

COMSOL Multiphysics Ver.5.2 専門モジュールイントロダクション

腐食解析モジュール

モデルの電気化学の腐食過程と陰極保護設計のため
に

計測エンジニアリングシステム株式会社
東京都千代田区内神田 1-9-5 井門内神田ビル
2015.11.24

1. 腐食解析モジュールの概要

出典：<https://www.comsol.jp/corrosion-module>

電食は、至る所で起こります。

腐食対策には、世界で毎年1兆ドル以上の費用が費やされています。ほとんどの腐食は水面下、湿った、もしくは、湿気のある環境で引き起こされる電気化学反応の過程によって生じます。腐食モジュールは、技術者と科学者が、構造物を保護するために腐食の過程を調査し、腐食が構造物の耐用年数の間引き起こす状況における理解を深めることも可能です。そして、電食を抑制させて再発防止策を実用化させることも可能にします。本モジュールは根本的なメカニズムを調査するために微量における腐食をシミュレーションすることも、大規模で長い間構造を腐食から保護する方法を見出すために、より大きな範囲で腐食をシミュレーションすることも可能にします。

腐食への理解が鍵

腐食モジュールは、特徴、インタフェース、全ての電食の過程のシミュレーションへの簡単なアプローチを可能にするためのモデル例、例えば、動電気や、穴ができるように、およびすき間腐食等を含んでいます。腐食物や腐食された材料の透過は、腐食表面の変化の動的モデリングと、そのような表面に接触した電解質から説明できます。腐食モジュールには、ターフェル、バトラー-ホルマー、または他のユーザによって定義された方程式で電気化学反応動力学について説明できる腐食過程の腐食電位と現在の配分をモデル化するための標準インタフェースを含んでいます。電気化学反応は、電解質、金属組織、均質の化学反応、および腐食のため金属面の形の変化などの腐食過程に特有の現象を電位で完全に解決できます。

腐食保護システムの最適化

腐食モジュールは効果的な腐食保護システムのデザインを可能にします。これは、陰極保護システム (ICCP)、犠牲陽極や陽極防食のシミュレーションが含まれます。陽極電流は不動態化を実施するために腐食の材料の上に残っています。

微量で予防可能な特殊メカニズムを調査するのに腐食モジュールを使用します。これにより、さらに大規模な構造をシミュレートする場合にこのパラメータを展開することも可能です。例えば、保護された構造物上に成長した水酸化物フィルムがそれに該当します。COMSOL Multiphysics で作成されたデザインを含む CAD ファイルをインポートすると、

保護過程の定義がセットアップされます。促進腐食に影響されやすい構造の領域を特定することに関して、電気防食用陽極のプレースメント、カソード防食、もしくはアノード防食電流が印加されたプレースメントを指定できます。

モジュールのもう一つのアプリケーションは、水面下の構造物もしくは埋設構造物の腐食におけるストレイ電流の効果を見積もることです。そして、また、この腐食メカニズムの進行を防ぐための保護電極の位置決めを、本モジュールを使用することで最適化が可能です。正しく設計されると、ストレイ電流源の近くに置かれた構造(例えば、鉄道)をむしろむしろ、これらの電極はストレイ電流の取り込みを調整することができます。

電食の拡張影響のモデル化

腐食が時間の経過とともに構造物にもたらす影響は全く壊滅的です。腐食が構造物から物質を取り除くとき、それは構造上の完全性に危険をもたらすかもしれません。

ある場合は、構造のどの部分が高い圧力と歪みを受けるかを確認するために腐食分析と組み合わせて構造分析を実施することもあるかもしれません。これらの部品での腐食は破壊的であるかもしれません。そのため、これらの部品が保護されることの確認が必要かもしれません。腐食の影響を理解するために、そして、腐食保護のための設計を最適化するために、構造力学モジュールと腐食モジュールを組み合わせることも可能です。これは、あるモジュール内で別のモジュールとの連成が可能という COMSOL Multiphysics が持つ広範囲かつ高性能さにより実現可能となります。

