

شبیه سازی سیتیک واکنشهای خوردگی

۱- سید خطیب الاسلام صدرزاد و ۲- محمد رضا صالح
۱- دانشکده مهندسی و علم مواد، دانشگاه صنعتی شریف
۲- دانشگاه تربیت مدرس

چکیده: در این تحقیق از سه روش غیرخطی، خطی و چهارنقطه برای شبیه سازی سیتیک واکنشهای خوردگی استفاده شد. مقایسه روشها نشان داد که شبیه غیرخطی به دلیل غیروابسته بودن به دامنه پتانسیلهای اعمالی و نیز محاسبه همزمان ضرایب نفل و چگالی جریان خوردگی از کاربرد عمومی تری نسبت به سایر روشها برخوردار است. از روش انطباق بهترین منحنی به توسط تکنیک کوچکترین مجموع مربعات برای حل معادلات غیرخطی بكمک تابع $i_{corr} = \exp(\alpha\Delta\varepsilon) - \exp(-\beta\Delta\varepsilon)$ استفاده شده و بر این مبنای نرم افزار CKS طراحی و ساخته شد. آنگاه با استفاده از نتایج آزمایشی، قابلیت نرم افزار از نظر دقت و سرعت مورد ارزیابی قرار گرفت.

واژه های کلیدی: سیتیک، خوردگی، شبیه سازی، غیرخطی، CKS

۱- مقدمه

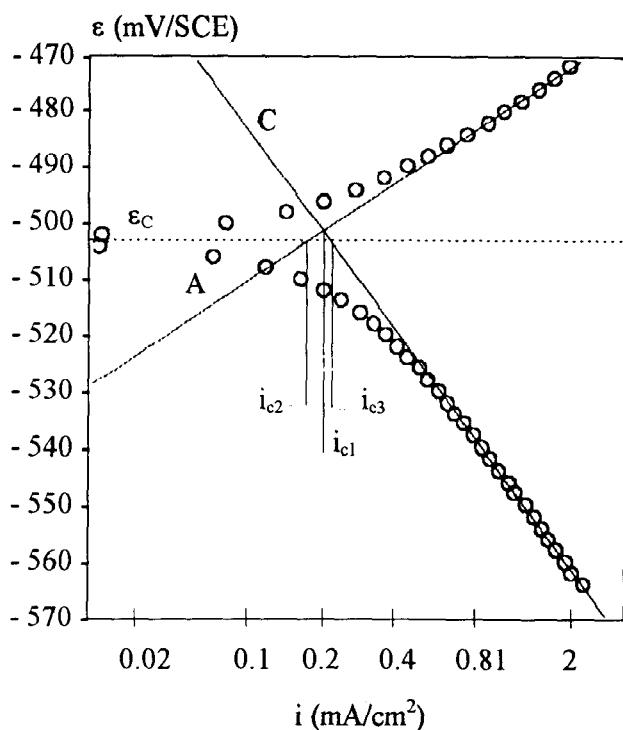
خوردگی در دمای محیط، معمولاً دارای طبیعت الکتروشیمیایی بوده و تخریب فلزی توسط انحلال آندی انجام میگیرد. به اینصورت که در هوای مرطوب، یک فیلم نازک از آب بر روی فلز تشکیل شده و وضعیتی مشابه غوطه وری در آب بوجود میآید. خوردگی در محیط آبی، فرآیند پیچیده‌ای بوده و تحت تأثیر عوامل شیمیایی و الکتروشیمیایی، خواص متالورژیکی فلز، وضعیت محیط و حضور و خواص فیلم سطحی آب قرار میگیرد. نرخ خوردگی، به سرعت فرآیندهایی همچون نفوذ یونی و واکنش انتقال الکترون بستگی داشته و از رابطه (۱) محاسبه میشود [۱].

$$C.R(mpy) = \frac{0.13 i_{corr} M}{n.d} \quad (1)$$

که در آن cm^2 چگالی جریان خوردگی ($\mu\text{A}/\text{cm}^2$), M جرم ملکولی فلز خورده شده (گرم بر مول)، n تعداد الکترون تبادل شده در واکنش و d چگالی فلز (gr/cm^3) است.

پارامترهای خوردگی، عملاً توسط روشاهای الکتروشیمیابی به کمک پلاریزاسیون الکترودی اندازه گرفته می‌شوند، بطوریکه با اعمال یک پتانسیل بر قطعه کار و اندازه گیری جریان توسط دستگاه پتانسیواستات، منحنی های پتانسیل بر حسب لگاریتم جریان (منحنی های ایوانز Evans) رسم می‌گردد.

برای تحلیل اطلاعات بدست آمده از اندازه گیری جریان مستقیم و یا متناوب، وجود یک الگوی ریاضی قابل دسترس توسط متخصصین خوردگی اهمیت ویژه‌ای دارد، زیرا آنالیز گرافیکی منحنی های پلاریزاسیون برای بدست آوردن شبیهای آندی (b_a) و کاتدی (b_c) ناحیه نفل و چگالی جریان خوردگی به انتخاب ناحیه و نحوه ترسیم خطوط مستقیم بستگی دارد. این عملکرد، به علت وجود آزادی انتخاب ناحیه خطی، سبب بدست آوردن چگالی های جریان متفارغ، مانند b_{a1} و b_{a2} و b_{c1} و b_{c2} شکل ۱ می‌گردد که در خیلی از اوقات دارای تفاوت محسوسی می‌باشند. چگالی جریان آن محل تقاطع دو خط آندی و کاتدی و ترتیب محل برخورد خطوط آندی و کاتدی با خط $\epsilon = \epsilon_0$ می‌باشد.



