Моделирование коррозии материалов в агрессивных средах на основе теории перколяции

И.А. Карачун, П.Д. Кравченя, С.В. Медников, М.А. Кузнецов, А.С. Мастеров

Волгоградский государственный технический университет

Аннотация: В статье рассматривается моделирование коррозии материалов в агрессивных средах на основе теории перколяции. С целью выполнения моделирования были разработаны алгоритм моделирования коррозии и программа на языке C++, реализующая этот алгоритм. В тексте работы описываются алгоритм моделирования коррозии, структура реализованной программы, результаты моделирования при различных параметрах. Результатами исследования являются созданные алгоритм моделирования и приложение, выполняющее моделирование процесса коррозии материалов в агрессивных средах на основе теории перколяции согласно разработанному алгоритму, а также строящее картину коррозии, графики зависимости длины границы области коррозии и площади оставшегося материала от шага моделирования.
Ключевые слова: теория перколяции, моделирование коррозии, моделирование физических процессов, метод Монте-Карло, визуализация результатов моделирования.

В настоящий момент актуальны теоретические и практические исследования различных аспектов коррозии материалов в агрессивных средах. Эти исследования сопровождаются созданием различных моделей коррозии, как описывающих явление наиболее полно с учётом различных химических, электрохимических или физико-химических воздействий с окружающей средой, так и рассматривающих конкретный, специфичный аспект разрушения материалов при определенных обстоятельствах.

Один из подходов, рассматривающий моделирование коррозии материалов, основывается на теории перколяции [1]. В физике и химии явлением перколяции называется процесс протекания или непротекания жидкостей через пористые материалы и другие подобные процессы [2-4]. Оно находит применение в описании разнообразных систем и явлений. Так, например, в работе [5] озонолиз поверхности технических резин рассматривается с точки зрения теории перколяции.

Стоит также отметить, что зачастую моделирование физических процессов [6, 7] должно быть, как можно более производительным и

© Электронный научный журнал «Инженерный вестник Дона», 2007–2020

эффективным, поскольку результаты научных исследований напрямую зависят от его длительности.

В данной работе рассматривается процесс моделирования коррозионного воздействия агрессивных сред на материалы на базе теории перколяции. Научная новизна работы заключается в создании алгоритма для моделирования коррозии образца полимера прямоугольной формы на основе теории перколяции, ориентированного на параллельную реализацию.

Разрушаемый коррозией образец моделируется пластиной прямоугольной формы, погруженной в агрессивную среду. На ней равноудаленно расположены окружности, моделирующие поведение центров дефектов исходной структуры поверхности, размер которых изменяется по определенному закону. В результате моделирования требуется получить картину коррозии, а также рассчитать зависимости длины области коррозии (длину границы материала, разрушенного коррозией) и площадь части пластины, не подвергнувшейся коррозии, от временного шага.

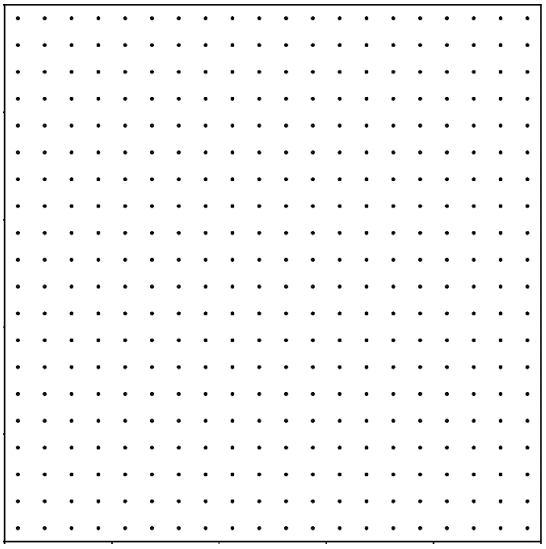


Рис. 1. – Структурная схема поверхности полимера

Модель описывается следующими параметрами: ширина пластины YLength; длина пластины XLength; число областей коррозии по осям X и Y (CountX и CountY); начальный радиус центров коррозии R_0. При

