مجله بین المللی علوم مهندسی، جلد دوازدهم، شماره سوم، سال ۱۳۸۰، صفحه ۳۳-۴۳
دانشگاه علم و صنعت ایران

بانک اطلاعات سینتیک فرایند ها: نرم افزار KDM

سید خطیب الاسلام صدرنژاد و ابراهیم نجفی

دانشکده مهندسی و علم مواد، دانشگاه صنعتی شریف
تهران، ایران

چکیده: با پیشرفت تکنولوژی تولید و بکارگیری مواد، نیاز به نتایج دستاوردهای پژوهشی در مورد سینتیک فرایندها، روزبروز گسترش بیشتری یافته و ضرورت سازماندهی اطلاعات سینتیکی به نحوی که بازیابی مجدد آنها ساده باشد، آشکارتر شده است. امروزه دسترسی به معادلات سرعت و مکانیزم واکنشها در طراحی و بهینه سازی عملکرد راکتورهای تولید فلز اهمیت بسزایی دارد. برای هدفدار کردن تحقیقات آزمایشگاهی، ارائه روشهای نو برای ذخیره و جستجوی دستاوردهای گرانقیمت علمی، کاملاً ضروری است؛ علی الخصوص که این نوع اطلاعات معمولاً به صورتی غیر استاندارد ارائه شده و در مراکز مطالعاتی و کتابخانه های تخصصی با بازدهی کم انباشته می شوند. بر خلاف اطلاعات ترمودینامیکی که امروزه طبق روشهای جا افتاده و استاندارد ارائه میشوند، اطلاعات سینتیکی در خصوص مکانیزم و سرعت پیشرفت تحولات، معمولاً از پراکندگی و پیچیدگی شیوه های عرضه رنج می برند. نتایج آخرین تحقیقات انجام شده برای تشکیل یک بانک اطلاعات جامع سینتیکی، در این مقاله ارائه شده و در خصوص شیوه های تنظیم، تدقیق، ارائه و انتقال یافته های تجربی و نحوه محک زدن آنها با نظریه ها و قوانین موجود و نحوه بکارگیری شبکه اینترنت برای انتقال این اطلاعات، بحث خواهد شد.

کلید واژه ها: سینتیک، شبیه سازی، استاندارد سازی، فرایند، بانک اطلاعات سینتیکی

۱. مقدمه

دستیابی به اطلاعات سینتیکی یکی از مراحل بنیانی در اجرای هر فعالیت تحقیقاتی مرتبط با طراحی و ساخت یک ماده نو، یک فرایند جدید و یا یک تکنولوژی ابتکاری و مدرن است [۱]. در حال حاضر مطالب علمی مدون در این زمینه بسیار کمیاب، غالبا متناقض و در عین حال پراکنده هستند [۲]. بطوریکه استاندارد کردن روش تحقیق، ارائه، ضبط، دسته بندی و بازیابی این اطلاعات نه تنها خدمت مهمی به محققین رشته مهندسی مواد به حساب می آید، بلکه تأثیری اساسی در توسعهٔ صنایع تولید و آماده سازی فلزات و آلیاژ ها در سطح کشور و جهان خواهد داشت.

پیشرفت شبکه الکترونیکی و ورود اینترنت به مراکز علمی و تحقیقاتی سبب تغییر شیوه های سنتی انتقال اطلاعات و دسترسی به پایگاههای اطلاعات علمی بین المللی شده است. با وجود این پیشرفتها، استاندارد نبودن نحوه ارائه و عدم وجود دسته بندی در تدوین اطلاعات سینتیکی، سبب آشفتگی بیش از حد یافته های ارزشمند علمی و دشواری بازیابی و استفاده از این نوع اطلاعات شده است. تشکیل بانک اطلاعات سینتیکی، گام مثبتی در جهت حل معظل کمبود دسترسی به منابع علمی در خصوص فرایند های قابل استفاده توسط صنعت روز دنیا محسوب می شود [۳].

به علت پراکندگی و تناقض اطلاعات سینتیکی موجود، طراحی فرایند های تولید و آماده سازی مواد معمولاً با در نظر گرفتن درصد های خطای فراوان ومیزان بازدهی کوچک صورت میگیرد. برای کاهش پیش فرضهای اساسی و افزایش راندمان فرآیندها، لازم است اطلاعات موجود در خصوص مکانیزم و سرعت واکنشها به شیوه ای نو و منطبق با نیازهای اساسی روز طراحی و ارائه شوند؛ بنحوی که استفاده از دانش جدید اطلاع رسانی در انتقال و بازیابی داده ها ملحوظ شده باشد.

تحقیق در مورد شبیه سازی فرایندهای کاربردی قبلاً انجام شده [۴،۳]؛ اما به دلیل پراکندگی داده ها، وسعت کار و محدودیت وقت و امکانات، ایجاد و تکمیل یک بانک اطلاعات سینتیکی جامع هیچگاه میسر نگردیده است. پیشرفت روشها و ابزار و ارائه نتایج تحقیقاتی نو در سالهای اخیر، لزوم طراحی و ساخت یک بانک اطلاعات اینترنتی را در زمینه سینتیک فرایندها به اثبات رسانده است [۵].

هدف این تحقیق ساختن نرم افزار جدیدی است که با استفاده از آخرین امکانات نرم افزاری و سخت افزاری موجود، قادر به ثبت وضبط معادلات سینتیکی واکنشها بصورتی استاندارد و قابل بازیابی سریع باشد. هم اکنون تعداد قابل توجهی مقاله و نوشته علمی منتشر شده در مجلات و کتب علمی معتبر وجود دارد که لازم است از طریق انطباق یافته های تجربی مربوط به پدیده سرعت در فرآیند های مهندسی مواد و متالورژی با اصول نظری حاکم بر آنها، در مورد صحت و سقم اطلاعات ارائه شده، کنکاشی همه جانبه انجام شود.