شکل ۱ - منحنی پلاریزاسیون برای سیستم $\text{Fe}/1\text{N H}_2\text{SO}_4$ در 25°C و سرعت اعمال پتانسیل 1mV/min .

بررسی دقیق همه عوامل مؤثر بر سرعت، منجر به این نتیجه گیری می‌گردد که آزمایش عملی و تحلیل عددی، دو جنبه مکمل برای بدست آوردن سرعت فرایند خوردگی است. در صورتیکه منحنی های ایوانز بر حسب پارامترهای سیتیکی فرموله گردند، حل معادلات ریاضی از طریق روشاهای عددی و یا آنالیتیکی به دستیابی به مقدار این پارامترها منجر می‌شود.

محاسبه پارامترهای خوردگی تاکنون موضوع تحقیق بسیاری از محققین بوده است [۳ - ۷]. برای مثال بارنارت (Barnartt) رفتار ΔE بر حسب نه خوب پتانسیل خوردگی را خطی فرض کرده [۷] و در نتیجه با استفاده از سه نقطه در هر زمان، پارامترهای α_{corr} و β را از معادله زیر محاسبه کرده است.

$$i = i_{corr} [\exp(\alpha \Delta \epsilon) - \exp(-\beta \Delta \epsilon)] \quad (2)$$

در این روش با میانگین گیری از تمام سه تابیهای ممکن بارنارت، نتایج را میتوان بهبود بخشد. مانفلد (Mansfeld) با تکنیک کوچکترین مربعات، بهترین منحنی را با استفاده از کامپیوتر و با صرف وقت کم بدست آورده. روش چهار نقطه نیز برای محاسبه شبیهای تفل و جریان خوردگی، روش متكامل تری بود که با اطلاعات پلاریزاسیون حول پتانسیل خوردگی، بر مبنای روش بارنارت ارائه گردید [۸]. بعداً روش‌های عددی دیگری نیز بر مبنای رفتار خطی و غیرخطی منحنی های پلاریزاسیون و محاسبه کامپیوتری پارامترهای الکتروشیمیایی با اطلاعات α و β مجدداً ارائه شد [۹]. مطالعات انجام شده عموماً برای واکنش‌های اینستانتانسی و انتقال بار هستند، در اینصورت واکنش تحت تأثیر پلاریزاسیون اکسیواسیون بوده و جریان اعمالی از رابطه ۳ محاسبه میشود:

$$i_{app.} = i_{corr.} \left\{ \exp \frac{2.3[(\epsilon - \epsilon_{corr.}) - R_s i_{app.}]}{b_a} - \exp \frac{-2.3[(\epsilon - \epsilon_{corr.} - R_s i_{app.})]}{b_c} \right\} \quad (3)$$

با فرض صفر بودن مقاومت محلول، R_s رابطه ۳ میتواند ساده شود:

$$i_{app.} = i_{corr.} \left[\exp \frac{2.3(\epsilon - \epsilon_{corr.})}{b_a} - \exp \frac{-2.3(\epsilon - \epsilon_{corr.})}{b_c} \right] \quad (4)$$

در صورتیکه پارامترهای α و β بصورت زیر تعریف شوند:

$$\alpha \equiv \ln 10 / b_a, \quad \beta \equiv \ln 10 / b_c, \quad \Delta \epsilon \equiv E - E_{corr.} \quad (5)$$

نتیجه میشود:

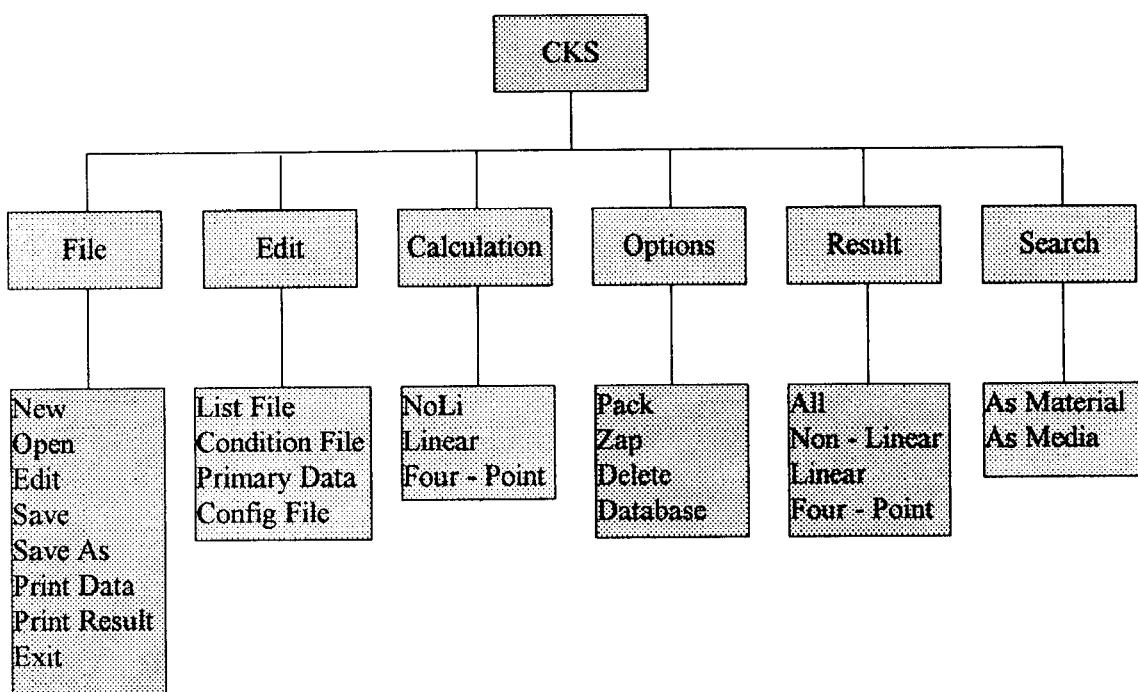
$$i = i_{corr} [\exp(\alpha \Delta \epsilon) - \exp(-\beta \Delta \epsilon)] \quad (6)$$