© Электронный научный журнал «Инженерный вестник Дона», 2007–2020

моделировании координаты центров областей коррозии вдоль каждой из осей рассчитываются следующим образом:

$$Ox_{ij} = (i + 0.5)\frac{LengthX}{CountX}, \quad Oy_{ij} = (j + 0.5)\frac{LengthY}{CountY} \tag{1}$$

На каждом шаге моделирования области коррозии увеличиваются. В данной работе предполагается, что за один шаг моделирования длина каждой области коррозии увеличивается на случайную, равномерно распределенную величину:

$$\xi \sim U(0, dL)$$

Здесь dL обозначает максимально возможное приращение длины одной области коррозии за один временной шаг. Поскольку области коррозии являются окружностями, изменение их длины за один шаг по времени можно выразить через изменение радиуса:

$$R_{ij}^{t+1} = R_{ij}^{t} \cdot (1 + \frac{dL}{2\pi R_{ij}^{t}})$$

В результате проделанной работы был разработан алгоритм моделирования коррозийного процесса, схема которого представлена на рис. 2. Рассмотрим каждый шаг данного алгоритма подробнее. На первом шаге алгоритма задаются параметры модели: длина и ширина пластины, количество центров коррозии и их первоначальный радиус, а также величина приращения, в соответствии с которым длины центров будут меняться в процессе моделирования. Кроме того, на пластине создаются области коррозии, центры которых вычисляются с использованием (1).

Для расчёта длины границы поврежденного коррозией материала используется следующий алгоритм. Для каждой окружности, моделирующей область коррозии, необходимо найти точки ее пересечения с другими окружностями и границами пластины. В соответствии с найденными

© Электронный научный журнал «Инженерный вестник Дона», 2007–2020

точками, текущая окружность разбивается на дуги. Дуги, ограниченные найденными точками, удаляются. Тогда суммарный периметр поврежденного материала получается путем суммирования длин всех оставшихся дуг. Данный алгоритм выполняется над каждым центром коррозии.

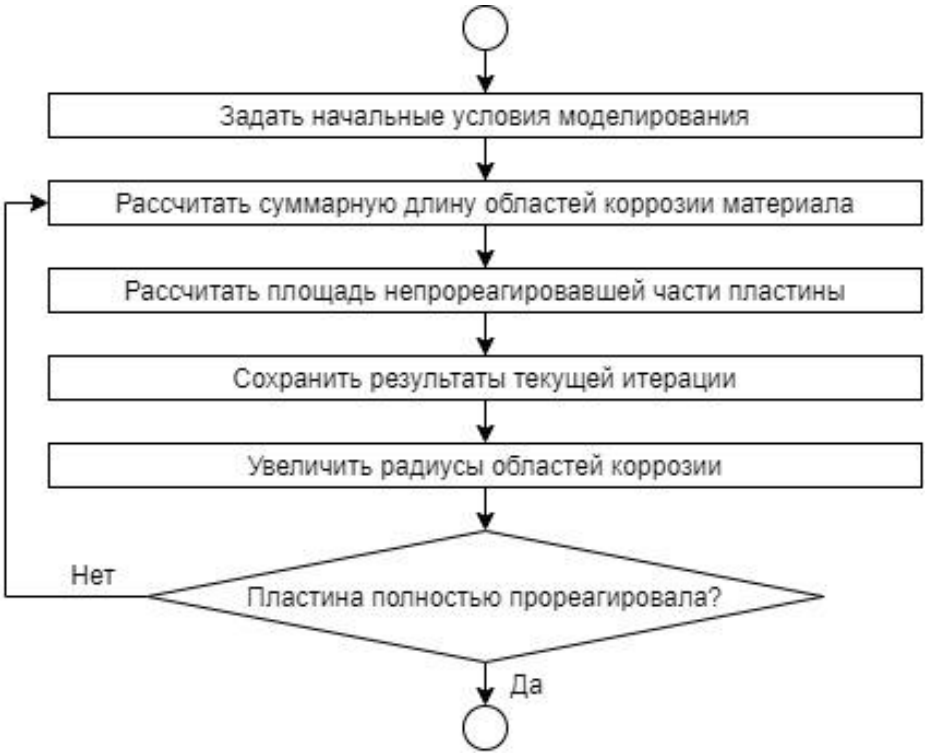


Рис. 2. – Схема алгоритма моделирования

Для расчета длины границы прореагировавшего материала следует учитывать факт взаимного пересечения окружностей вследствие увеличения их радиусов (рис. 3). При этом пластина может содержать как замкнутые фигуры, образованные в результате пересечения окружностей, так и круги, ещё не пересеченные с другими. На рис. 3 приведен пример найденных точек пересечения с другими окружностями для окружности с центром O_2, у которой будут удалены дуги AB, BC и CD.