در این تحقیق، از روشهای محاسباتی بمنظور پر کردن حفره های خالی، محک زدن داده ها و تصحیح و تکمیل یافته های کمی سینتیکی به عنوان ابزار نیرومندی برای تشخیص صحت نتایج در هنگام مواجهه با اطلاعات متناقض، استفاده شده است. در نهایت لازم است موارد اشکال و ابهام بطریق تجربی و آزمایشی تحقیق و نتیجه بصورت یک پایگاه اطلاعات سینتیکی ارائه شود. اگر چه تعمیم این تحقیق به سایر تحولات نیز کاملا میسر است، اما به منظور پرهیز از توسعه و پیچیده شدن بیش از حد کار، پژوهش فعلی بیشتر فرایند های دارای کاربرد در زمینه های تولید و بکار گیری مواد فلزی را پوشش می دهد.

۲. سابقه

نرم افزار های ساخته شده در مورد سینتیک واکنشها بسیار محدود و مختص شرایط و تحولات خاص هستند. نرم افزار SMAK برای مثال توسط محققین مرکز تحقیقات مواد معدنی برای پیرومتالورژی بمنظور محاسبه سینتیک واکنشهای بین فلز، سرباره و گاز در فرآیند های ذوب و تصفیه فلزات استفاده شده است [۴]. کمپانی فولاد Nippon برای کنترل عملیات گوگردزدایی و فسفرزدایی از آهن خام بطور موفقیت آمیز از این نرم افزار استفاده کرده است [۶]. این نرم افزار در عین حال از محدودیتهای فراوانی رنج می برد. برای مثال کمبود اطلاعات در مورد اکتیویته فلزات، اکسیدها و سولفیدهای موجود در فازهای موجود در راکتورهای ذوب و تصفیه فلز بعلاوه مشکلات مربوط به نحوه محاسبه سرعت تحولات بین فلزی، ضرورت توسعه و تکمیل SMAK را برای استفاده های بعدی در طراحی فرایند آشکار ساخته است [۷].

نرم افزار CRS برای محاسبه معادله سرعت و مکانیزم واکنشهای گاز-جامد برای قطعات غیر متخلخل قبلاً ساخته شده است [۸]. فرم کاملتر این نرم افزار مشتمل بر واکنشهای گاز- جامد برای کلیه قطعات اعم از متخلخل و غیر متخلخل، MKS نام گرفته و در جای خود بدان پراخته شده است [۹]. نرم افزار MKS مشتمل بر دو قسمت مجزا یکی برای انجام محاسبات ریاضی بمنظور تعیین معادله کلی سرعت و انتخاب نزدیکترین مکانیزم و دیگری برای ضبط، نگهداری و دسته بندی اطلاعات سینیتکی در مورد فرایند های متالورژی و مهندسی مواد است. بانک اطلاعاتی این نرم افزار مشتمل بر فایلهای اطلاعاتی برای ذخیره، دسته بندی و بازیابی اطلاعات سینتیک مربوط به فرایندهای همگن، غیر همگن و الکتروشیمیایی است.

به غیر از فعالیتهای شبیه سازی فوق، نرم افزار کامپیوتری دیگری که بتواند نسبت به محاسبه یا ذخیره اطلاعات سینتیکی فرایندهای کاربردی عمل کند تاکنون ارائه نشده است. علیهذا با توجه به کمبود نرم افزار و ضعف برنامه های محاسباتی در توجیه شرایط واقعی عملیات در فرایندهای پیچیده و متنوع متالورژی و مهندسی مواد همراه با عدم هماهنگی در شیوه ثبت و نگهداری یافته ها، لزوم طراحی و ساخت نرم افزارهای قابل و قادر در این زمینه آشکار می شود.

۳. روش تحقیق

فلوچارت روش تحقیق در شکلهای ۱ و ۲ آمده است. برای جمع آوری اطلاعات از سه طریق ۱ـ جستجو بوسیله دیسکهای نوری، ۲ـ بررسی منابع کتابی و ۳ـ جستجوی پایگاههای اینترنتی اقدام شد. دسته بندی اطلاعات بطریق کل به جزء و مطابق با نیمه پائینی فلوچارت شکل ۱ انجام شد. بازیابی اطلاعات بر اساس فهرستهای الفبایی از داده های ذخیره شده گوناگون همچون عنوان مقاله، اسم محقق، تاریخ انتشار، نشانی مجله، شماره ثبت اختراع، کلید واژه ها، نوع واکنش، مکانیزم فرایند، درجه واکنش، ثابت سرعت، انرژی تحریک، فاکتور فرکانس و نام ماده انجام شد. برای استاندارد کردن شیوه جمع آوری، رده بندی و ارائه اطلاعات، فرمتهای مختلف مورد ارزیابی قرار گرفت که در نهایت، کاملترین آنها بصورت شکل ۳ مورد استفاده قرار گرفت.

برای ساخت نرم افزار مورد نیاز، برنامه های مختلف کامپیوتری از جمله ویژوال بیسیک[۱]، فاکس پرو[۲]، کلیپر[۳] و دلفی ۳[۴] مورد بررسی قرار گرفتند. حسن زبان کلیپر در اینست که در گذشته برای شبیه سازی سینتیک فرایند، توسط همین محققین مورد استفاده قرار گرفته؛ اما بلحاظ محدودیت در سرعت بویژه در ارتباط با محاسبات مربوط به الگوسازی [۱] (جدول ۱) و قابلیت ایجاد برنامه بشیوه تودر تو[۵] ، در اینجا، مورد استفاده مجدد قرار نگرفت.

با استفاده از برنامه دلفی تحت سیستم عامل ویندوز[۶] و شیوه پیشرفته تودرتو، برنامه کامپیوتری مربوط به تشکیل بانک اطلاعات سینتیک واکنشها ساخته شد. حسن دلفی، بصری[۷] بودن، کاربردی بودن، قدرت محاسباتی بالا، توان ذخیره فراوان، قابلیت سازماندهی پایگاه اطلاعات[۸] ،کار تحت ویندوز و توان مدیریت بر حافظه برای کم حجم کردن برنامه بود.

