



**Informatics
for Materials Corrosion and Protection**
The Fundamentals and Applications
of Materials Genome Initiative in Corrosion and Protection

材料腐蚀信息学

——材料腐蚀基因组工程基础与应用

李晓刚 著



化学工业出版社

·北京·

材料腐蚀信息学是研究材料腐蚀信息加工、材料腐蚀信息管理、信息安全与传播的学科,是大数据技术与材料腐蚀科学交叉渗透形成的新学科,是材料腐蚀基因组工程的基础。本书提出了“材料腐蚀信息学”的概念,并从数据库层面、从数据的处理层面、从数据分析建模与模拟层面、从数据信息在实践中的应用层面,系统地阐述材料腐蚀信息学的内涵、结构和应用。

本书可供材料腐蚀与防护学科、信息应用学科及材料基因组工程科研和管理人员阅读和参考,也可供大专院校材料科学与工程专业、信息工程专业的师生参考。

图书在版编目 (CIP) 数据

材料腐蚀信息学——材料腐蚀基因组工程基础与应用/李晓刚著. —北京:化学工业出版社,2014.9

ISBN 978-7-122-21184-2

I. ①材… II. ①李… III. ①工程材料-腐蚀-信息学 IV. ①TB304

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2014) 第 145442 号

责任编辑:段志兵

责任校对:蒋宇

文字编辑:孙凤英

装帧设计:关飞

出版发行:化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街13号 邮政编码100011)

印刷:北京永鑫印刷有限责任公司

装订:三河市胜利装订厂

710mm×1000mm 1/16 印张18 彩插4 字数357千字 2014年11月北京第1版第1次印刷

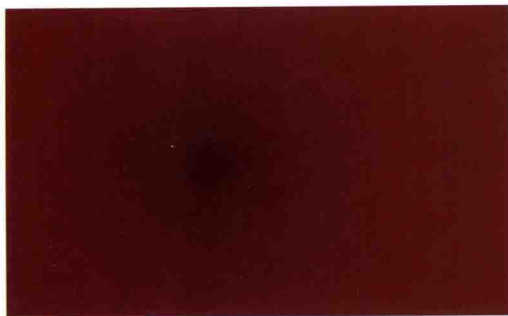
购书咨询:010-64518888(传真:010-64519686) 售后服务:010-64518899