他の場合では、乱流や多相流は、化学種輸送との連成が必要かもしれません。その時には、CFD Module を使用することが出来ます。正確で膨大な大量輸送定義を含む腐食モジュール内に大量輸送インターフェースを組み合わせることで実装可能です。

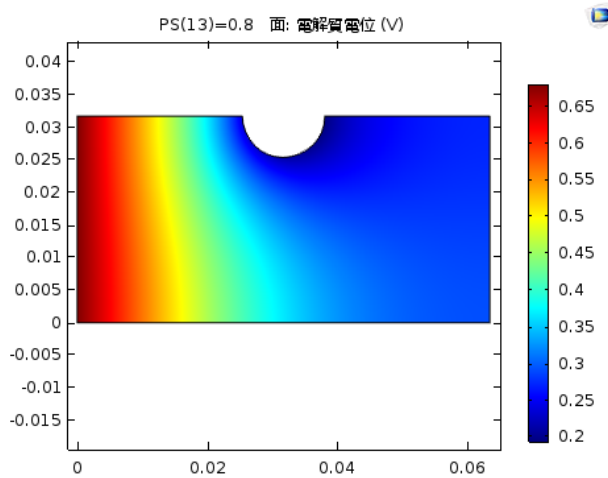
2. チュートリアル

コンクリート中のスチールの陰極防食

出典：INTRODUCTION TO Corrosion Module p.15 以降

スチール表面において3つの異なる電気化学反応の設定を行います。

荷電種および酸素輸送は電解質導電率および酸素拡散係数が含水率に依存しているコンクリートドメインでモデル化を行います。



手順

モデルウィザード

1. デスクトップの COMSOL アイコンをダブルクリックします。ソフトウェアが起動すると画面にモデルウィザードを使う (COMSOL モデルを新規作成) かブランクモデルを使う (手動で COMSOL モデルを新規作成) かを選択する画面が表示されます。ここではモデルウィザードを選択します。COMSOL がすでに起動している場合にはファイルメニューで新規を選択後にモデルウィザードを選択します。



2. 空間次元を選択ウィンドウで2Dをクリックします。

3. フィジックスを選択ツリーで電気化学を展開し2次電流密度分布をダブルクリックします。すると、追加フィジックス選択リストに表示されます。別の方法として、2次電流密度分布を選択し、追加ボタンを押す方法があります。

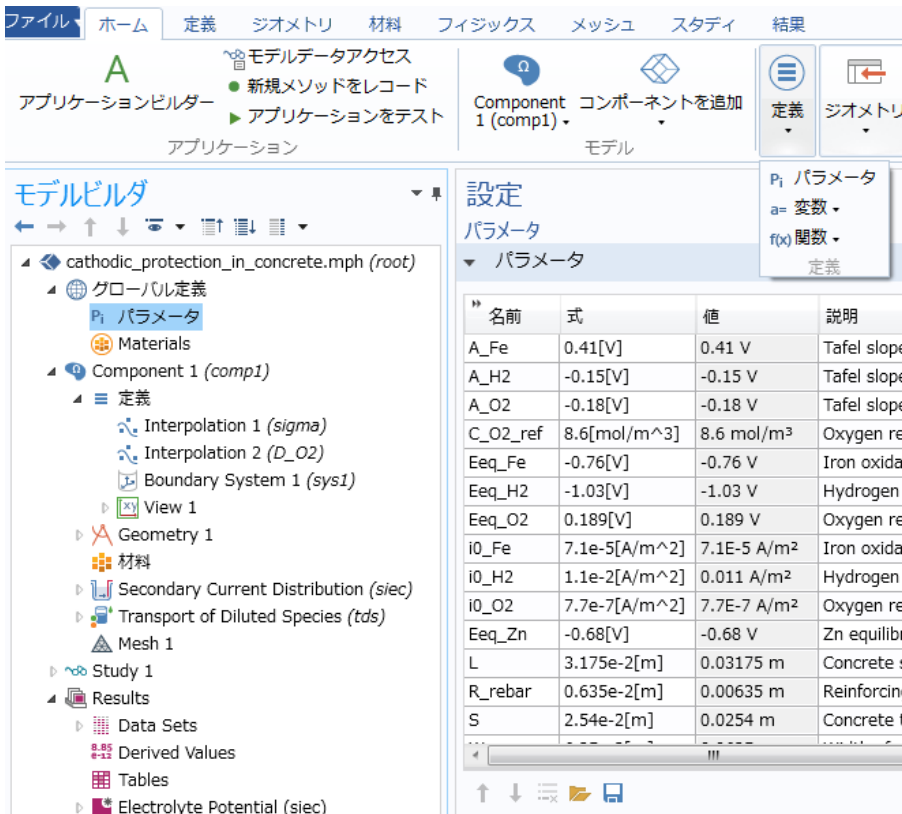
4. 化学種輸送を展開し希釈種輸送をダブルクリックします。すると、追加フィジックス選択リストに表示されます。
5. スタディをクリックします。
6. プリセットスタディの下の定常を選択します。
7. 完了をクリックします。