که در آن α چگالی جریان اعمالی، $\Delta \epsilon$ میزان انحراف از پتانسیل خوردگی، i_{corr} چگالی جریان خوردگی، b_a شب تفل برای منحنی آندی و b_c شب تفل برای منحنی کاتدی است.

با انطباق رابطه (۶) بر اطلاعات آزمایشی، منحنی های پلاریزاسیون را میتوان تحلیل نمود. با توجه به دشواری اندازه گیری های میدانی و پیچیده بودن محاسبات خوردنگی، ضرورت ساخت نرم افزاری که بتواند میزان خوردنگی را تحت شرایط گوناگون با سرعت و دقیق پیش بینی کند، آشکار بنظر میرسد. به علت نامشخص بودن کمیات سیستمیک، تجزیه و تحلیل اطلاعات خوردنگی و وفق آنها با دیاگرامهای پلاریزاسیون، معمولاً با دشواری و خطأ صورت میگیرد. لزوم سادگی کاربرد و اطمینان از صحت نتایج، سبب شده است که فعالیت پژوهشی در زمینه ساخت نرم افزارهای ساده و در عین حال کارا که بتوانند در محک زدن یافته های علمی و تکمیل نقایص اطلاعاتی محققین را یاری دهند، در سالهای اخیر توسعه یابد. بخشی از دستاوردهای این کوششها، ساخت نرم افزار جدیدی تحت عنوان CKS است که قادر به انجام محاسبات خوردنگی با سهولت، سرعت و دقیقی نسبتاً بالاست. در این مقاله به بررسی چگونگی ساخت و قابلیتهای این نرم افزار میپردازیم.

۲ - شبیه سازی

ساختار کلی نرم افزار ساخته شده در این تحقیق در شکل ۲ نمایش داده شده است. همانطور که دیده میشود، سه روش برای محاسبه پارامترهای خوردنگی مورد استفاده قرار گرفته است، که در صورت استفاده از اطلاعات ورودی مناسب از هر سه روش میتوان برای محاسبه کمیات مورد مطالعه استفاده نمود. این سه روش، به روشهای غیرخطی، خطی و چهار نقطه موسومند که با توجه به عدم محدودیت داده های ورودی در روش غیرخطی و نیز محاسبه همزمان ثابت تفل و چگالی جریان خوردنگی، روش اخیر مبنای محاسبات بوده و دو روش دیگر برای مقایسه و تأیید نتایج بکار گرفته شده است. با توجه به استفاده از هر سه روش غیرخطی، خطی و چهار نقطه در تدوین نرم افزار CKS، ذیلآ به تشریح جداگانه اساس اجرای محاسبات و نحوه بکارگیری آنها برای شبیه سازی فرایند خوردنگی میپردازیم.



شکل ۲ - ساختار کلی نرم افزار CKS

۲-۱ روش غیرخطی

تابع مورد استفاده در روش غیرخطی به شکل رابطه (۷) بیان میشود :

$$f = \ln I_c + \ln |\exp(\alpha \Delta \varepsilon) - \exp(-\beta \Delta \varepsilon)| \quad (7)$$

که در آن قدر مطلق عبارت $\exp(\alpha \Delta \varepsilon) - \exp(-\beta \Delta \varepsilon)$ برای کسب شکل مناسب منحنی در نظر گرفته میشود. این روش، محیطهای آندی و کاتدی را همزمان در نظر گرفته و تابع مجموع مریع تفاضل را به شکل زیر بکار میبرد :

$$G = \sum_{n=1}^N \left[\ln |i_n| - \ln I_c - \ln |\exp(\alpha \Delta \varepsilon_n) - \exp(-\beta \Delta \varepsilon_n)| \right]^2 \quad (8)$$

که مقدار $\#$ اشاره به مقدار چگالی جریان در پتانسیل $\Delta \varepsilon_n$ دارد. میتوان برای راحتی محاسبات، تابع جدید (۸) را تعریف کرد، بطوریکه :

$$R = \ln |\exp(\alpha \Delta \varepsilon) - \exp(-\beta \Delta \varepsilon)| \quad (9)$$

و مقادیر R_n در پتانسیل های $\Delta \varepsilon_n$ برای $n = 1, 2, \dots, N$ را محاسبه نمود.
برای بدست آوردن پارامترهای معادله (۹) میبایست تابع تفاضل G مینیمم گردد. نقطه مینیمم در تابع ذکر شده وقتی حاصل میشود که مشتقات جزئی تابع نسبت به پارامترهای مطلوب برابر با صفر شود.

