

تشکیل بانک اطلاعات سینتیک فرایندها

سید خطیب‌الاسلام صدرنژاد (استاد)

ابراهیم نجفی (دانشجوی کارشناسی)

چکیده

با پیشرفت تکنولوژی تولید و به کارگیری 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 می‌شود. امروز دسترسی به معادلات سرعت و مکانیزم واکنشها برای بهبود طراحی و بهینه سازی عملکرد راکتورهای تولید فلز اهمیت خاصی دارد. برای هدفدار کردن تحقیقات آزمایشگاهی، ارائه روشهای نو برای جستجوی دستاوردهای گرانتقیمت قبلی، کاملاً ضروری است؛ علی‌الخصوص که این نوع اطلاعات معمولاً به صورتی غیر استاندارد ارائه شده و در مراکز مطالعاتی و کتابخانه‌های تخصصی با بازدهی کم انباشته می‌شوند. بر خلاف اطلاعات ترمودینامیکی که امروزه طبق روشهای جاافتاده و استاندارد ارائه می‌شوند، اطلاعات سینتیکی در خصوص مکانیزم و سرعت پیشرفت تحولات، معمولاً از کمبود روشهای استاندارد و پیچیدگی شیوه‌های ارائه رنج می‌برند. نتایج آخرین تحقیقات انجام شده برای تشکیل یک بانک اطلاعات جامع سینتیکی، در این مقاله ارائه شده و در خصوص شیوه‌های تنظیم، تدقیق، ارائه و انتقال یافته‌های تجربی و نحوه محک زدن آنها با نظریه‌ها و قوانین موجود و نحوه بکارگیری شبکه الکترونیکی برای انتقال این اطلاعات، بحث خواند شد.

کلمات کلیدی: سینتیک، شبیه سازی، استاندارد سازی، فرایند، بانک اطلاعات سینتیکی

مقدمه

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

پیشرفت شبکه الکترونیکی و ورود اینترنت به مراکز علمی و تحقیقاتی سبب تغییر شیوه‌های سنتی انتقال اطلاعات و دسترسی به پایگاههای اطلاعات علمی بین‌المللی شده است. با وجود این پیشرفتها، استاندارد نبودن نحوه ارائه و عدم وجود دسته‌بندی در تدوین اطلاعات سینتیکی، سبب آشفتگی بیش از حد یافته‌های ارزشمند علمی و دشواری بازیابی و استفاده از این نوع اطلاعات شده است. تشکیل بانک اطلاعات سینتیکی، گام مثبتی در جهت حل معضل کمبود دسترسی به منابع علمی در خصوص فرایندهای قابل استفاده توسط صنعت روز دنیا محسوب می‌شود [۳].



به علت پراکندگی و تناقض اطلاعات سینتیکی موجود، طراحی فرایندهای تولید و آماده سازی مواد معمولاً با در نظر گرفتن درصدهای خطای فراوان و میزان بازدهی کوچک صورت می‌گیرد. برای کاهش پیش‌فرضهای اساسی و افزایش راندمان فرایندها، لازم است اطلاعات موجود در خصوص مکانیزم و سرعت واکنشها به شیوه‌ای نو و منطبق با نیازهای اساسی روز طراحی و ارائه شوند. بنحوی که استفاده از دانش جدید اطلاع رسانی در انتقال و بازیابی اطلاعات ملحوظ شده باشد.