定義 - グローバルパラメータおよびローカル変数

1. ホームツールバー上で定義>パラメータボタンをクリック（モデルビルダー上であればグローバル定義を右クリックし、パラメータを選択）します。

Linux および Mac : デスクトップのトップに近いところにあるコントロールを使います。

2. 設定ウィンドウに行き、パラメータの下で「ファイルからロード」をクリックします。
3. アプリケーションライブラリフォルダに¥Corrosion_Module¥Cathodic_Protection をブラウズし、cathodic_protection_in_concrete_parameters.txt をダブルクリックします。パラメータが読み込まれます。



The screenshot shows the COMSOL Multiphysics interface with the 'Settings' window open. The 'Parameters' section is expanded, and a table of parameters is displayed. The table includes columns for Name, Formula, Value, and Description.

名前	式	値	説明
A_Fe	0.41[V]	0.41 V	Tafel slope
A_H2	-0.15[V]	-0.15 V	Tafel slope
A_O2	-0.18[V]	-0.18 V	Tafel slope
C_O2_ref	8.6[mol/m^3]	8.6 mol/m ³	Oxygen ref
Eeq_Fe	-0.76[V]	-0.76 V	Iron oxidati
Eeq_H2	-1.03[V]	-1.03 V	Hydrogen e
Eeq_O2	0.189[V]	0.189 V	Oxygen red
i0_Fe	7.1e-5[A/m^2]	7.1E-5 A/m ²	Iron oxidati
i0_H2	1.1e-2[A/m^2]	0.011 A/m ²	Hydrogen e
i0_O2	7.7e-7[A/m^2]	7.7E-7 A/m ²	Oxygen red
Eeq_Zn	-0.68[V]	-0.68 V	Zn equilibri
L	3.175e-2[m]	0.03175 m	Concrete se
R_rebar	0.635e-2[m]	0.00635 m	Reinforcing
S	2.54e-2[m]	0.0254 m	Concrete th

4. 定義を右 CLK し、その中にある関数を展開して補間ボタンをクリックします。
5. 設定ウィンドウでデータソースをファイルにします。参照ボタンをクリックし、アプリケーションライブラリフォルダに¥Corrosion_Module¥Cathodic_ Protection をブラウズし、cathodic_protection_in_concrete_sigma.txt を選択し、「開く」と「インポート」ボタンをします。
6. 関数名に sigma を入力します。
7. 単位のセクションで、関数に S/m を入力し、プロットをクリックします。
8. 定義ツールバー上で>補間ボタンをクリックします。
9. 設定ウィンドウでデータソースをファイルにします。参照ボタンをクリックし、アプリケーションライブラリフォルダに¥Corrosion_Module¥Cathodic_ Protection をブラウズし、cathodic_protection_in_concrete_D_O2.txt を選択し、「開く」と「インポート」ボタンをします。
10. 関数名に D_O2 を入力します。
11. 単位のセクションで、関数に m^2/s を入力し、プロットをクリックします。