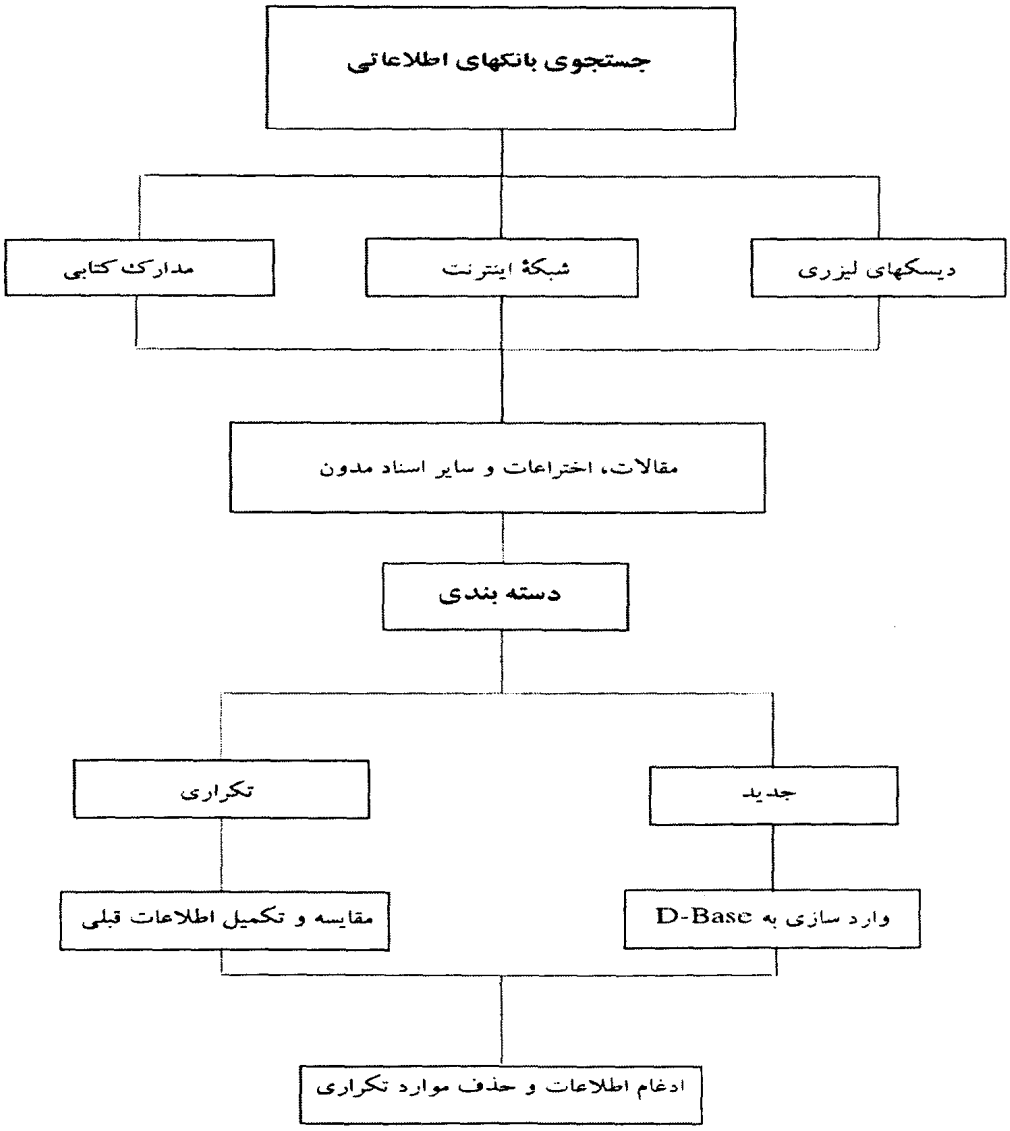
برای این منظور، برنامه گرافیکی **KDM** در دو ویرایش یکی برای وارد کردن و دیگری برای استخراج اطلاعات نوشته شد و بصورت ۳۲ بیتی کامپایل گردید. این برنامه که از سرعت و دقت نسبتا" بالایی برخوردار است، هم اکنون حاوی داده های سینتیکی بیش از ۲۰۰ فرایند کاربردی و صنعتی در زمینه مهندسی مواد و متالورژی است. برخی از این داده ها عبارتند از معادله فرایند، ثابت سرعت، درجه واکنش، فاکتور فرکانس، انرژی تحریک، نوع فرایند (مقدماتی، پیچیده، همگن، غیرهمگن، شیمیایی، الکترو شیمیایی، فتوشیمیایی، زنجیری، غیرزنجیری، پی در پی، موازی، کاتالیزوری، غیرکاتالیزوری و ...)، محدوده های فیزیکی، شیمیایی و الکتریکی پوشش داده شده، مکانیزم، مراحل، سرعتهای نسبی و در نهایت آدرس مراجع ارائه دهنده اطلاعات که به کمک بسته اول وارد پایگاه شده و آن را کاملتر می کنند.

دو نمونه از پنجره های باز شده پس از اجرای فرمان نمایش[۹] در نرم افزار **KDM** در شکلهای ۴ و ۵ نشان داه شده اند.