$$F_1 = \frac{\partial G}{\partial I_c} = \frac{-2}{I_c} \sum_{n=1}^N \left[\ln |i_n| - \ln I_c - R_n \right] = 0 \quad (10)$$

$$F_2 = \frac{\partial G}{\partial \alpha} = 2 \sum_{n=1}^N \left[\ln |i_n| - \ln I_c - R_n \right] R_{n,\alpha} = 0 \quad (11)$$

$$F_3 = \frac{\partial G}{\partial \beta} = 2 \sum_{n=1}^N \left[\ln |i_n| - \ln I_c - R_n \right] R_{n,\beta} = 0 \quad (12)$$

بطوریکه :

$$R_{n,\beta} = \frac{\partial R_n}{\partial \beta} \quad , \quad R_{n,\alpha} = \frac{\partial R_n}{\partial \alpha} \quad (13)$$

در حل این معادلات باید توجه داشت که مشتق جزئی R_n تابع منطقه‌ای می‌باشد و بنابراین بسته به منطقه‌ای که R عمل می‌کند، روابط زیر بدست می‌آید:

$$\frac{\partial R}{\partial \alpha} = \frac{\Delta \epsilon \exp(\alpha \Delta \epsilon)}{\exp(\alpha \Delta \epsilon) - \exp(-\beta \Delta \epsilon)} \quad (14)$$

$$\frac{\partial R}{\partial \alpha} = \frac{-\Delta \epsilon \exp(\alpha \Delta \epsilon)}{\exp(-\beta \Delta \epsilon) - \exp(\alpha \Delta \epsilon)} \quad (15)$$

$$\frac{\partial R}{\partial \beta} = \frac{\Delta \epsilon \exp(-\beta \Delta \epsilon)}{\exp(\alpha \Delta \epsilon) - \exp(-\beta \Delta \epsilon)} \quad (16)$$

$$\frac{\partial R}{\partial \beta} = \frac{-\Delta \epsilon \exp(-\beta \Delta \epsilon)}{\exp(-\beta \Delta \epsilon) - \exp(\alpha \Delta \epsilon)} \quad (17)$$

از معادله ۱۰ خواهیم داشت:

$$\ln I_c = \frac{1}{N} \left[\sum_{n=1}^N (\ln |i_n| - R_n) \right] = S(\alpha, \beta) \quad (18)$$

بنا براین:

$$I_c = \pi \left(\frac{|i_n|}{\exp R_n} \right)^{1/N} \quad (19)$$

این رابطه، روشی برای محاسبه I_c میدهد که عمومیت بیشتری نسبت به روش خطی دارد، زیرا هیچگونه محدودیتی در شکل هندسی و یا دامنه فاصله $\Delta \epsilon$ را بوجود نمی‌آورد. امکان آنالیز یک منحنی پلاریزاسیون تجربی، برای تعیین پارامترهای الکتروشیمیائی α و β از طریق حل دو معادله غیرخطی (۱۱) و (۱۲) بدین ترتیب فراهم می‌شود.

$$H_1 = \sum_{k=1}^N [\ln |i_k| - S(\alpha, \beta) - R_k (R_{k,\alpha} + S_\alpha)] = 0 \quad (20)$$

$$H_2 = \sum_{k=1}^N [\ln |i_k| - S(\alpha, \beta) - R_k (R_{k,\beta} + S_\beta)] = 0 \quad (21)$$

که در آن S_α و S_β مشتقهای جزئی S با نسبت $\frac{\partial S}{\partial \alpha}$ و $\frac{\partial S}{\partial \beta}$ است. در نرم افزار CKS، حل دو معادله غیرخطی فوق به روش تیلور انجام گرفته است.

۲-۲ روش خطی

وقتی تغییرات پتانسیل در فاصله $10 - 10$ میلی ولت باشد، تغییرات پتانسیل بر حسب جریان، رفتار خطی داشته و چگالی جریان خود را از رابطه ۲۲ بدست می‌آید.

$$I_{\text{corr.}} = \frac{1}{2.303} \frac{b_a |v_o|}{b_a + |b_c|} \left(\frac{\partial i}{\partial \epsilon} \right) \epsilon_{\text{corr.}} \quad (22)$$

در صورت استفاده از α و β با تعاریف قبلی داریم:

$$I_{\text{corr.}} = (\alpha + b)^{-1} R_p^{-1} \quad (23)$$

R_p مقاومت پلاریزاسیون می‌باشد و در صورت استفاده از شیوه بهترین انطباق بر یک معادله خطی، از رابطه ۲۴ بدست خواهد آمد. در صورت معلوم بودن پارامترهای α و β و محاسبه R_p ، با داشتن یک سری زوج $I, \Delta\epsilon$ در محدوده $10 - 10$ میلی ولت $I_{\text{corr.}}$ محاسبه می‌گردد.

$$R_p = \frac{\sum_{k=1}^N (\Delta E_k)^2}{\sum_{k=1}^N i_k \Delta E_k} \quad (24)$$