پروژه‌های تحقیقاتی قبلاً در مورد "شبیه سازی فرایندهای کاربردی" در دانشکده مهندسی متالورژی دانشگاه صنعتی شریف به مورد اجرا گذاشته شده است [۴،۳]. اما به دلیل محدودیت وقت و امکانات و همچنین وسعت کار، ایجاد و تکمیل یک بانک اطلاعات سینتیکی جامع هیچگاه میسر نشده است. پیشرفت روشها و ابزار و ارائه نتایج تحقیقاتی نو در سالهای اخیر، لزوم انجام کار تحقیقاتی فشرده‌تر در مورد بانکهای اطلاعاتی را 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 و ضبط 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 یافته‌های تجربی مربوط به پدیده سرعت در فرایندهای 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 پرکردن حفره های خالی، محک زدن داده‌ها و تصحیح و تکمیل یافته‌های کمتی سینتیکی به عنوان ابزار نیرومندی برای تشخیص صحت نتایج در هنگام مواجهه با اطلاعات متناقص، استفاده شده است. در نهایت لازم است موارد اشکال و ابهام بطریق تجربی و آزمایشی تحقیق و نتیجه بصورت یک بانک اطلاعات سینتیکی ارائه شود. اگر چه تعمیم این تحقیق به سایر تحولات نیز کاملاً میسر است، اما بمنظور پرهیز از توسعه و پیچیده شدن بیش از حد کار، پژوهش فعلی بیشتر فرایندهای دارای کاربرد در زمینه‌های تولید و به کارگیری مواد فلزی را پوشش می‌دهد.

سابقه

نرم افزارهای 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 فرایندهای ذوب و تصفیه فلزات استفاده شده است [۴]. کمپانی فولاد Nippon برای کنترل عملیات گوگردزایی 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 می‌برد. برای مثال کمبود اطلاع در مورد اکتیویته فلزات، اکسیدها و سولفیدهای موجود در فازهای موجود در راکتورهای ذوب و تصفیه فلز به علاوه مشکلات مربوط به نحوه محاسبه سرعت تحولات بین فلزی، ضرورت توسعه و تکمیل SMAK را برای استفاده‌های بعدی در طراحی فرایند آشکار ساخته است [۷].

نرم افزار CRS [۸] برای محاسبه معادله سرعت و مکانیزم واکنشهای گاز - جامد برای قطعات غیرمتخلخل قبلاً در دانشکده مهندسی متالورژی دانشگاه صنعتی شریف ساخته شده است. فرم کاملتر این نرم افزار مشتمل بر واکنشهای گاز - جامد برای کلیه قطعات اعم از متخلخل و غیرمتخلخل، MKS نام گرفته و قبلاً تهیه شده است. 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 دسته‌بندی اطلاعات سینتیکی در مورد فرایندهای متالورژی و مهندسی مواد است. بانک اطلاعاتی نرم افزار اخیر که MKSDB نام دارد مشتمل بر فایل‌های اطلاعاتی برای ذخیره، دسته بندی و بازیابی اطلاعات سینتیکی مربوط به فرایندهای همگن، غیرهمگن و الکتروشیمیایی است. بغیر از فعالیتهای شبیه‌سازی فوق، نرم افزار کامپیوتری دیگری که بتواند نسبت به محاسبه یا ذخیره اطلاعات سینتیکی فرایندهای



کاربرد عمل کند تاکنون ارائه نشده است. علیهذا با توجه به کمبود نرم افزار و ضعف برنامه‌های محاسباتی در توجیه شرایط واقعی عملیات در فرایندهای پیچیده و متنوع متالورژی و مهندسی مواد همراه با عدم هماهنگی در شیوه ثبت و نگهداری یافته‌ها، لزوم طراحی و ساخت نرم افزارهای قابل و قادر در این زمینه ها را آشکار می‌سازد.

روش تحقیق

فلوچارت روش تحقیق در شکل‌های ۱ و ۲ آمده است. برای جمع آوری اطلاعات از سه طریق ۱ - جستجو بوسیله دیسک‌های نوری، ۲ - بررسی منابع کتابی و ۳ - جستجوی بانک‌های اطلاعات بین‌المللی 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 داده‌های ذخیره شده گوناگون همچون عنوان مقاله، اسم محقق، تاریخ انتشار، نشانی مجله، شماره ثبت اختراع، کلید واژه‌ها، 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.