Задача определения точек пересечения окружности с границами пластины сводится к решению уже известной задачи по нахождению точек пересечения окружности с прямой [7]. В этом случае, точки пересечения (ax,ay) и (bx,by) определяются выражениями (2) – (5).

© Электронный научный журнал «Инженерный вестник Дона», 2007–2020

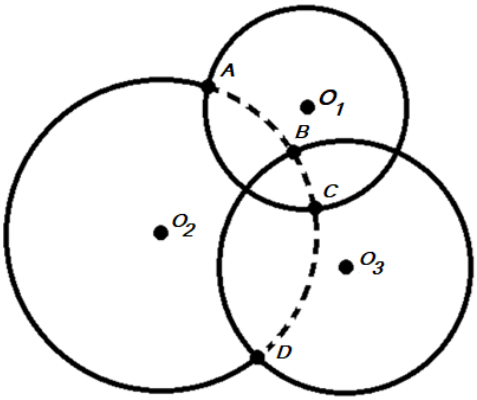


Рис.3. – Найденные дуги для окружности с центром O_2

$$d = \sqrt{R^2 - \frac{C^2}{A^2 + B^2}}, \quad m = \sqrt{\frac{d^2}{A^2 + B^2}}, \tag{2}$$

$$x_0 = -\frac{A \cdot C}{A^2 + B^2}, \quad y_0 = -\frac{B \cdot C}{A^2 + B^2}, \tag{3}$$

$$a_x = x_0 + B \cdot m, \; a_y = y_0 - A \cdot m, \tag{4}$$

$$b_x = x_0 - B \cdot m, \; b_y = y_0 + A \cdot m, \tag{5}$$

Здесь A. B, C – коэффициенты уравнения прямой; R – радиус окружности. Далее, с учетом найденных точек, необходимо разбить окружность на дуги. Дуга представляется в виде пары чисел, соответствующих углам между осью OX и радиусами, ограничивающими дугу. Каждая полученная точка трансформируется в радианную меру, описывающую её положение на окружности:

$$\varphi = \operatorname{acos} \frac{x_a - x_0}{\sqrt{(x_a - x_0)^2 + (y_a - y_0)^2}}, \tag{6}$$

где x_a, y_a – координаты найденной точки; x_0, y_0 –координаты центра окружности.

После нахождения точек пересечения с границами пластины,

© Электронный научный журнал «Инженерный вестник Дона», 2007–2020

необходимо найти все точки пересечения текущей окружности с остальными окружностями. Задача нахождения точек пересечения двух окружностей сводится к задаче нахождения точек пересечения окружности и прямой следующим образом. Предполагается, что центр первой окружности расположен в начале координат. В противном случае, он переносится в начало координат [8]. Тогда имеем систему уравнений:

$$\begin{cases} x_1^2 + y_1^2 = R_1^2 \\ (x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 = R_2^2 \end{cases} \quad (7)$$

Вычтем из второго уравнения первое, чтобы избавиться от квадратов переменных. Получим:

$$\begin{cases} x_1^2 + y_1^2 = R_1^2 \\ x_1(-2x_2) + y(-2y_2) + (x_2^2 + y_2^2 + R_1^2 - R_2^2) = 0 \end{cases} \quad (8)$$

Таким образом, задача о пересечении двух окружностей сводится к задаче о пересечении первой окружности с прямой с коэффициентами $A = -2x_2$, $B = -2y_2$, $C = x_2^2 + y_2^2 + R_1^2 - R_2^2$.