1- Visual Basic
2- Fox-Pro
3- Clipper
4- Delphi
5- Hypertext
6- Windows
7- Visual
8- D-Base
9- View

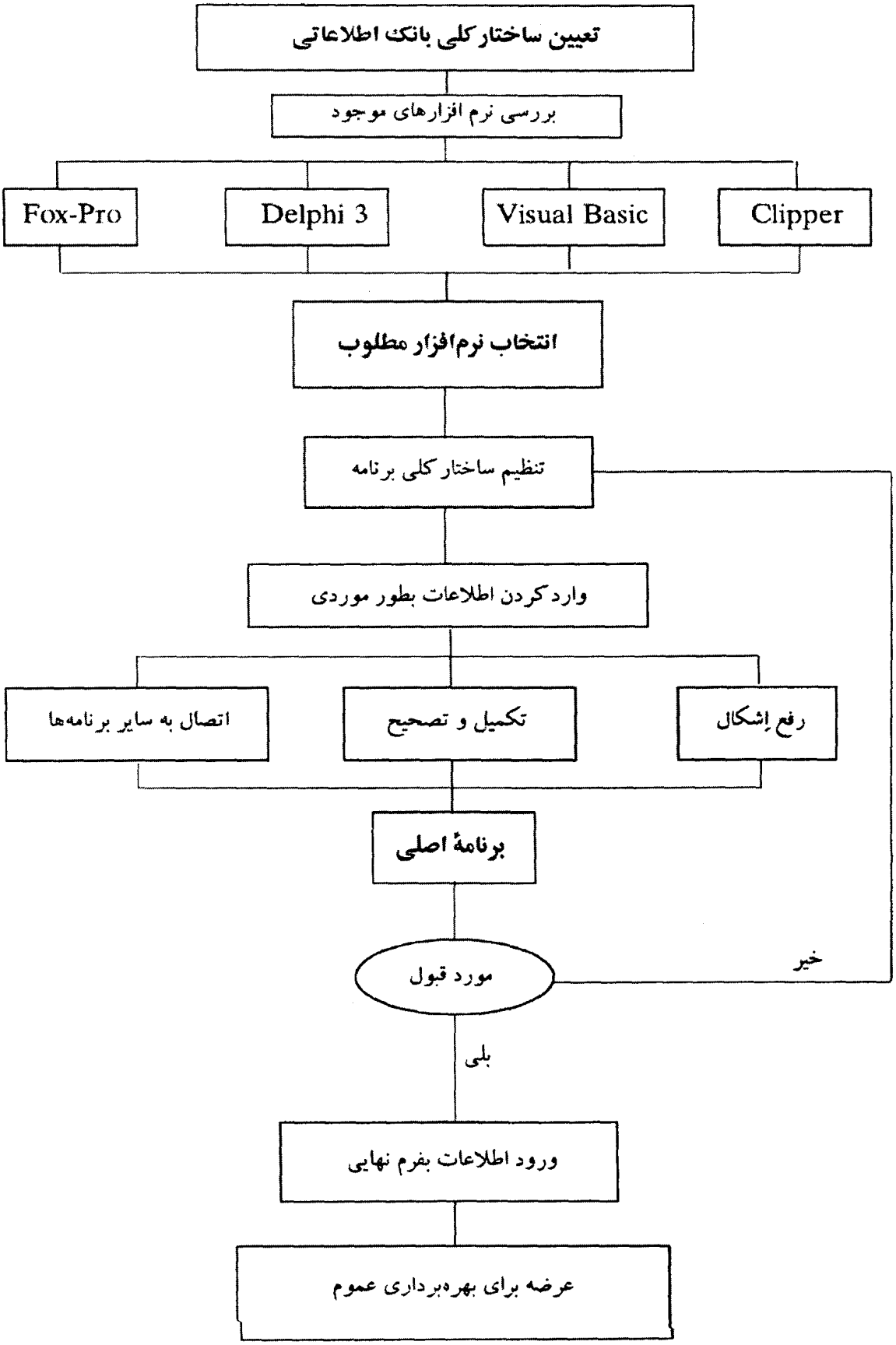
شکل ۴ فهرستی از برخی از واکنشهای شیمیایی ثبت شده در پایگاه داده ها و شکل ۵ اطلاعات سینتیکی مربوط به واکنش گاز هیدروژن با گاز دی اکسید فلور را نشان می دهد. اطلاعات بیشتر درباره هر یک از واکنشهای ثبت شده در پایگاه داده ها، از طریق انتخاب و اجرای فرمان مربوط به داده مورد نظر، قابل بازیابی است. نتایج حاصل قابل چاپ روی کاغذ است. تغییر یا اصلاح داده ها، با استفاده از بسته اول- برنامه ویراستار- میسر است.

بسته دوم، برای استفاده کاربرها طراحی شده و در نهایت بسته اصلی برنامه خواهد بود. در این ویرایش امکان جستجوی پایگاه بر اساس کلمات کلیدی، اسامی محققین، کاربردهای عملی و صنعتی، نوع واکنش، عوامل واکنش، نشانی مراجع، الگوهای سینتیکی و ... وجود داشته و با توجه به گسترش روزافزون فن آوری، کاربرد آن مرتباً توسعه خواهد یافت. انتخاب زبان و محیط برنامه نویسی، امکان دسترسی و بهره برداری مستقیم کاربران از طریق شبکه اینترنت را فراهم ساخته و احداث یک پایگاه اینترنتی[1] برای سرویس دهی مستقیم به کاربران نیز در حال طراحی و اجرا است.



شکل ۱- گردش کار مراحل جستجو، جمع آوری و دسته بندی اطلاعات طرح.

1- Web Site



شکل ۲- گردش کار مراحل ساخت و تکمیل نرم افزار مورد نیاز برای اجرای طرح.