网址:<http://www.cip.com.cn>

凡购买本书,如有缺损质量问题,本社销售中心负责调换。

定 价:78.00 元

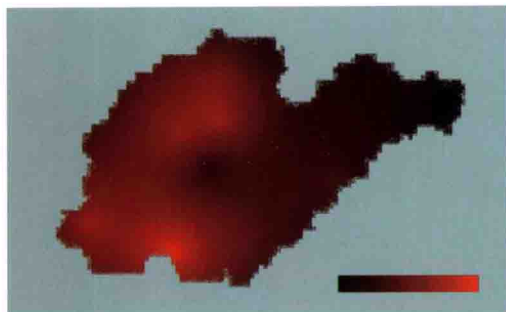
版权所有 违者必究



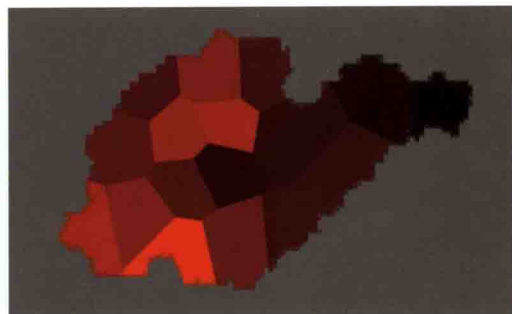
▲ 图 9.3 莱芜的影响域



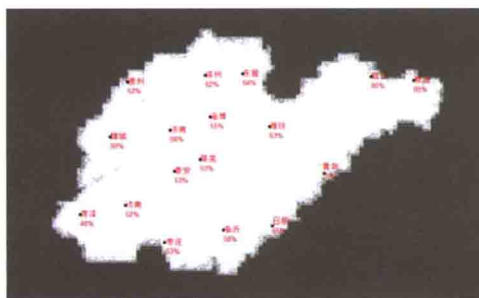
▲ 图 9.4 菏泽的影响域



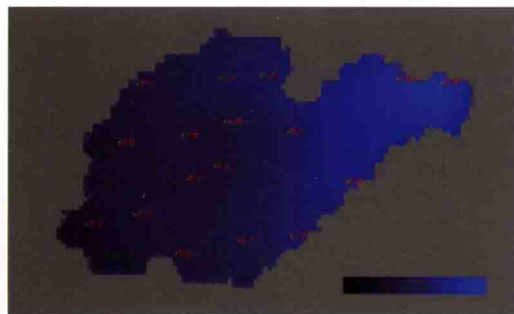
▲ 图 9.5 基于扩散模型的山东温度数据地图



▲ 图 9.6 采用最近邻法的山东温度数据地图



(a) 原始数据点图

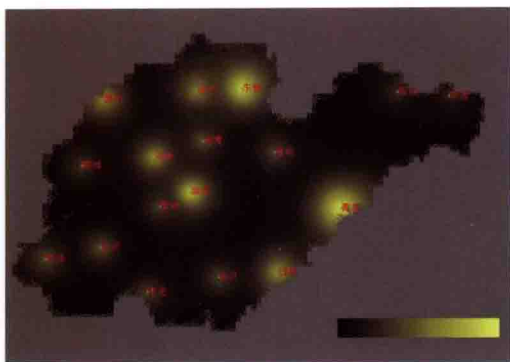


(b) 区域化湿度数据地图

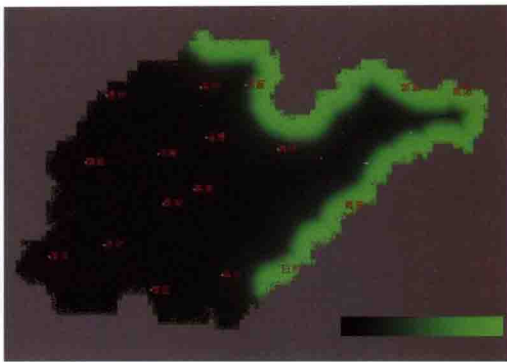