Для нахождения площади непораженного коррозией материала необходимо из площади пластины вычесть площадь, поврежденную коррозией. Однако задача нахождения площади поврежденного материала не настолько тривиальна. Основная сложность заключается в том, что центры коррозии могут пересекаться, и необходимо найти площадь фигуры, образованной в результате данного пересечения. Пример такой ситуации приведен на рис. 3. Участки окружностей, принадлежащие более чем одному центру коррозии, должны учитываться лишь один раз. Задача усложняется тем, что число пересекающихся окружностей никак не ограничено и может меняться в процессе моделирования. Также, большинство численных методов оперируют функциями, вид которых известен. Однако достаточно трудно описать функцией фигуру, полученную в результате пересечения нескольких окружностей.

© Электронный научный журнал «Инженерный вестник Дона», 2007–2020

В связи с вышеупомянутыми трудностями вычисления площади, необходим численный метод, которому не важен вид целевой функции. Выбор численного метода нахождения площади был сделан в пользу метода Монте-Карло [9]. Перед началом нахождения площади создаётся два генератора случайных чисел равномерного распределения. Один генератор случайных чисел производит числа в интервале [0, длина пластины], другой – [0, ширина пластины]. На каждом шаге генераторами случайных чисел получается точка на координатной плоскости, для которой проверяется принадлежность к какой-либо окружности. В результате применения метода находится отношение точек, попавших в какую-либо окружность, к числу всех сгенерированных точек, на основании которого находится площадь пораженной пластины.

На каждом шаге моделирования необходимо сохранять рассчитанные площадь и суммарную длину границы прореагировавшего материала. Для построения изображения прокорродировавшей части пластины на каждой итерации производится запись текущего состояния центров коррозии, а именно: их положение и размер, границы коррозии, представленные в виде дуг, образованных в результате пересечения с другими центрами коррозии или границами пластины. Моделирование коррозийного процесса продолжается до тех пор, пока площадь части пластины, не подвергнувшейся действию коррозии, отлична от нуля.

Для представления области коррозии была создана структура, хранящая: координаты центра, представленные двумя числами; радиус, а также дуги, представленные в виде структуры ключ-значение на базе контейнера Map. Сама пластина описывается структурой, которая содержит её параметры (длина, ширина, количество центров коррозии), а также упорядоченный набор областей коррозии, представленный в виде массива.

© Электронный научный журнал «Инженерный вестник Дона», 2007–2020

Программа моделирования процесса коррозии была реализована на языке C++. На рис. 4 представлена диаграмма классов разработанной системы моделирования процесса коррозии.