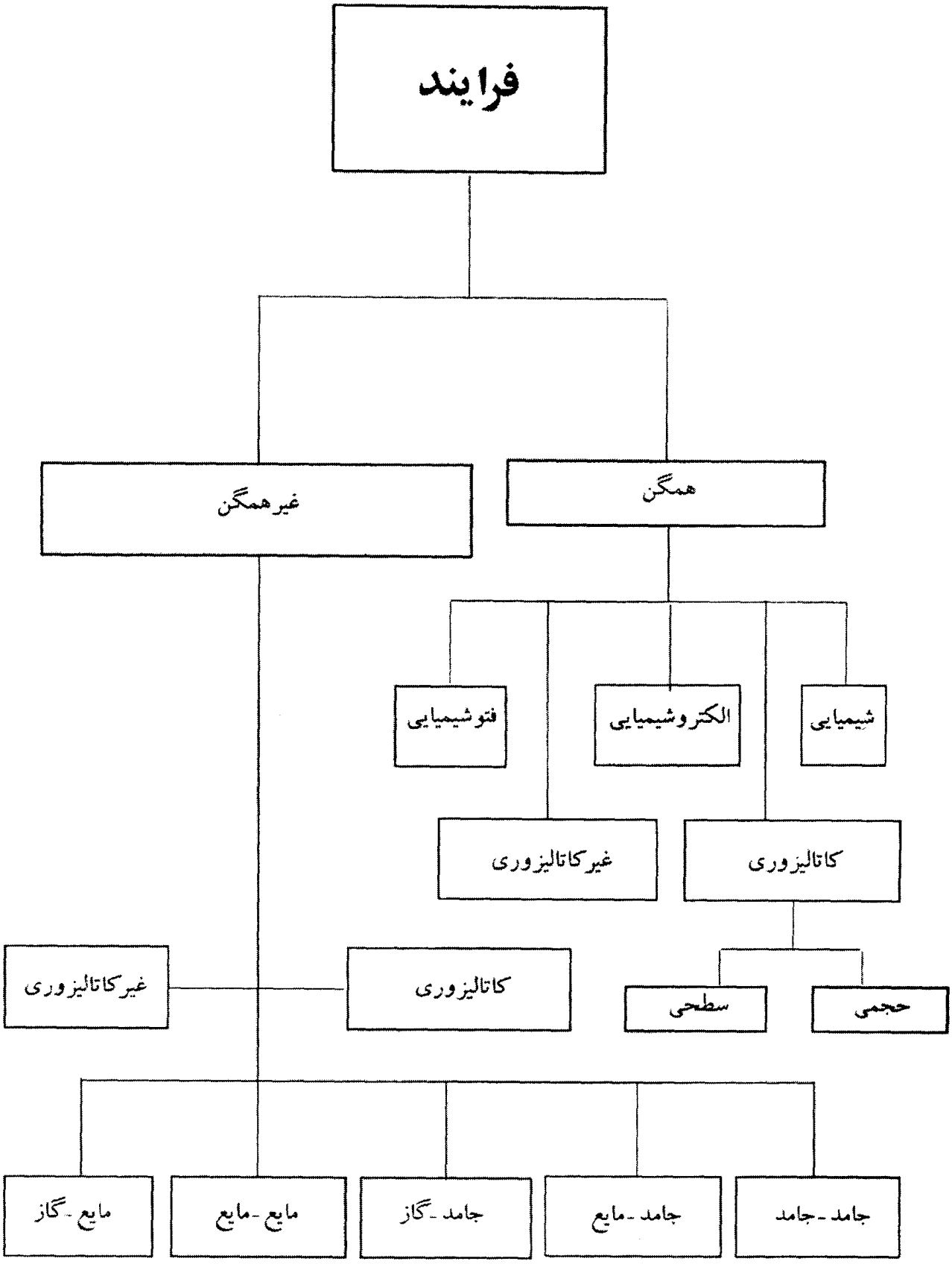
جدول ۱- نمونه هایی از الگوهای خرد[1] و کلان[2] برای واکنشهای همگن و غیر همگن ذخیره شده در پایگاه اطلاعات سینتیک فرایند [۱]

$A + B \rightarrow C$	$A \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} A^*$ $A + B \underset{k_4}{\overset{k_3}{\rightleftharpoons}} C^*$	$\frac{dC_C}{dt} = \frac{k_1 k_3 C_A C_B^2 - k_2 k_4 C_C}{k_2 + k_3 C_B}$
$2A + B \rightarrow A_2B$	$A + B \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} AB^*$ $AB^* + A \underset{k_4}{\overset{k_3}{\rightleftharpoons}} A_2B$	$\frac{dC_{A_2B}}{dt} = \frac{k_1 k_3 C_A^2 C_B - k_2 k_4 C_{A_2B}}{k_2 + k_3 C_A}$
$A_2 + B_2 \rightarrow 2AB$	$A_2 \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} 2A$ $A + B_2 \underset{k_4}{\overset{k_3}{\rightleftharpoons}} AB + B$ $A_2 + B \xrightarrow{k_5} AB + A$	$\frac{dC_{AB}}{dt} = \frac{2k_3 C_{B_2}\sqrt{\frac{k_1}{k_2}C_{A_2}}}{1 + \frac{k_4 C_{AB}}{k_3 C_{A_2}}}$
Non-Porous, Constant-Size	-	$t' = g_{F_g}(X) + \phi_g^2 . P_{F_g}(X) + \phi_g^2 . \frac{2}{Sh'} . q_{F_g}(X)$
Non-Porous, Variable-Size	$Z = \frac{\rho_B d M_D}{\rho_D b M_B}$	$t' = g_{F_g}(X) + \phi_g^2 . P_{F_g}(X) + \phi_g^2 . \frac{2}{Sh'} . q_{F_g}(X)$
Porous, with Constant- or Variable-Size Grains	$\phi_p^2 = \frac{(1-\epsilon)kF_p}{2D_e}\left(\frac{V_p}{A_p}\right)^2 \frac{A_p}{F_p V_p}$	$t' = g_{F_g}(X) + \phi_g^2 . P_{F_g}(X) + \phi_p^2 . P_{F_p}(X) + \phi_p^2 . \frac{2q_{F_p}(X)}{Sh'}$