(c) 基于扩散模型的湿度数据地图

▲ 图 9.8 不同的湿度数据地图



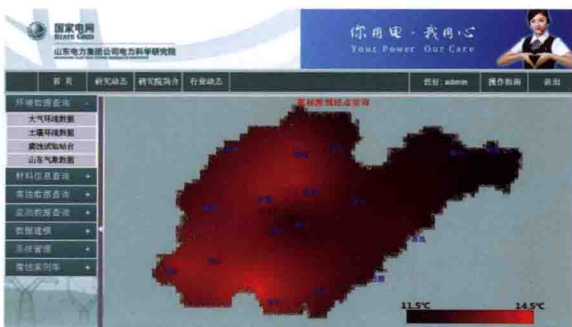
▲ 图 9.11 山东省 SO₂ 浓度数据地图



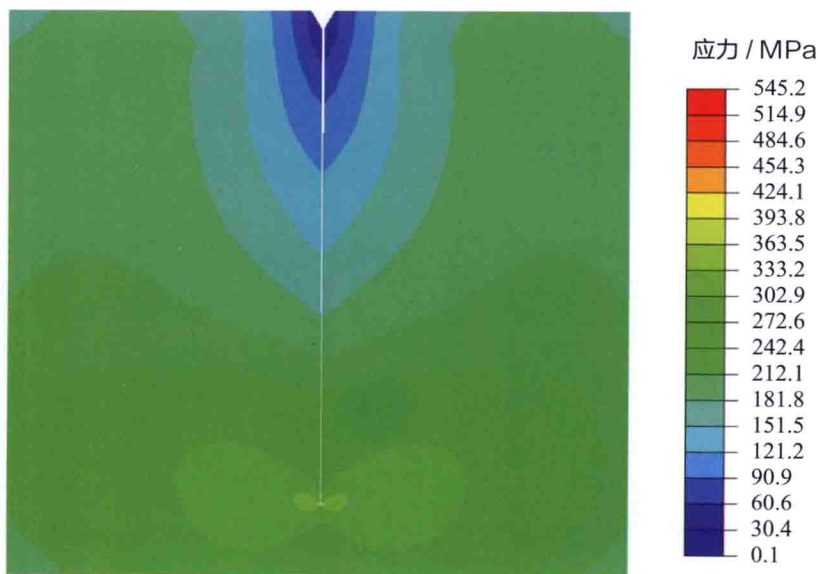
▲ 图 9.14 山东省氯离子浓度数据地图



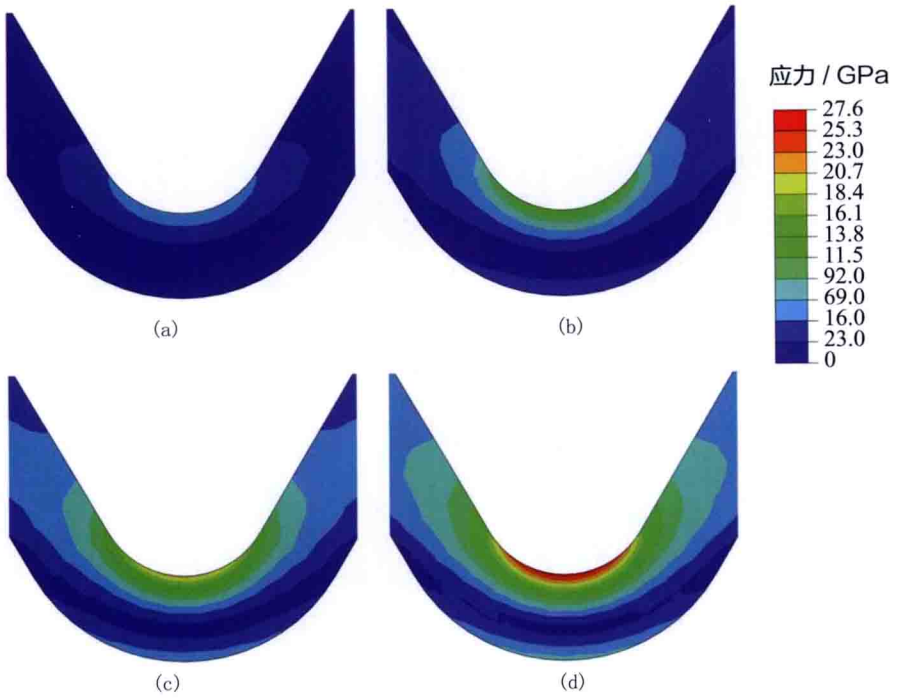
▲ 图 9.15 山东省腐蚀等级地图



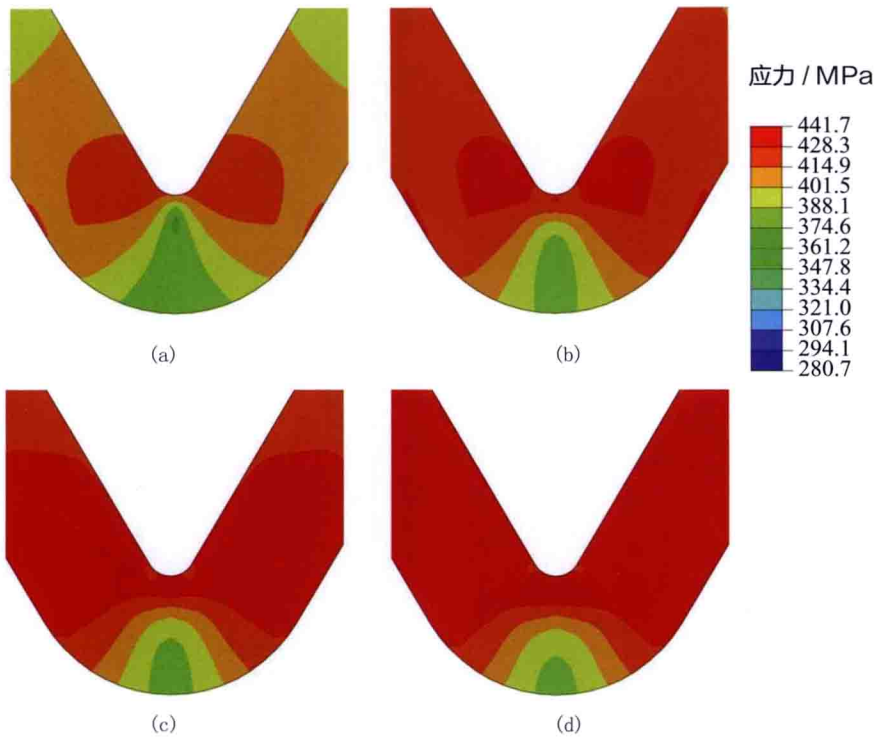
▲ 图 9.16 用于数据预测的数据地图



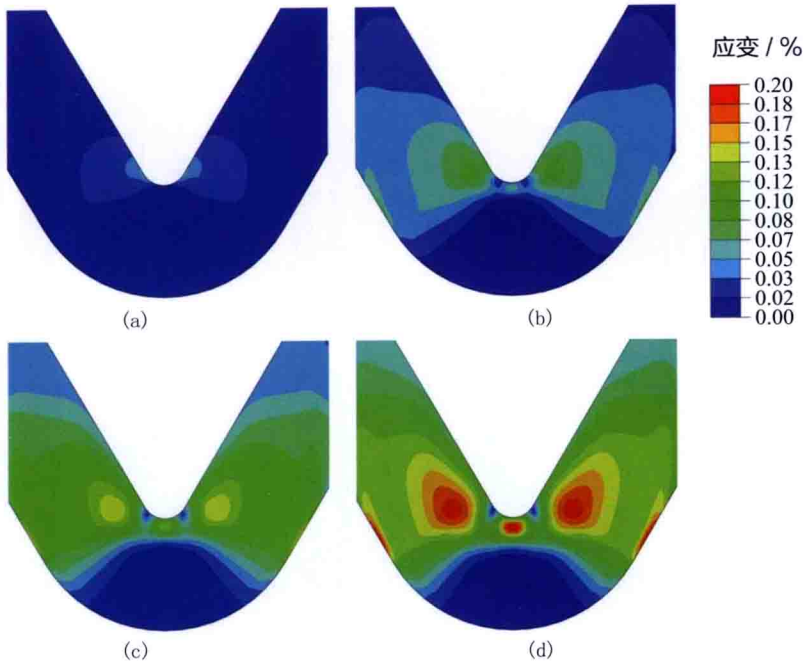
▲ 图 13.3 WOL 试样裂纹尖端应力场数值计算结果



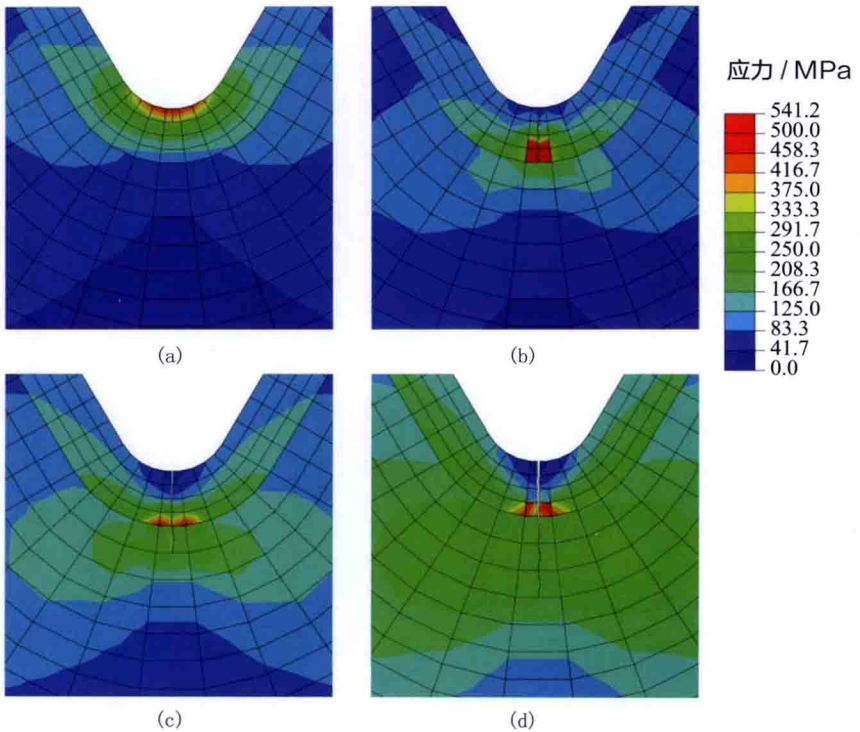
▲ 图 13.7 WOL 试样缺口附近区域氧化膜中的应力分布图