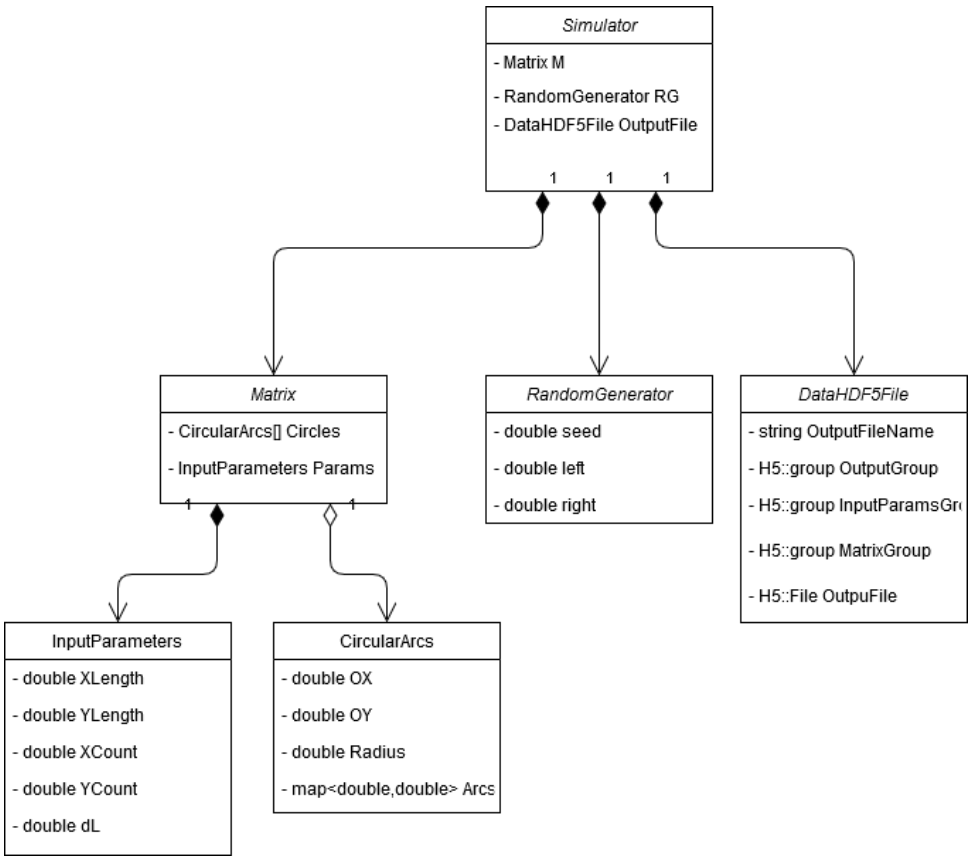


Рис. 4. – Диаграмма классов системы

Класс RandomGenerator реализует генератор случайных чисел в указанных границах по закону равномерного распределения [10].

Класс Matrix описывает пластину с равномерно распределенными центрами коррозии. Экземпляр класса создаётся с учетом заданных пользователем входных параметров, представленных классом InputParameters, который считывает из входного файла, обрабатывает и хранит входные параметры моделирования, заданные пользователем.

Класс DataHDF5File отвечает за запись полученных результатов в файл. На каждой итерации, объект класса DataHDF5File записывает в файл текущее состояние областей коррозии, их положение и размер.

© Электронный научный журнал «Инженерный вестник Дона», 2007–2020

Класс CircularArcs представляет окружность заданного радиуса с определенным центром. Экземпляр данного класса описывает один центр коррозии. Класс Simulator отвечает за непосредственное выполнение алгоритма моделирования коррозии пластины.

В качестве базовой конфигурации параметров моделирования были выбраны значения, приведенные в таблице №1.

Таблица №1

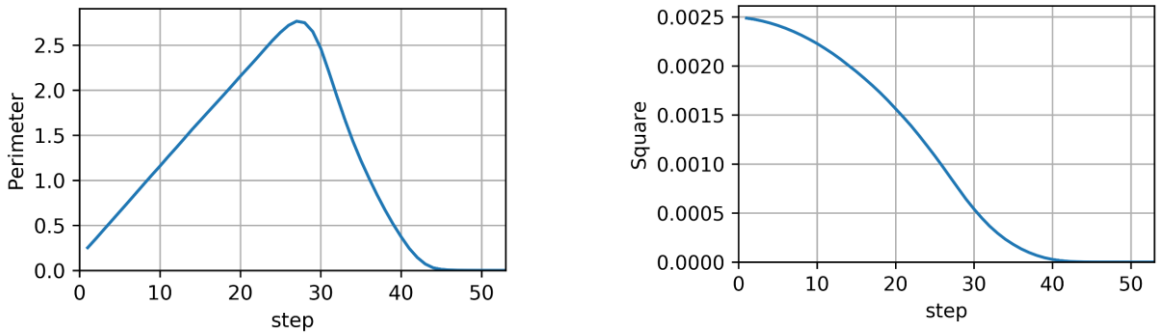
Параметры моделирования

Наименование параметра	Значение	Описание
SizeX	20 шт	Количество центров коррозии по оси X
SizeY	20 шт	Количество центров коррозии по оси Y
XLength	0.05 м	Размер корродирующей пластины по оси X
YLength	0.05 м	Размер корродирующей пластины по оси Y
InitRadius	1E-4 м	Изначальный радиус центров коррозии
dL	5E-4 м	Константное значение прироста длины участка коррозии за один шаг

Реализованная программа запускалась на узле вычислительного кластера ВолгГТУ, оборудованном процессором Intel(R) Xeon Phi(TM) 7210 с тактовой частотой 1.30GHz, имеющим 64 физических ядра и 256 потоков с технологией HyperThreading. На рис. 5 (а) и (б) приведены графики зависимости длины границы области коррозии и площади оставшегося материала от шага моделирования. На рис. 6 приведены изображения пластины для 1, 15, 30 и 45 итераций соответственно, полученные по итогам обработки результатов моделирования скриптом на языке Python с применением Matplotlib.