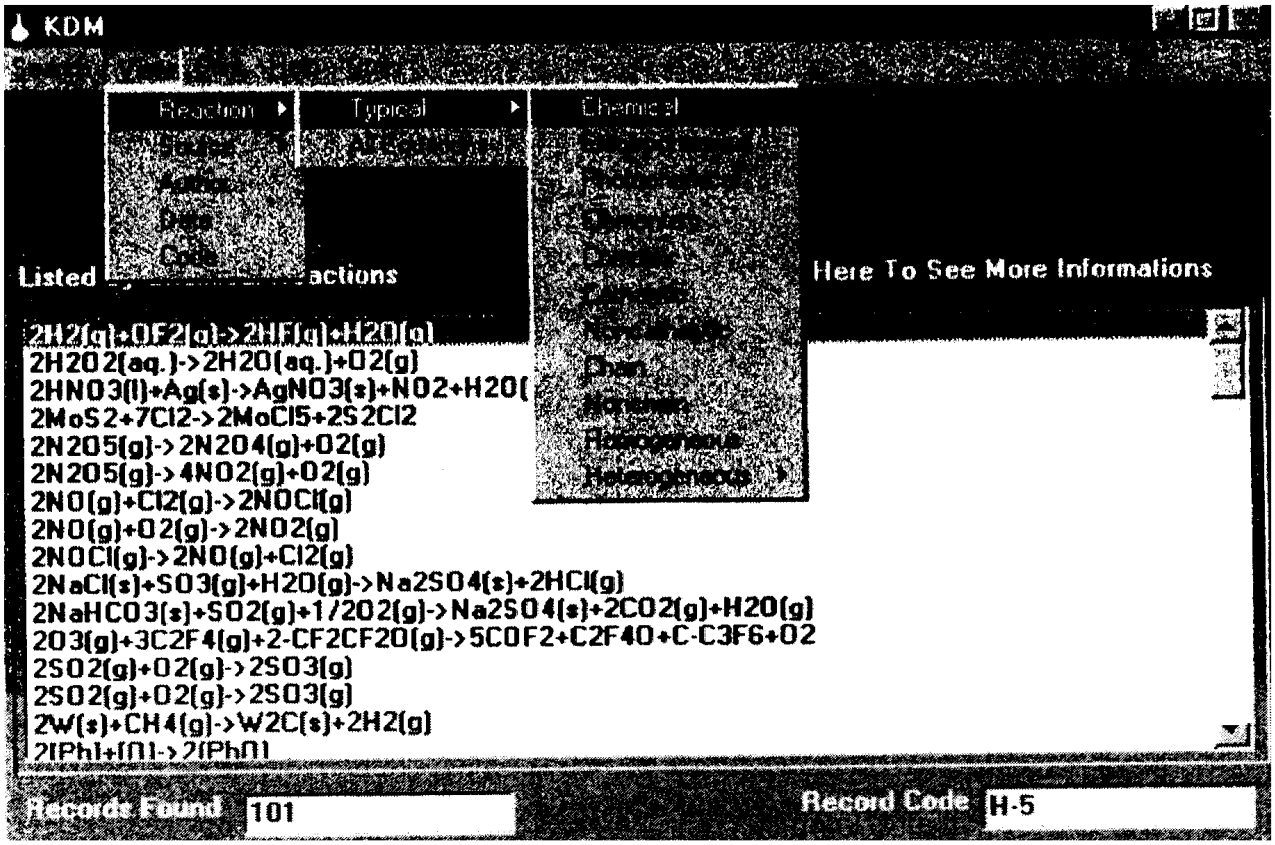
Geometry	Disc (Fg=1)	Cylinder (Fg=2)	Sphere (Fg=3)
$g_{F_g}(X)$	X	$1-(1-X)^{1/2}$	$1-(1-X)^{1/3}$
$p_{F_g}(X)$	X^2	$X+(1-X)\ln(1-X)$	$1+2(1-X)-3(1-X)^{2/3}$
$q_{F_g}(X)$	X	X	X
ϕ_g^2	$\frac{kV_g}{2D_g A_g}$	$\frac{kV_g}{2D_g A_g}$	$\frac{kV_g}{2D_g A_g}$
Sh^*	$\frac{h_D l_0}{D_g \vee D_e}$	$\frac{h_D r_0}{D_g \vee D_e}$	$\frac{h_D r_0}{D_g \vee D_e}$