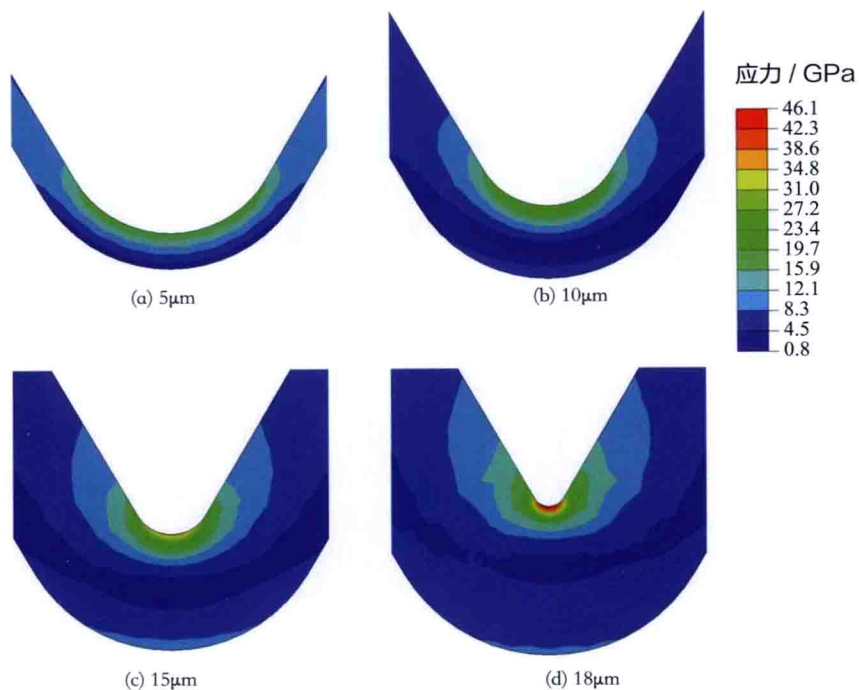
▲ 图 13.8 WOL 试样缺口附近区域基体合金中的应力分布图



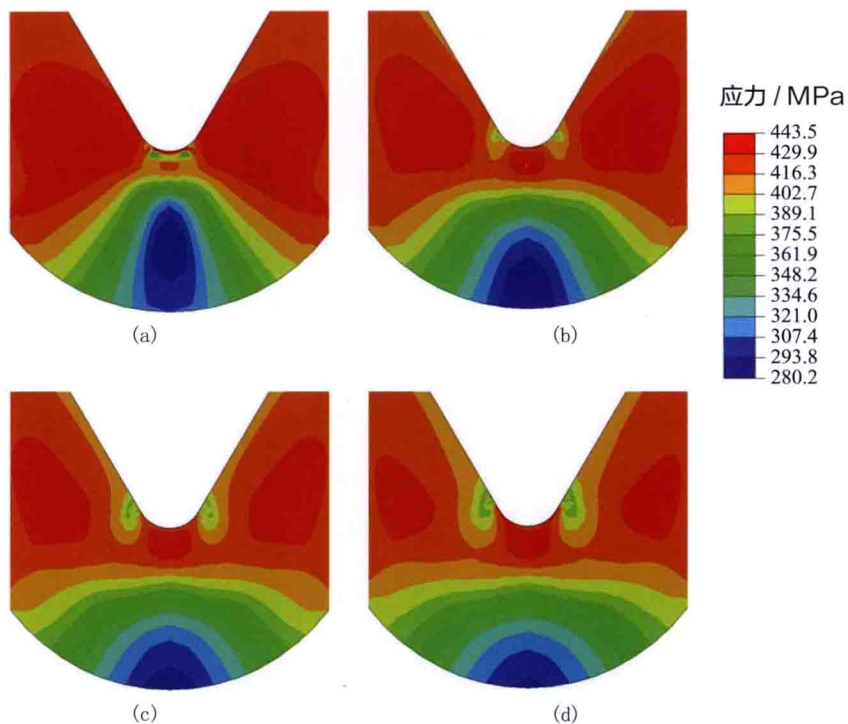
▲ 图 13.9 WOL 试样缺口附近区域基体合金中的应变分布图



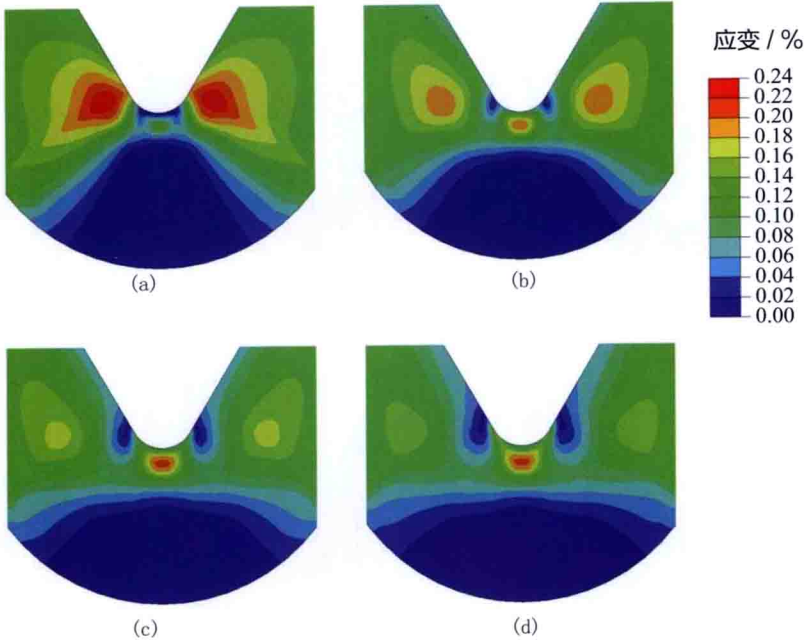
▲ 图 13.10 WOL 试样缺口附近区域氧化膜中裂纹形核及扩展过程



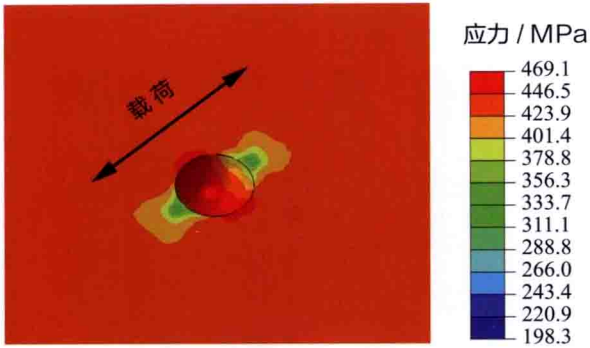
▲ 图 13.11 不同氧化膜厚度条件下氧化膜中的应力分布



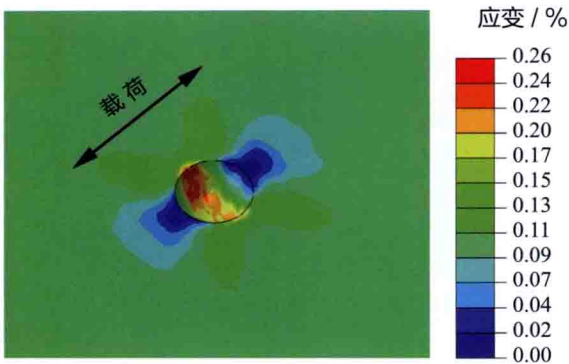
▲ 图 13.13 不同氧化膜厚度条件下基体合金中的应力分布



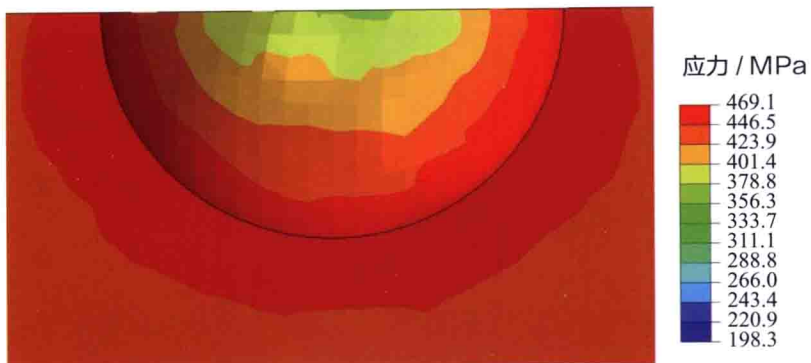
▲ 图 13.15 不同氧化膜厚度条件下基体合金中的应变分布