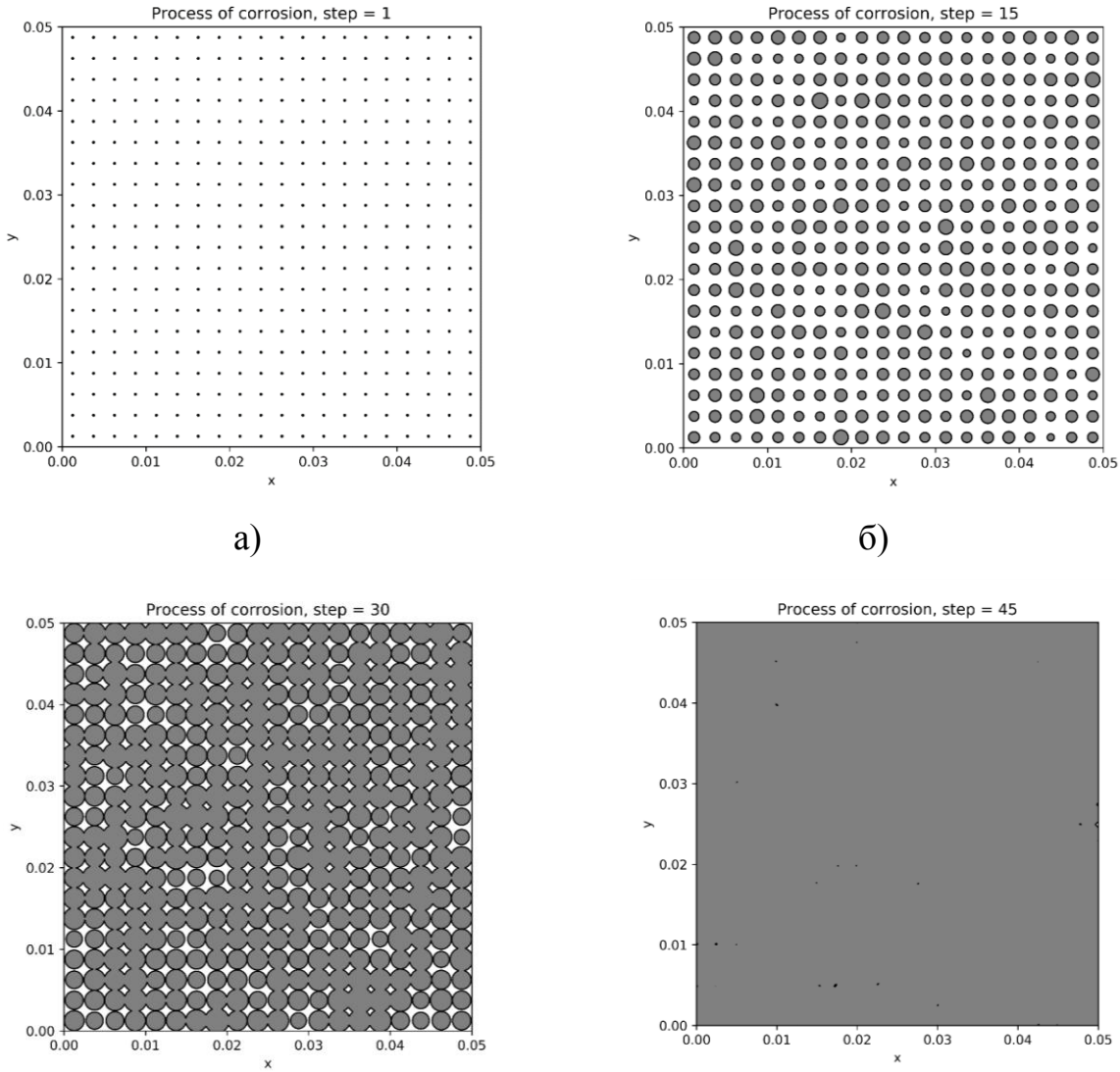
Таким образом, в работе представлены созданные алгоритм моделирования коррозии материалов в агрессивных средах на основе теории перколяции, а также программное средство, его реализующее. Получены графики зависимости величин от шага моделирования.