1- Micro-model

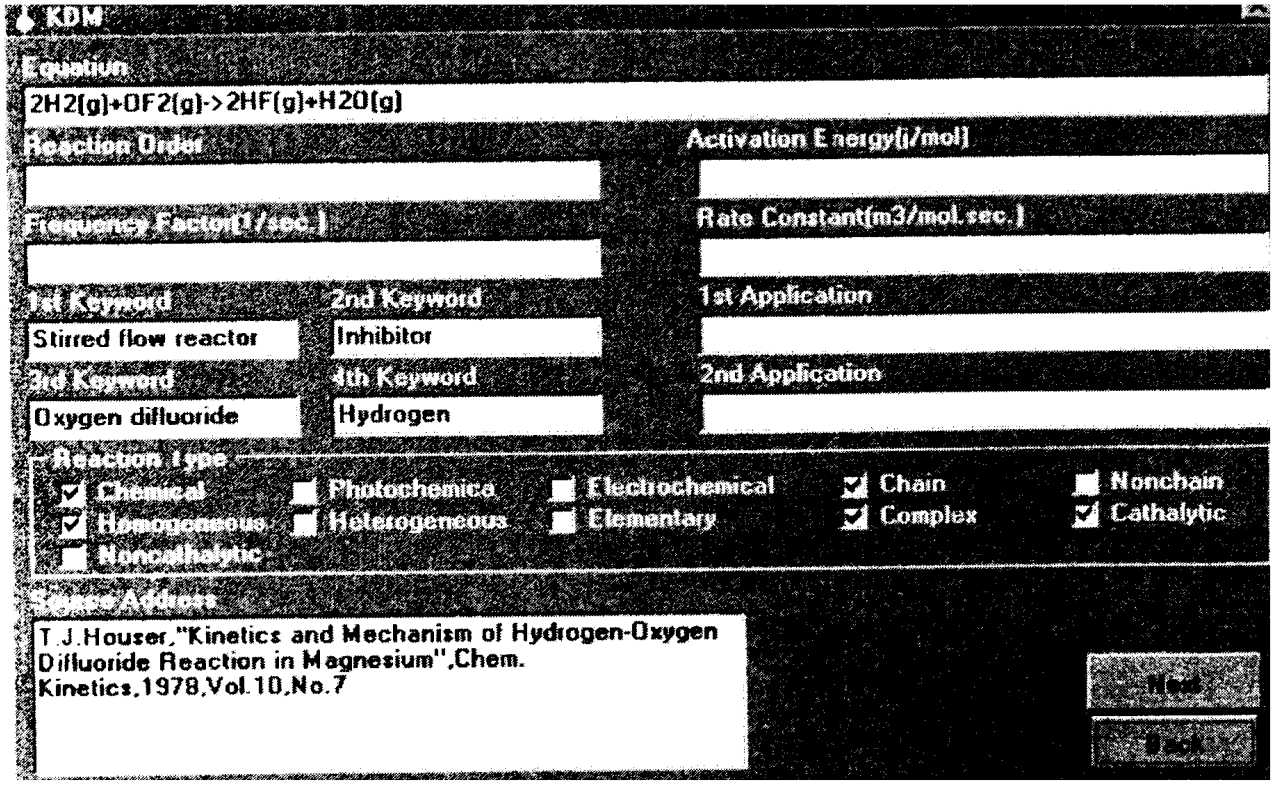
2- Macro-model



شکل ۳- تقسیم فرایند های سینتیکی در سر تیترهای کلی.



شکل ۴- نمونه ای از نتیجه جستجو در بانک اطلاعات سینتیکی بوسیله نرم افزار KDM برای یافتن واکنشهای شیمیایی.



شکل ۵- نمونه ای از نتیجه جستجو در بانک اطلاعات سینتیکی بوسیله نرم افزار KDM برای یافتن مشخصات یک واکنش همگن.

ارائه روز آمد اطلاعات سینتیکی از طریق شبکه اینترنت، مستلزم فعالیت دائم برای تکمیل، تصحیح و به روز کردن اطلاعات است. اطلاعات جمع آوری شده در سر تیترهای کلی تنظیم و برای استفاده در تکمیل بانک اطلاعاتی آماده سازی می شود. جستجوی سیستماتیک منابع کتابخانه ای مانند فهرست نامه ها[1] و چکیده نامه ها[2] ی مقالات[3] ، اختراعات[4] و گزارشهای علمی[5] و نیز پایگاه های معتبر اطلاعات علمی مانند Compendex Plus، Metadex، Scienec Citation Index و NTIS آغاز شده و همچنان ادامه دارد.

جمع آوری اطلاعات از طریق منابع کتابی، دیسکهای نوری و شبکه اینترنت، به روش جزء به کل در دست اقدام بوده و هر روز بر وسعت اطلاعات طبقه بندی شده افزوده می شود. دسته بندی و بازیابی اطلاعات به طریق کل به جزء و بر اساس فهرستهای الفبایی هر یک از داده ها (نوع واکنش، فرمول کلی، کلید واژه، کاربرد، مأخذ، مکانیزم، معادله سرعت، درجه واکنش، ثابت سرعت، انرژی تحریک، فاکتور فرکانس و نام ماده) صورت می گیرد. در این فعالیت تاکنون نزدیک به ۱۰۰۰ مقاله و اختراع جمع آوری شده و فرایند های مربوط دسته بندی و بررسی شده اند.

نمونه هایی از معادله های سرعت، برای واکنشهای همگن و غیر همگن در جدول ۱ فهرست شده اند [۱]. نحوه استفاده از این فرمولها برای ارزیابی اطلاعات تجربی به منظور تعیین مکانیزم فرایند در مرجعهای ۱۰ و ۱۱ شرح داده شده است. کنترل این نوع داده ها با استفاده از نرم افزارهای محاسباتی ساخته شده به همین منظور همچون CRS و MKS [۸] [۹] انجام می شود.

یکی از معیارهای قابل استفاده برای تست داده ها، معادله سرعت است. این معادله می تواند با کمک نرم افزارهای C RS و MKS و براساس داده های آزمایشگاهی و تجربی، ارزیابی شده و تأیید و یا رد شود. در این رابطه لازم است جزئیات شرایط آزمایش و فهرست داده ها به سبک مورد نیاز برای اجرای برنامه، قبلا مشخص گردند.

تلفیق اطلاعات واکنشهای همگن وغیر همگن موجود در بانکهای ساخته شده قبلی، مانند نرم افزار CRMS [۳] هم براساس عوامل واکنش و هم برطبق نام مرجع ارائه کننده اطلاعات امکان پذیر بوده و سبب تکمیل سریعتر داده ها خواهد شد. اینکار همچنین می تواند با استفاده از فهرست الفبایی واکنشهای موجود در حافظه CRMS، بر امکان وارسی و انتخاب سریع بیفزاید. فعالیتهای تحقیقاتی به منظور اصلاح، بهبود و تکمیل برنامه ها همزمان با استخراج وذخیره اطلاعات بیشتر در حال اجراست.

٤. نتیجه گیری

استاندارد سازی اطلاعات سینتیکی، نه تنها باعث آشکار شدن نارساییها وتناقضات موجود در ارائه این نوع اطلاعات می شود، بلکه امکان دسته بندی، ذخیره سازی و بازیابی مؤثر ومفید آنها را نیز فراهم می سازد. بنابر این تشکیل پایگاه اطلاعات سینتیکی بدون شک نیازمند در اختیار داشتن اطلاعات استاندارد شده ای است که قابلیت انطباق با معیارهای مشخص علمی برای تشخیص عیوب، تکمیل نواقص و رفع اشکالات از یک طرف و دسته بندی، ذخیره و بازیابی ساده و مستقیم اطلاعات را از طرف دیگر داشته باشد.

