and the residual fatigue life after corrosion is calculated. It is found that the residual fatigue life decreases with corrosion time. However, this trend is not always monotonous due to the effect of local geometry near the bottom of the pit on the stress concentration.

Key Words: aluminum alloys; corrosion; cellular automata; fatigue

Received: 2021-04-28; Revised: 2021-06-10; Accepted: 2021-07-15 Foundation item: Aeronautical Science Foundation of China(201902067004); Fundamental Research Founds For the Central Universities (3122018C008)