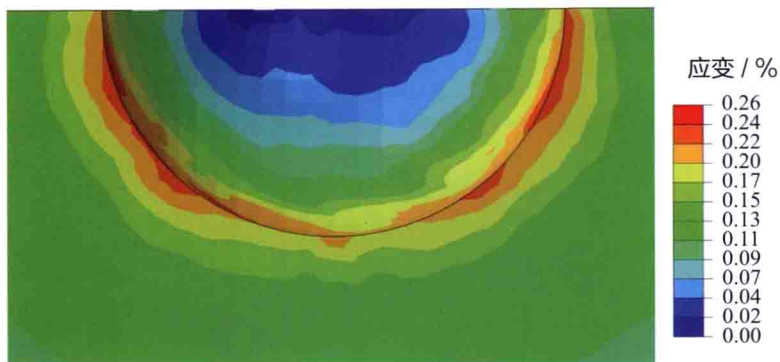
▲ 图 13.20 点蚀坑附近的应力分布情况



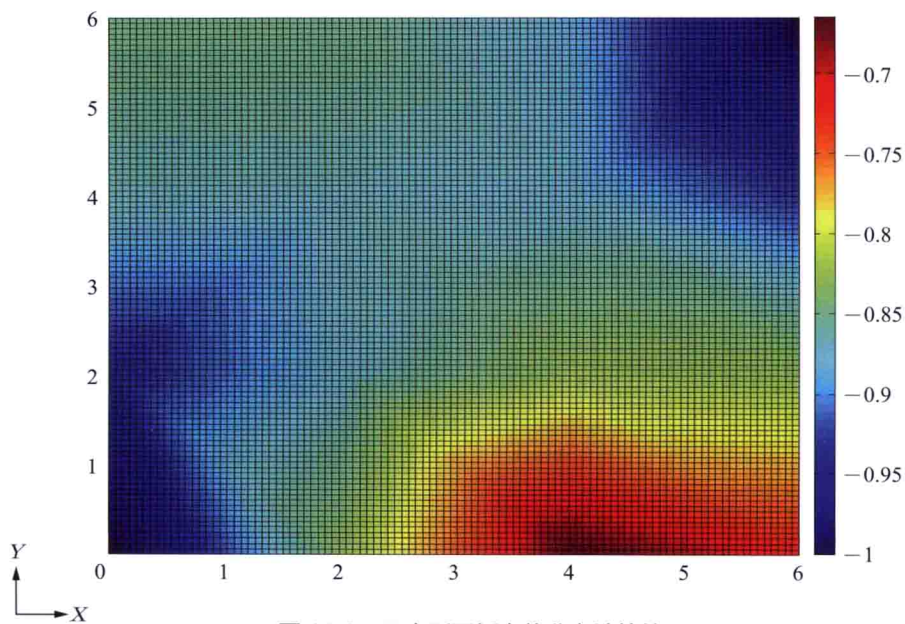
▲ 图 13.21 点蚀坑附近的应变分布情况



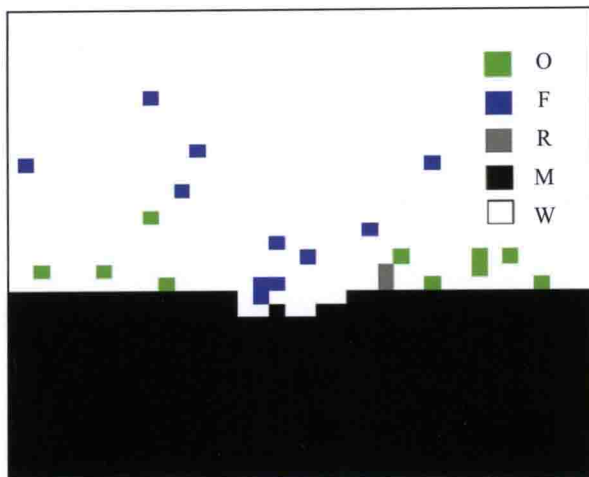
▲ 图 13.22 点蚀坑内应力分布截面图



▲ 图 13.23 点蚀坑内应变分布截面图

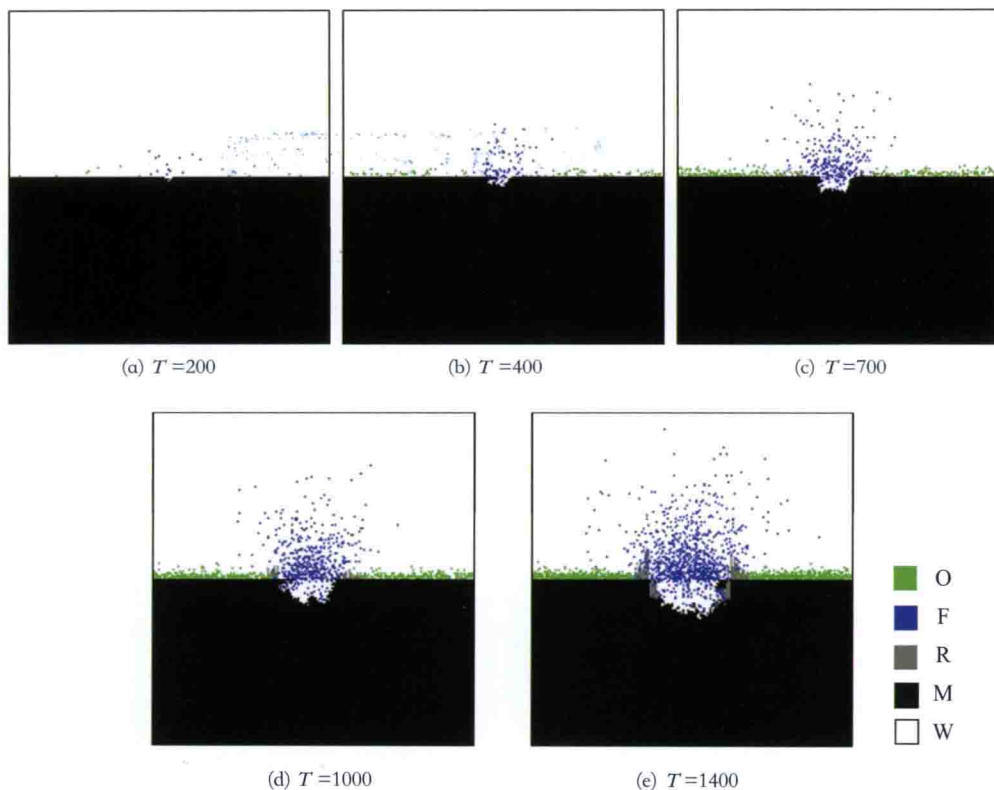


▲ 图 14.6 正方形平板电位分布计算结果



▲ 图 15.5 元胞演化规则图

(黑色网格代表M元胞，白色代表W元胞，灰色代表R元胞，蓝色代表被F占据的元胞，绿色代表被O占据元胞)



▲ 图 15.8 元胞自动机的演化过程 (网格 200×200)

前 言

人类社会正处在信息大爆炸的时刻，并正式进入“大数据”时代。存储和运算工具的飞速发展，特别是以计算机为代表的信息加工和无线通信的暴发式发展，加速了人类迈入“大数据”时代的进程。信息学是研究信息的获取、处理、传递和利用的规律性的一门新兴学科。信息学是以信息为研究对象，以计算机技术为主要工具，以扩展人类的信息功能为主要目标的一门综合性学科，利用计算机及其程序设计来分析和解决问题。信息学主要包括信息加工学、信息资源管理学、信息安全学、信息传播学等。

任何组织机构，在当今瞬息万变的世界里，必须建立信息资源管理系统，以应对日益复杂的信息冲击。例如国际竞争和商业竞争的演化，直接推进情报竞争的发展，特别是军事情报竞争。又例如，在城市的建设与管理中，正在致力于将城市建设与管理的每一个细节“数值化”，并将这一“数值化”的结果设计在一个庞大的有机系统内，这就是“智慧城市”的概念。任何学科，为了适应信息处理技术的发展所带来的变化，必须尽快实现与信息学的交叉，以适应学科本身发展的需求。材料腐蚀学科必须关注材料腐蚀信息加工、材料腐蚀信息管理、安全与传播，以加快自身的发展。