در این تحقیق سعی شده است نرم افزاری ساخته شود که باکمک آن، کاربر بتواند، در حداقل وقت، به جستجوی انبوهی از اسناد و مدارک علمی پرداخته و به اطلاعات سینتیکی مورد نیاز برای تحقیق، طراحی، ساخت و آموزش به راحتی و به فرمی استاندارد دست یابد. گسترش و پراکندگی یافته های علمی مربوط به سرعت و مکانیزم واکنشها که در کتب، مقالات و

1- Indexes
2- Abstracts
3- Journal/Conference Papers
4- Patents
5- Reports

پایگاههای علمی به چشم میخورد، فواید استفاده از نرم افزار حاصل را در ثبت، جستجو و بازیابی سریع، مؤثر، موجز و جامع این نوع اطلاعات بازگو میکند. نحوه تدوین برنامه براساس ذخیره و بازیابی اطلاعات سینتیکی با سرعت، دقت و استفاده حداقل از حافظه است. برای تحقق این هدفها، ضابطه های اساسی زیر در نظر گرفته شده اند:

۱- حداقل بودن میزان افزونگی برای کاهش حجم حافظه مورد نیاز و هزینه بهنگام سازی داده ها.
۲- دستیابی سریع برای حداقل کردن مصرف وقت توسط کاربران.
۳- امکان دستیابی اطلاعات از مسیرهای موازی، متقاطع و مخالف هم از طریق دیسک و هم از طریق شبکه.
۴- سهولت در عملیات بهنگام سازی.
۵- سهولت در نگهداری و روز آمد کردن سیستم.
۶- قابلیت بالای سیستم و وجود اطمینان به داده ها.
۷- امکان اتصال مستقیم برای جستجو پایگاه اطلاعات سینتیکی از طریق شبکه اینترنت.

پیشرفت سریع سیستمهای الکترونیکی و ایجاد امکان تماس مستقیم از طریق شبکه اینترنت، قابلیت مهم جدیدی را در اختیار نرم افزار قرار داده است؛ بطوریکه امکان استفاده از راه دور می تواند سبب افزایش تعداد کاربران و دامنه بکارگیری نرم افزار برای دستیابی به اطلاعات ارزشمند پایگاه شود. تحقق این هدف، در شرایط حاضر، بسیار آسان بوده و با کمک یک نرم افزار خدمت دهنده و یک پایگاه اینترنتی، امکان پذیر خواهد بود.

۵. قدردانی

از دانشجویانی که با مولفین در جمع آوری، طبقه بندی و تصحیح اطلاعات همکاری داشته اند و نیز معاونت پژوهشی دانشگاه صنعتی شریف بخاطر تصویب طرح بعنوان پروژه تحقیقات دانشگاهی قدردانی می شود.

مراجع

[۱] صدر نژاد، س. خ. و فرازپی، م.، "الگوهای سینتیکی گاز ـ جامد"، کارنامه پژوهشی شریف، متالورژی، ۱۳۷۳، ص ص ۱۴۶ – ۱۷۲.

[۲] صدر نژاد، س. خ. و فرازپی، م؛ "سینتیک واکنش H_2S با CaO در دمای $873^\circ K$ تا $1073^\circ K$"، نشریه دانشکده فنی، جلد ۳۳، شماره ۲، شهریور ۱۳۷۸، ص ص ۵۹-۶۴.

[۳] صدر نژاد، س. خ.، رضایی، م. و امیری، م. د.، "شبیه سازی سرعت در فرایند های کاربردی"، کارنامه پژوهشی شریف، ۱۳۷۲، ص ص ۱۰۶-۱۱۳ .

[۴] صدر نژاد، س. خ. "گزارش شرکت در چهارمین کنفرانس دو سالانه نرم افزار های کامپیوتری برای محاسبات متالورژی استخراجی و شیمیائی"، دانشکده مهندسی متالورژی ومعاونت پژوهشی دانشگاه صنعتی شریف، تیر ماه ۱۳۷۱.

[۵] صدرنژاد، س.خ. و فرازپی، م.، "کاربرد الگوی گاز ـ SO2 با CaO در دمای ۱۱۲۳ جامد برای بررسی سینتیک واکنش درجه کلوین": کارنامه پژوهشی شریف، متالورژی، ۱۳۷۴، ص ص ۱۰۸ـ۱۱۸.

[6] Robertson, D. G. C. and Nelson, C., "SMAK: Kinetics of Slag-Metal-Gas Reaction in Smelting and Refining", Fourth Biennial Conference on Computer Software for Chemical and Extractive Metallurgy Calculations, Missouri-Rolla, June 1992, p 25.

[7] Morris, A. E. and Stephenson, J. B., "Computer Software for Chemical and Extractive Metallurgy Calculation": Journal of Metals, 45, 1993, pp 29-31.

[8] Sadrnezhaad, K., Gharavi, A. and Morvarid, O., "Simulation of Kinetics of Chemical Reactions", Abstract Bulletin of Papers Presented in Fourth Biennial Conference on Chemical Metallurgy Calculations, Missouri – Rolla Univ., Missouri, 1992, p 26.

[۹] صدرنژاد، خ.، شریف، ح. گل آقایی، ح. ر. و ناصح زاده، ن.، "سینتیک احیاء مستقیم مولیبدنیت با هیدروژن"، کارنامه پژوهشی شریف، ۱۳۷۲، ص ص ۹۶-۱۰۵.

[۱۰] صدرنژاد، خ.، "فرایند های سینتیکی در مهندسی مواد و متالورژی"، انتشارات امیرکبیر، تهران، ۱۳۷۲.

[11] Mazet, N. and Spinner, B., "Modeling of Gas-Solid Reactions", Inter. Chem. Eng., Vol. 32, No. 3, 1992, pp 395-406.