© Электронный научный журнал «Инженерный вестник Дона», 2007–2020



а) б)

Рис. 5. – Зависимость длины границы области коррозии (а) и площади оставшегося материала (б) от шага моделирования



а) б)

в) г)

Рис. 6. – Картина коррозии пластины на 1 (а), 15 (б), 30 (в) и 45 (г) итерациях

© Электронный научный журнал «Инженерный вестник Дона», 2007–2020

Литература

1. Ramadian R.I., Fahrudin N., Pekik N. Spreading dynamics of corrosion on material surface using site percolation model // Symposium on Nanosciences and Chemistry, a Satellite Event of the 2nd International Conference on Science and Technology, ICST 2016. Yogyakarta; Indonesia: 2017. pp. 69-75.

2. Bollobás B., Riordan O. Percolation. Cambridge University Press, 2006. 323 с.

3. Тарасевич Ю.Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы. М.: Едиториал УРСС, 2002. 112 с.

4. Эфрос А.Л. Физика и геометрия беспорядка. М.: Наука, 1982. 176 с.

5. Медников С.В., Чеботарев М.А., Медников В.С. Перколяционная модель коррозионного процесса // Вопросы физической метрологии: Вестник Поволжского отд-ния Метрологической академии России. 2003. №5. С. 54-65.

6. Gould H., Tobochnik J., Christian W. An introduction to computer simulation methods applications to physical system // Open source physics. URL: compadre.org/OSP/document/ServeFile.cfm?ID=7375&DocID=527&DocFID=9493&Attachment=1.

7. Майер Р.В. Компьютерное моделирование физических явлений. Глазов: ГГПИ, 2009. 112 с.

8. Гусев В.А., Мордкович А.Г. Математика: Справочные материалы. М.: Просвещение, 1990. 416 с.

9. Owen A.B. Monte Carlo theory, methods and examples // Stanford statistics URL: statweb.stanford.edu/~owen/mc/.

10. Press William H., Teukolsky Saul A., Vetterling William T., Flannery Brian P. Numerical Recipes. The Art of Scientific Computing. Third edition. Cambridge University Press. 2007. pp. 340-410.

© Электронный научный журнал «Инженерный вестник Дона», 2007–2020

References

1. Ramadian R.I., Fahrudin N., Pekik N. Symposium on Nanosciences and Chemistry, a Satellite Event of the 2nd International Conference on Science and Technology, ICST 2016. Yogyakarta; Indonesia: 2017. pp. 69-75.

2. Bollobás B., Riordan O. Percolation. Cambridge University Press, 2006. 323 c.

3. Tarasevich Yu.Yu. Percolyacia: teoria, prilozhenia, algoritmy [Percolation: theory, applications, algorithms]. Moskva, URSS editorial, 2002. 112 p.

4. Efros A. L. Fizika i geometria besporyadka [Physics and geometry of disorder]. Moskva, Nauka, 1982. 176 p.

5. Mednikov S.V., Chebotarev M.A., Mednikov V.S. Voprosy fizicheskoy metrologii: Vestnik Povolzhskogo otd-niya Metrologicheskoy akademii Rossii. 2003. №5. pp. 54-65.

6. Gould H., Tobochnik J., Christian W. An introduction to computer simulation methods applications to physical system. Open source physics. URL: compadre.org/OSP/document/ServeFile.cfm?ID=7375&DocID=527&DocFID=9493&Attachment=1.

7. Mayer R.V. Kopmuternoe modelirovanie fizicheskih yavleniy [Computer simulation of physical phenomena]. Glazov: GGPI, 2009, 112 p.

8. Gusev V. A., Mordkovich A. G. Matematika: Spravochnye materialy [Mathematics: Ref. Materials]. Moscow: Education, 1990, 416 p.

9. Owen A.B. Monte Carlo theory, methods and examples. Stanford statistics URL: statweb.stanford.edu/~owen/mc/.

10. Press William H., Teukolsky Saul A., Vetterling William T., Flannery Brian P. Numerical Recipes. The Art of Scientific Computing. Third edition. Cambridge University Press. 2007. pp. 340-410.

© Электронный научный журнал «Инженерный вестник Дона», 2007–2020