اگر واکنش کاتدی بوسیله نفوذ کترل شود، رابطه ۲۳ بصورت زیر تبدیل خواهد گردید:

$$I_{\text{corr.}} = \alpha^{-1} R_p^{-P} \quad (25)$$

۲-۳ روش ۴ نقطه

در این روش تنها داشتن شدت جریان در ۴ نقطه از منحنی لازم بوده و نیازی به دانستن پارامترهای دیگر نمی‌باشد. اگر منحنی پلاریزاسیون از رابطه ۲ پیروی کند، عملیات جبری بر رابطه ۶ برای ۴ نقطه ΔE برای $\Delta\epsilon$ و $2\Delta\epsilon$ داشت:

$$I_{\text{corr.}} = \frac{I_1 I_{-1}}{\sqrt{I_2 I_{-2} - 4 I_1 I_{-1}}} \quad (26)$$

$$b_a = \frac{\Delta E}{\log \left\{ I_1 / I_{\text{corr.}} [1 - \exp(-(\Delta E / B))] \right\}} \quad (27)$$

$$b_c = \frac{b_a B \ln 10}{b_a - B \ln 10} \quad (28)$$

وقتی که :

$$B = \frac{\Delta E}{\cosh^{-1} \left[\left(I_2 I_{-2} / 2I_1 I_{-1} \right) - 1 \right]} \quad (29)$$

و I_1 , I_2 و I_{-1} , I_{-2} به ترتیب شدت جریان در پتانسیلهای ΔE , $-\Delta E$, $2\Delta E$ و $-2\Delta E$ - میباشد.

۳- کاربرد

خوردگی آهن آرمکو در اسید سولفوریک یک نرمال در دمای ۲۹۸ درجه کلوین به مدت ۲ ساعت توسط جانکوسکی [۸] اندازه گیری شده و نتایجی مانند ارقام خلاصه شده در جدول ۱ را بدست داده است. مقایسه اطلاعات محاسبه شده، میزان دقت روش غیرخطی را آشکار می‌سازد. نتیجه آزمایش دیگری برای آهن آرمکو در اسید سولفوریک یک نرمال، بصورت منحنی پلاریزاسیون شکل ۱ گزارش گردیده است [۲]. با استفاده از زوچهای ۱ و ΔE پارامترهای خوردگی سیستم را به کمک نرم افزار ساخته شده در این تحقیق میتوان محاسبه کرد. نتیجه به شرح زیر است:

b_a	b_c	$I_{corr.}$
32.5	63.4	0.2

این ارقام تطابق خوبی را با اطلاعات تجربی شکل ۱ بازگو می‌کند.
منحنی پلاریزاسیون آهن در اسید سولفوریک ۰/۵ مولار در $pH = 7$ و محیط اکسیژن دار، برای سه زمان نگهداری مطالعه شده است [۳]. با استخراج زوچهای ۱ و ΔE محاسبه توسط روش غیرخطی خواهیم داشت:
الف - برای زمان نگهداری ۱۲ ساعت:

b_a	b_c	$I_{corr.}$
96.63	640.37	0.18

ب - برای زمان نگهداری ۲ ساعت:

b_a	b_c	$I_{corr.}$
131.78	467.03	0.18

ج : برای زمان نگهداری صفر:

b_a	b_c	$I_{corr.}$
257.2	1046	0.47

جدول ۱ - پارامترهای خودگی آهن در $\text{IN H}_2\text{SO}_4$

$\Delta\epsilon$ (mV)	مقدار اندازه گیری شده			مقدار محاسبه شده			روش ۳ نقطه			روش غیر خطی			
	جریان آندی	جریان کاتدی	b_a (mV)	b_c (mV)	I_1 (mA)	I_2 (mA)	I_{corr} (mA)	b_a (mV)	b_c (mV)	I_{corr} (mA)	b_a (mV)	b_c (mV)	I_{corr} (mA)
۸	۱/۹۵	۲/۶*	۱/۴۰	۱/۸	۰/۴/۹	۰/۴/۶	۰/۴/۸	۰/۲/۸	۱/۱/۲	۰/۷/۵	۰/۳/۰/۷	۱/۱/۱/۸	۰/۳/۰/۷
۱۰	۲/۱۰	۴/۷*	۰/۸*	۰/۵*	۰/۵/۱	۰/۱/۹	۰/۴/۴	۰/۲/۳	۰/۱/۷	۰/۲/۸	۰/۲/۷/۸	۰/۰/۵/۶۱	۰/۰/۵/۶۰
۱۲	۲/۰۵	۵/۸*	۰/۱*	۰/۱۰	۰/۱/۶	۰/۲۶۳	۰/۸/۲	۰/۲/۵	۰/۱/۶	۰/۲/۹	۰/۴/۰/۸	۰/۰/۶/۹	۰/۰/۶/۹
			مقدار متوسط			۰/۷/۲	۰/۱۸/۳	۰/۵/۸	۰/۲/۵	۰/۱۰/۳	۰/۳/۳/۱	۰/۰/۷/۹	۰/۰/۷/۹
			انحراف از میانگین (Standard Deviation)			۰/۳/۸	۰/۷/۳	۰/۰/۲۱	۰/۰/۳	۰/۰/۴	۰/۰/۴/۸	۰/۰/۰/۱۳	۰/۰/۰/۱۳

چگالی جریان خوردگی برای فولاد دارای ترکیب جدول ۲ در اسید سولفوریک یک نرمال براساس سه روش وزن سنجی، اکستراپلاسیون تفل و مقاومت پلاریزاسیون اندازه گیری شده است [۹]. نتایج حاصل در جداول ۳، ۴ و ۵ بیان شده است.