ジオメトリ

1. ジオメトリ 1 ノードを右クリックし、矩形を選択します。
2. 幅に W、高さに L を入力します。
3. 「ここを作成」をクリックします。
4. ジオメトリ 1 ノードを右クリックし、円を選択します。以下に設定します。

設定

円

ここを作成 ▾ 全オブジェクトを作成

ラベル: 円 1

▼ オブジェクトタイプ

タイプ: 固体

▼ サイズおよび形状

半径: R_rebar m

セクタ角: 360 deg

▼ 位置

ベース: 中心

x: S+R_rebar m

y: L m

5. ジオメトリ 1 ノードを右クリックし、「プリアンおよび分割>差」を選択して、以下に設定します。

設定

差

ここを作成 ▾ 全オブジェクトを作成

▼ 差

追加オブジェクト:

OFF

アクティブ

r1

差オブジェクト:

ON

アクティブ

c1

入力オブジェクトを保持

内部境界を保持

6. 「全オブジェクトを作成」をクリックします。

2次電流密度分布

電解質

1. 2次電流密度分布を展開し電解質 1 ノードをクリックし、設定ウィンドウで電解質導電率 σ にユーザ定義をし、 $\sigma(\text{PS})$ を設定します。
2. フィジックスツールバーで境界をクリックし電解質>電解質電位を選択します。
3. 設定ウィンドウで境界 1 を選択し、境界電解質電位に $-E_{\text{eq_Zn}}$ を入力します。

電極表面

1. フィジックスツールバーで境界をクリックし2次電流密度分布>電極表面を選択します。
2. 設定ウィンドウで境界 6 と 7 を選択し、境界条件の外部電位に E_{app} を入力します。

電極反応 1

1. 電極表面 1 を展開し電極反応 1 ノードをクリックします。
2. F2 ボタンをクリックし、或いは電極反応 1 ノードを右クリックし、リネームを選択します。
3. 新規ラベルに **Oxygen reduction** を入力し、「OK」をします。
4. 設定ウィンドウの平衡電位のセクションで、平衡電位 E_{eq} に $E_{\text{eq_O2}}$ を入力します。
5. 電極速度論のセクションで、速度論式タイプに「カソードターフェル式」を選択します。交換電流密度 i_0 に $c/C_{\text{O2_ref}}*i_{0_O2}$ 、カソードターフェル勾配 A_c に A_{O2} を設定します。

電極反応 2

1. 電極表面 1 を右クリックし、電極反応を選択します。
2. F2 ボタンをクリックし、新規ラベルに **Iron oxidation** を入力し、「OK」をします。
4. 設定ウィンドウの平衡電位のセクションで、平衡電位 E_{eq} に $E_{\text{eq_Fe}}$ を入力します。
5. 電極速度論のセクションで、速度論式タイプに「アノードターフェル式」を選択します。交換電流密度 i_0 に i_{0_Fe} 、アノードターフェル勾配 A_a に A_{Fe} を設定します。

電極反応 3

1. 電極表面 1 を右クリックし、電極反応を選択します。
2. F2 ボタンをクリックし、新規ラベルに **Hydrogen evolution** を入力し、「OK」をします。

3. 設定ウィンドウの平衡電位のセクションで、平衡電位 E_{eq} に Eeq_H2 を入力します。
4. 電極速度論のセクションで、速度論式タイプに「カソードターフェル式」を選択します。交換電流密度 i_0 に i0_H2, カソードターフェル勾配 A_c に A_H2 を設定します。