大数据 (big data) 指的是：所涉及对象的信息量规模大到无法通过目前传统数据库工具对其进行采集、管理和处理。大数据具有“4V”特点：Volumes, Variety, Velocity, Veracity。数据体量 (Volumes) 大，是指大型数据集一般在10TB规模左右，在实际应用中，已经形成了PB级的数据量；数据类别 (Variety) 多，是指数据来自多种数据源，数据种类和格式丰富，冲破了以前所限定的结构化数据范畴，囊括了半结构化和非结构化数据，例如网络日志、视频、图片、地理位置信息等；数据处理速度 (Velocity) 快，是指在数据量非常大的情况下，也能够做到数据的实时处理；数据真实性 (Veracity) 高，随着社交数据、用户内容、交易与应用数据等新数据源的兴起，传统数据源的局限被打破，迫切需要确保其真实性及安全性。与传统的数据挖掘有着本质的不同，物联网、云计算、移动互联网、车联网、手机、平板电脑、PC以及遍布地球各个角落的各种各样的传感器，无一不是数据来源或者承载的方式。

对于大数据分析最基本的要求就是可视化分析，因为可视化分析能够直观地呈现大数据特点，就如同看图说话一样简单明了。大数据分析的理论核心就是数据挖

掘算法，各种数据挖掘的算法只有基于不同的数据类型和格式才能更加科学地呈现出数据本身具备的特点。大数据分析最重要的应用是预测性分析，从大数据中挖掘出特点，建立模型，通过模型带入新的数据，从而预测未来的数据。

云计算（cloud computing）是一种基于互联网的计算方式，通过这种方式，共享的软硬件资源和信息可以按需提供给计算机和其他设备。云计算的核心思想是将大量用网络连接的计算资源统一管理和调度，构成一个计算资源池向用户按需服务。提供资源的网络被称为“云”。狭义云计算是 IT 基础设施的交付和使用模式，指通过网络以按需、易扩展的方式获得所需资源；广义云计算是服务的交付和使用模式，指通过网络以按需、易扩展的方式获得服务。这种服务可以是与 IT 和软件、互联网相关，也可能是其他服务。

与近年来信息科学与技术突然爆发并飞速发展的特点相比，材料科学与技术的发展特点是漫长而稳定的。材料科学已经跨越钢铁材料时代，进入多元化的复合材料时代，各种特殊功能新型材料以每年 5000 种以上的速度产生。材料设计、研发、生产、使用甚至报废过程就是材料数据的产生过程，这些过程中产生材料数据已经成为驱动新材料科研的动力，是材料科学最宝贵的财富。随着材料科学的发展和信息科学的迅速发展，材料信息的数据量和复杂性大大提高。如何高效管理、存储不同类型的材料科学数据，如何最大限度地从中挖掘有价值的信息，如何最大限度地实现材料信息的资源共享和知识创新，如何提高材料科研的效率，降低新材料开发的成本和开发时间等，都是摆在材料研究工作者面前的一系列难题。正是在这一背景下，中外学者提出和发展起来了材料信息学这一材料科学的分支。材料信息学的发展有利于解决材料科学面临的挑战，顺应了当代材料科学技术发展的大趋势。材料信息学自 1999 年提出以来，已在材料科学研究和材料设计等方面得到了应用，有的国家成立了专门的研究室开展系统研究，并取得了大量的成果。2011 年 6 月，美国政府又启动材料基因组计划（Materials Genome Institute，简称 MGI）。“材料基因组计划”是美国经过信息技术革命后，充分认识到新材料对技术进步和产业发展的重要作用，以及信息技术对新材料研发的冲击，在复兴制造业的战略背景下提出来的。

在这一大背景下，笔者根据二十八年来所做的系列化研究工作，提出建立“材料腐蚀信息学”这一学科分支，并将“材料腐蚀信息学”建构在物联网——“中国腐蚀与防护网”这一平台上。将一门材料学科的分支主要依托于物联网的平台上是个新事物，也是有益的尝试。

“材料腐蚀信息学”涉及的研究内容与“材料基因组计划”的主体内容完全吻合，可以看成腐蚀学科的“基因组计划”，因此，笔者将本书副书名定为“材料腐蚀基因组工程基础与应用”。

国家最高科技奖获得者、笔者的导师师昌绪院士是国家材料环境腐蚀平台的奠基人；王光雍教授在异常艰难困苦的条件下，领导了国家材料环境腐蚀平台二十多年的发展并形成体系。没有他们的努力，是不可能目前有这些工作的。国家自然科学基金会的何鸣鸿副主任、高瑞平副主任，材料学部的黎明副主任、车成卫副主任等，科技部基础司张先恩司长、马燕合司长、叶玉江副司长、周文能处长、沈建磊处长、张延东处长、陈文君处长、付小峰处长等领导对以上工作给予了大力支持与帮助。

国家科技条件平台中心戴国强主任、吕先志副主任、苏靖副主任、袁伟处长、卢凡处长以及赫运涛、黄珍东、王正、王瑞丹、张鹏、石蕾、陈志辉、褚文博等同志对“中国腐蚀与防护网”的各项工作均给予大力支持与帮助；尤其是袁伟处长，不仅宏观上出谋划策，而且在很多细节上也给予大力支持与鞭策，对“中国腐蚀与防护网”的建设与发展，起到了重要的推动作用。

国家材料环境腐蚀平台的 200 多位同事、北京科技大学副校长谢建新教授、材料科学与工程学院院长曲选辉教授、新材料技术研究院副院长乔利杰教授及其腐蚀与防护中心的全体同事们也非常支持本工作。

国家材料环境腐蚀平台是材料腐蚀信息学的基础，长期得到国家自然科学基金委员会和科学技术部的大力支持。国家自然科学基金 51131001, 51171025, 51131005, 科技部项目：2012FY113000, 2012AA040105, 2011BAK06B01, 2014CB643300 和科技平台条件建设项目长期资助了本研究。其中，有关海洋腐蚀数据部分得到了以笔者为首席科学家的 973 项目 (No. 2014 CB643300) 的支持。