جدول ۲ - ترکیب شیمیایی فولاد مورد آزمایش

C	Si	Mn	S	P	Cr	Ni	Mo	Cu	Sn
0.25	0.24	0.76	0.02	0.02	0.03	0.05	0.01	0.09	0.01

جدول ۳ - I_{corr} برای فولاد در اسید سولفوریک به روش وزن سنجی

زمان غوطه وری	$I_{corr.}$ (mA/cm^2)
1	5.1 ± 0.9
2	5.6 ± 1.8
4	6.2 ± 2.2
8	6.9 ± 1.8
16	9.2 ± 5.2
24	9.4 ± 2.2

جدول ۴ - $I_{corr.}$ برای فولاد در اسید سولفوریک به روش اکستراپلاسیون تفل

زمان غوطه وری (ساعت)	b_a (mv)	b_c (mv)	$I_{corr.}$ (mA/cm^2)
1	75.5	205.4	8.7 ± 2.7
4	89	242.2	9.2 ± 2.4
8	63.8	175.2	6.7 ± 0.6
24	82	234.6	15 ± 2.9

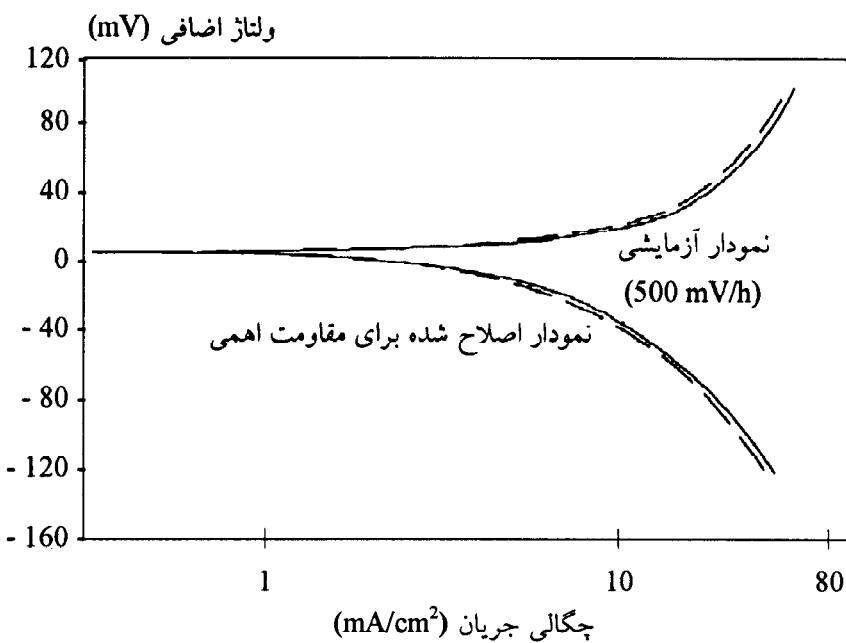
جدول ۵ - $I_{corr.}$ برای فولاد در اسید سولفوریک به روش مقاومت پلاریزاسیون

نوع پلاریزاسیون	زمان غوطه وری (ساعت)	مقاومت پلاریزاسیون ($\text{mV} / \text{cm} / \text{mA}$)	$I_{corr.}$ (mA/cm^2)
آندی	1	3	8 ± 0.1
کاتدی	1	3.5	6.8 ± 0.1
کاتدی	1	4.8	6 ± 0.1
کاتدی	8	3.8	7 ± 0.1
کاتدی	24	1.9	107 ± 0.1

با استفاده از روش غیرخطی و بكمک اطلاعات تجربی نشان داده شده در شکل ۳، ضرایب تفل و چگالی جریان خوردگی به شرح زیر تعیین شده است:

b_a	b_c	I_{corr}
76.92	268.92	8.94

از مقایسه این ارقام با اطلاعات تجربی و محاسبه شده قبلی (جدولهای ۳، ۴ و ۵)، دقت محاسبات CKS بروش غیرخطی آشکار میشود. در شکلهای ۴ تا ۶ نتیجه محاسبات CKS با منحنی های تجربی حاصل از آزمایش بر نمونه های برنجی و فولاد کربنی در محیط آبی [۱۰] مقایسه شده است. مقادیر مقایسه شده پارامترهای خوردگی، ذیل منحنی ها داده شده است.