初期値

1. 2次電流密度分布 > 初期値 1 をクリックし、設定ウィンドウで電解質の電位 $phil$ に $-E_{eq_Zn}$ を設定します。

希釈種輸送

希釈種輸送ノードをクリックし、輸送機構のセクションで対流のチェックを外します。

拡散

1. 希釈種輸送ノードを展開し輸送特性 1 をクリックします。
2. 設定ウィンドウの拡散のセクションで拡散係数 D_c に D_O2(PS) を入力します。

濃度

1. フィジックスツールバーで境界をクリックし濃度を選択します。
2. 設定ウィンドウで境界 1 を選択し、濃度のセクションで化学種 c にチェックを入れ、 $c_{0,c}$ に C_O2_ref を設定する。

電極電解質界面カップリング

1. フィジックスツールバーで境界をクリックし電極電解質界面カップリングを選択します。
2. 設定ウィンドウで境界 6 と 7 を選択します。
3. 電極電解質界面カップリング 1 を展開し、反応係数 1 をクリックします。
4. モデル入力 of the section with i_{loc} に局部電流密度 (siec/eebii1/er1) を選択する。化学量論係数のセクションで関与電子数 n_m に 4, 化学量論係数 v_c に -1 を設定する。

初期値

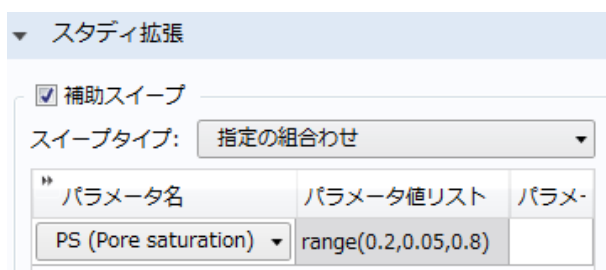
1. 希釈種輸送 > 初期値 1 をクリックし、設定ウィンドウで濃度 c に C_O2_ref を設定します。

メッシュ

1. メッシュ 1 をクリックします。
2. 設定ウィンドウで要素サイズを「さらに細かい」にします。

スタディ 1

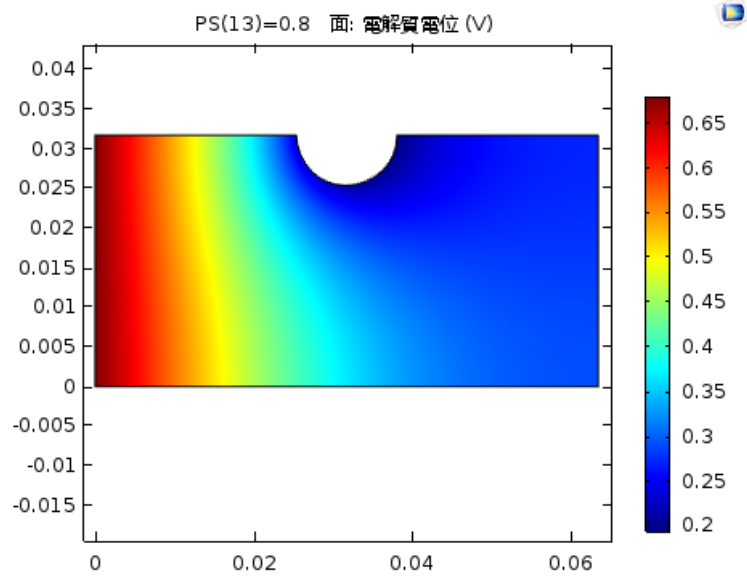
1. スタディ 1 を展開し、ステップ 1 : 定常をクリックします。
2. 設定ウィンドウでスタディ拡張のセクションを展開し、補助スイープにチェックを入れます。
3. 追加ボタン+をクリックし、PS (Pore saturation) を選択して以下に設定します。



4. ホームツールバーで計算ボタンをクリックする。

結果

- 1) 結果 : 電解質電位 (siec) をクリックします。



以上