在“中国腐蚀与防护网”建设中，我们团队的所有人员参与了其中的工作。高瑾研究员和罗德贵工程师最早与笔者一起，于 1999 年开始建设“国家材料环境腐蚀试验站”的工作网站“材料环境腐蚀数据共享网”；先后参与这一工作的（即第一篇及第二十二章的工作）有付冬梅教授、董超芳教授、杜翠薇教授、肖葵副教授、吴俊升副教授、汪崧高级工程师、程学群副教授、刘智勇副教授、卢琳讲师、黄运华教授和张达威博士后。肖葵副教授和吴俊升副教授负责设计和建成了“中国腐蚀与防护网”，并参与“中国腐蚀与防护网”的日常运行工作。本书第七、八、九、十一、十二、十九、二十和二十一章的工作由付冬梅教授及其学生杨焘博士、童何俊博士、支元杰博士、李茂辰硕士、王志强硕士、向金龙硕士和徐庆硕士完成。第十章的工作主要由笔者及学生曲良山博士完成。第十三章的工作主要由杜翠薇教授及学生张东东硕士完成。第十四章的工作主要由董超芳教授、生海博士完成。第十五~十八章的工作主要由笔者及学生李磊博士完成。第二十四章的工作由杜翠薇教授、曹备研究员和李双林高级工程师、何书全高级工程师等完成。第二十三章的工作由肖葵副教授、吴俊升副教授、胡为峰总经理等完成。

北京丰盈环蚀新技术工程有限公司的胡为峰总经理是我们建设“中国腐蚀与防护网”的志同道合者，他与笔者一样，也深信大数据时代云计算技术、物联网技术将带给社会的变革，作为一名企业家，愿意主动加入到这一变革中。目前，“中国腐蚀与防护网”的日常管理和将来市场化开拓由他领导的团队负责，团队的主要成员有高瑾研究员、肖葵副教授、吴俊升副教授、程学群副教授、李凌主管和郭静主管。化学工业出版社的编辑对本书的编写也提出了一些有益的意见，使笔者受益匪浅。

由于这一工作持续时间之长和工作之复杂，给予支持的领导和参与研发的人员很多，无法一一提到。在此，向所有支持这项工作的领导与专家、参与研发的所有研究者致以深深的谢意！

同时感谢中国腐蚀与防护学会著作出版基金对本书的出版资助。

李晓刚

简明目录

绪论 / 1

第一篇 材料腐蚀信息学之数据库构建与数据积累 / 5

第一章	材料腐蚀基础科学数据库	7
第二章	自然环境腐蚀数据库	21
第三章	工业环境腐蚀数据库	36
第四章	腐蚀电化学实验与检测数据库	41
第五章	防护技术与市场数据库	46
第六章	腐蚀知识与资讯数据库	54

第二篇 材料腐蚀信息学之腐蚀数据挖掘与建模 / 69

第七章	大气环境因素与腐蚀分级量化关系的挖掘方法	70
第八章	数据缺失时金属材料大气腐蚀等级自动判别方法	75
第九章	大气腐蚀环境分级分类的扩散模型与可视化	83
第十章	运用 BP 神经网络方法构建碳钢区域土壤腐蚀模型	92
第十一章	基于支持向量机 (SVM) 的腐蚀预测模型与实现	100
第十二章	改进型的 SVM 的腐蚀预测模型与实现	111
第十三章	应力腐蚀裂纹尖端的有限元数值分析与可视化	122
第十四章	阴极保护电位边界元法的数值计算与可视化	136

第三篇 材料腐蚀信息学之腐蚀过程模拟 / 150

第十五章	金属在湿大气环境下初期腐蚀行为的模拟	152
第十六章	不锈钢点蚀坑生长形貌的模拟	165
第十七章	不锈钢点蚀动力学过程的模拟	177
第十八章	不锈钢点蚀亚稳态到稳态生长中转换过程的模拟	186

第四篇 材料腐蚀信息学之腐蚀数据共享及工程应用 / 206

第十九章	基于神经网络计算的石化设备腐蚀管理专家系统	207
第二十章	钢铁企业产品环境腐蚀网络数据库系统设计与实现	214
第二十一章	轻质有色金属材料腐蚀数据库系统设计与实现	224
第二十二章	材料腐蚀数据共享网设计	236
第二十三章	基于“中国腐蚀与防护网”的大气腐蚀数据工程应用案例	244
第二十四章	基于物联网的土壤腐蚀数据工程应用案例	253
附录	材料腐蚀信息学与材料腐蚀基因组工程载体——中国腐蚀与防护网	261

后记 / 272

详细目录

绪 论 / 1

第一篇 材料腐蚀信息学之数据库构建与数据积累 / 5

——材料腐蚀数据库源代码标准化建设与共享，是材料腐蚀基因组工程的最基本原则

第一章 材料腐蚀基础科学数据库	7
一、金属氧化物基础物理化学性能数据库	7
二、金属的标准电极电位数据库	10
三、金属电位 E-pH 图数据库	12
四、金属腐蚀极化基本数据库	12
五、高分子腐蚀（老化）基本数据库	16
六、结语	19
第二章 自然环境腐蚀数据库	21
一、大气腐蚀数据库	21
二、土壤腐蚀数据库	26
三、水环境腐蚀数据库	28
四、自然环境特征数据库	29
五、材料自然环境腐蚀图谱数据库	34
六、结语	35
第三章 工业环境腐蚀数据库	36
一、工业环境腐蚀材料数据库	36
二、工业腐蚀环境数据库	38
三、工业环境腐蚀案例与图谱数据表	39
四、结语	40
第四章 腐蚀电化学实验与检监测数据库	41
一、腐蚀电化学测试数据库	41
二、腐蚀电化学检监测与评价数据库	43
三、结语	44