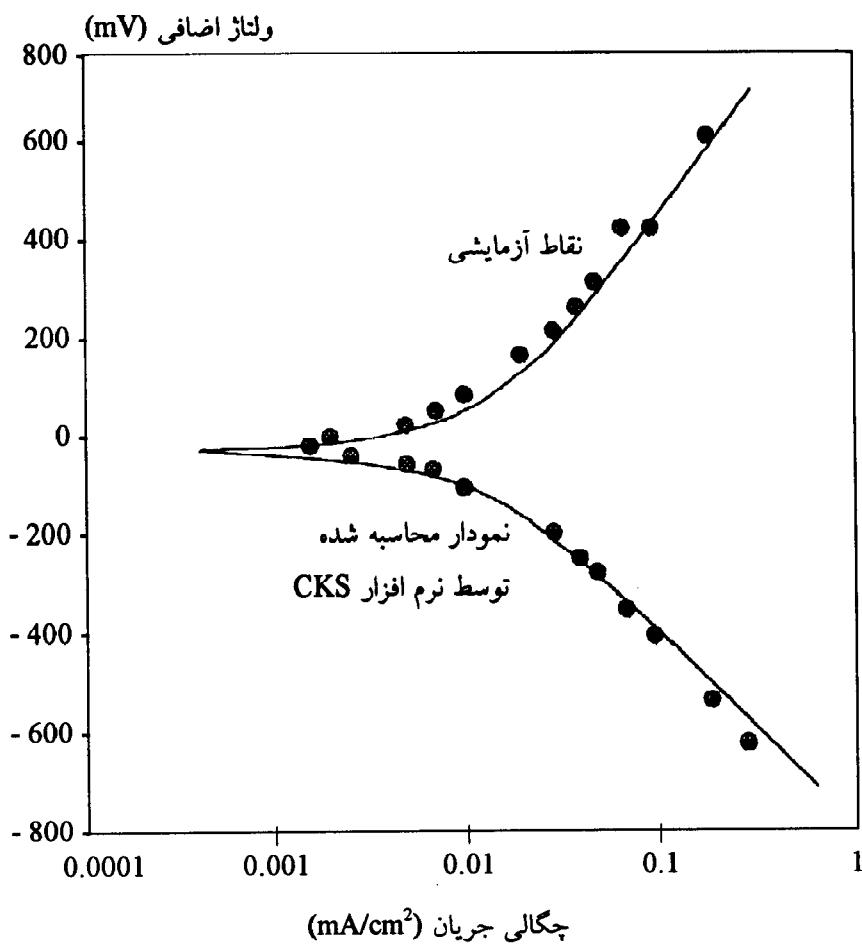
شکل ۳ - منحنی پلاریزاسیون فولاد در اسید سولفوریک 1N (بعد از چهار ساعت) [۹].

۴ - جمع بندی

به منظور محاسبه اطلاعات سیستمیکی فرایندهای خوردگی، نرم افزاری به نام CKS به زبان کلیپر در این تحقیق ساخته شده که نه تنها امکان محاسبه پارامترهای سیستمیکی خوردگی را در دسترس قرار میدهد، بلکه با ایجاد یک پایگاه داده ها، این امکان را نیز به کاربر میدهد که اطلاعات ورودی و همچنین نتایج حاصل از محاسبات را ذخیره و بازیابی نماید. اطلاعات ورودی برنامه مشتمل بر مشخصات محیط و فلز و زوچهای اندازه گیری شده Ω و ΔE است. نتایج مشتمل بر شیوهای آندی و کاتدی تفل و چگالی جریان خوردگی است.

مقایسه نتایج محاسبات انجام شده توسط نرم افزار با اطلاعات آزمایشی نشان میدهد :

- ۱ - تمام شیوه های بکارگرفته شده برای آنالیز عددی منحنی های پلاریزاسیون، در صورت استفاده از اطلاعات مناسب، سریعاً به جوابهای قابل قبول میرسند.
- ۲ - به دلیل عدم دخالت مهارتی شخصی، جوابهای بدست آمده از نرم افزار دقیقتر و قابل اعتمادتر از روش های متداول است.



شکل ۴ - مقایسه نتیجه اندازه گیری پلاریزاسیون آلیاژ برنج در محیط آبی [۱۰]
با مقادیر محاسبه شده توسط نرم افزار CKS

۳ - رابطه (۱۹)، تکنیکی برای محاسبه I_{corr} بدست میدهد که عمومیت بیشتری نسبت به روش‌های دیگر دارد، زیرا هیچگونه محدودیتی در شکل هندسی منحنی و یا دامنه فاصله ΔE قائل نمیشود.

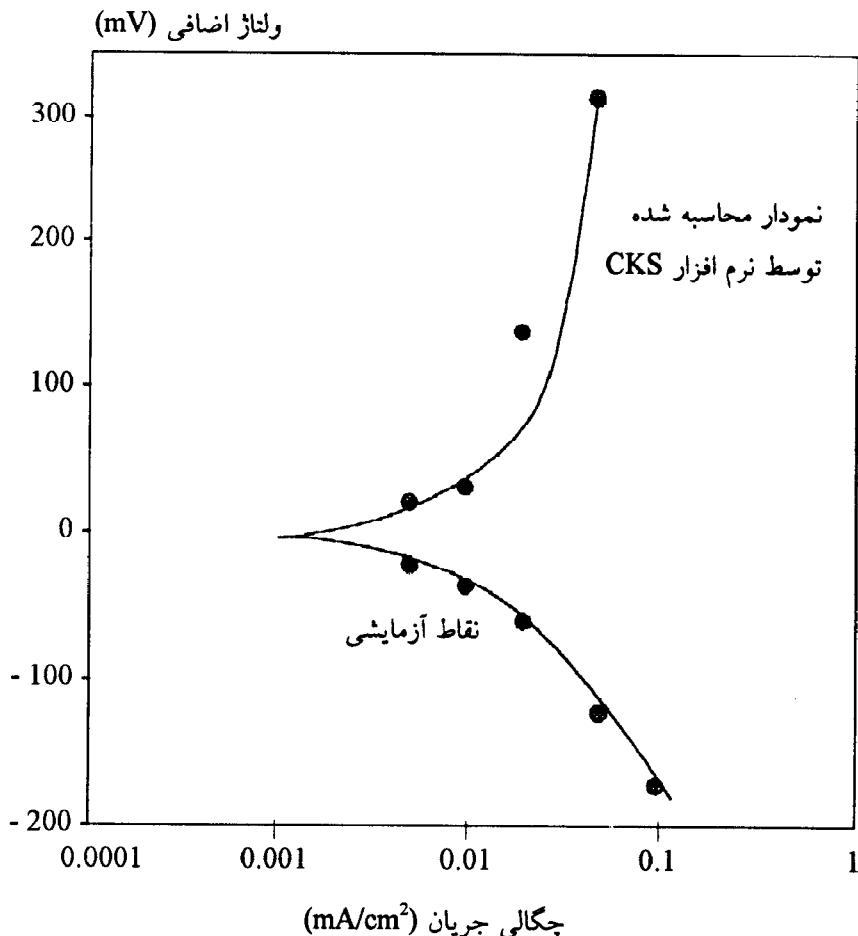
۴ - محاسبه توسط رابطه (۱۹) بدون در نظر گرفتن نقطه $0 = \Delta E$ انجام میگیرد.

۵ - روش غیرخطی به دلیل محاسبه همزمان ثوابت نقل، نسبت به روش خطی دارای قابلیت بیشتری است.

۶ - تابع f در روش غیرخطی براساس شناخت طبیعت فیزیکی مسئله ساخته شده و خود میتواند توجیه کننده اختلاف بین مقادیر تئوری و آزمایش باشد. مقادیر α و β معمولاً وابسته به درجه تابع f بوده که با تعداد و توزیع نقاط f_n موجود محاسبه میگردد.

۷ - نیاز نیست که تعداد نقاط مورد آزمایش زیاد باشد، بلکه بهتر است با افزایش فاصله از E_m چگالی نقاط زیادتر گردد، زیرا بالا بودن تعداد نقاط آزمایشی منجر به بالا رفتن زمان محاسبه میشود، بدون اینکه اطلاعات زیادتری حاصل گردد.

۸ - دیده میشود که وقتی $| \Delta E_m | \exp(Rn) \equiv (\alpha + \beta)$ باشد، تساوی ۱۹ به شکل زیر در خواهد آمد:



شکل ۵ - مقایسه نتیجه اندازه گیری پلاریزاسیون فولاد کربنی CST در محیط آبی [۱۰] با مقادیر محاسبه شده توسعه نرم افزار CKS

$$I_c = (\alpha + \beta)^{-1} \pi \sum_{n=1}^N \left(\frac{|in|}{|\Delta E_n|} \right)^{1/N} \quad (30)$$

که ارتباط مستقیم بین روش غیرخطی و روش مقاومت پلاریزاسیون برقرار مینماید.

- ۹ - از آنجا که داشتن بانک اطلاعاتی مناسب برای ذخیره و بازیابی اطلاعات سیستمهای خورده‌گی میتواند باعث بهره گیری بهتر و همگانی از آزمایشها تجربی گشته و باعث صرفه جویی و عدم تکرار آزمایش‌ها شود، لذا با توجه به تعداد پروژه‌های تحقیقاتی انجام شده در این زمینه، پیشنهاد میشود، استفاده از نرم افزار محاسباتی و بانک اطلاعاتی مناسب در آزمایشها، به عنوان یکی از مبانی کار قرار گیرد.

مراجع

- [۱] م. ر. صالح، "شیوه سازی سیتیک واکنشهای خوردگی"، پایان نامه کارشناسی ارشد، (استاد راهنما: سید خطیب الاسلام صدرزاد)، دانشکده فنی و مهندسی دانشگاه تربیت مدرس، ۱۳۷۴.
- [۲] G. Rocchini, "The Determination of Electrochemical Parameters by NOLI1 Method", Corrosion Science, Vol. 34, 1993, pp. 583-597.
- [۳] W. J. Loernz and F. Mansfeld, "Determination of Corrosion Rates by Electrochemical DC and AC Methods", Corrosion Science, Vol. 21, 1981, pp. 647-652.
- [۴] R. Bandy, "The Simultaneous of TAFEL Constants and Corrosion Rate - A New Method", Corrosion Science, Vol. 20, 1980, pp. 418-421.
- [۵] P. Hougaard and D. H. Britz, "Corrosion Rate Measurements and Calculations, Calculation of Error Limits and Transport Effects", Corrosion Science, Vol. 23, 1983, pp. 365-370.
- [۶] G. Rocchini, "A Numerical Method for the Evaluation of the Corrosion Rate of a Metal", Corrosion Science, Vol. 34, 1993, pp. 885-897.
- [۷] G. Rocchini, "The Determination of the Electrochemical Parameters by the Best - Fitting With Exponential Polynomials", Corrosion Science, Vol. 33, 1992, pp. 1773-1788.
- [۸] J. Jankowski and R. Juchiewicz, "A Four- Point Method for Corrosion Rate Determination", Corrosion Science, Vol. 20, 1980, pp. 421-427.
- [۹] F. G. Beetge and F. P. A. Robinson, "Instantaneous Corrosion Rate Measurement", Corrosion Science, Vol. 17, 1977, pp. 292-298.
- [۱۰] س. پهلوان یلی، "تحقیق و بررسی برای انتخاب بازدارنده مناسب غیررسمی برای آب خنک کن یک واحد صنعتی"، پایان نامه کارشناسی ارشد، مهندسی مواد، دانشگاه تربیت مدرس، ۱۳۷۴.