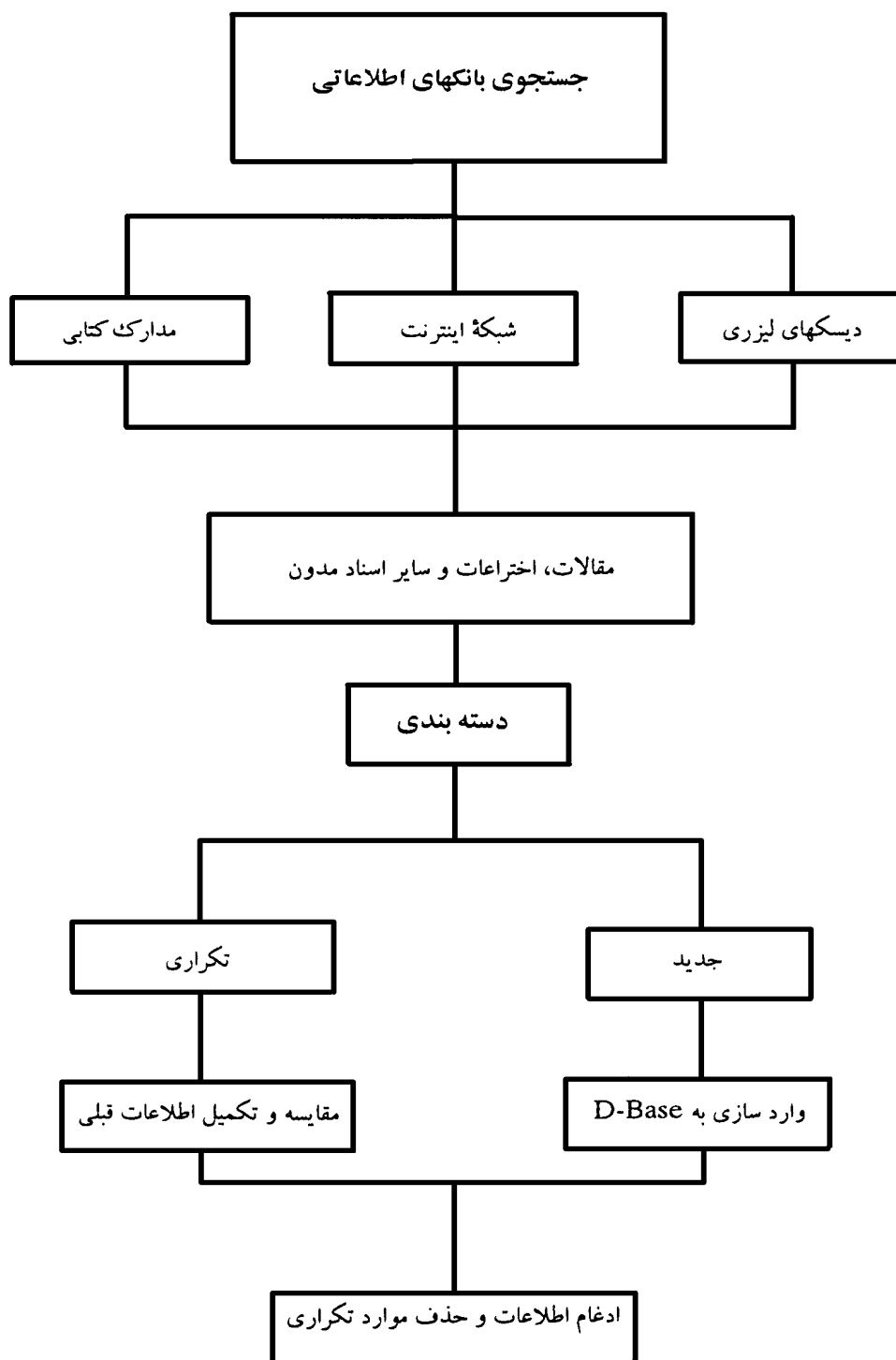
برای ساخت نرم افزار مورد نیاز، برنامه‌های مختلف کامپیوتری از جمله ویژوال بیسیک^۱، فاکس پرو^۲، کلیر^۳ و دلفی^۴ مورد بررسی قرار گرفتند. حسن زبان کلیر در اینست که در گذشته برای شبیه سازی سینتیک فرایند، توسط همین محققین مورد استفاده قرار گرفته؛ اما بلحاظ محدودیت در سرعت بویژه در ارتباط با محاسبات مربوط به الگوسازی [۱] (جدول ۱) و قابلیت ایجاد برنامه بشیوه تودرتو^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 و واکنشها، مطابق شکل ۴، ساخته شد. حسن دلفی، بصری^۷ بودن، کاربرد 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.

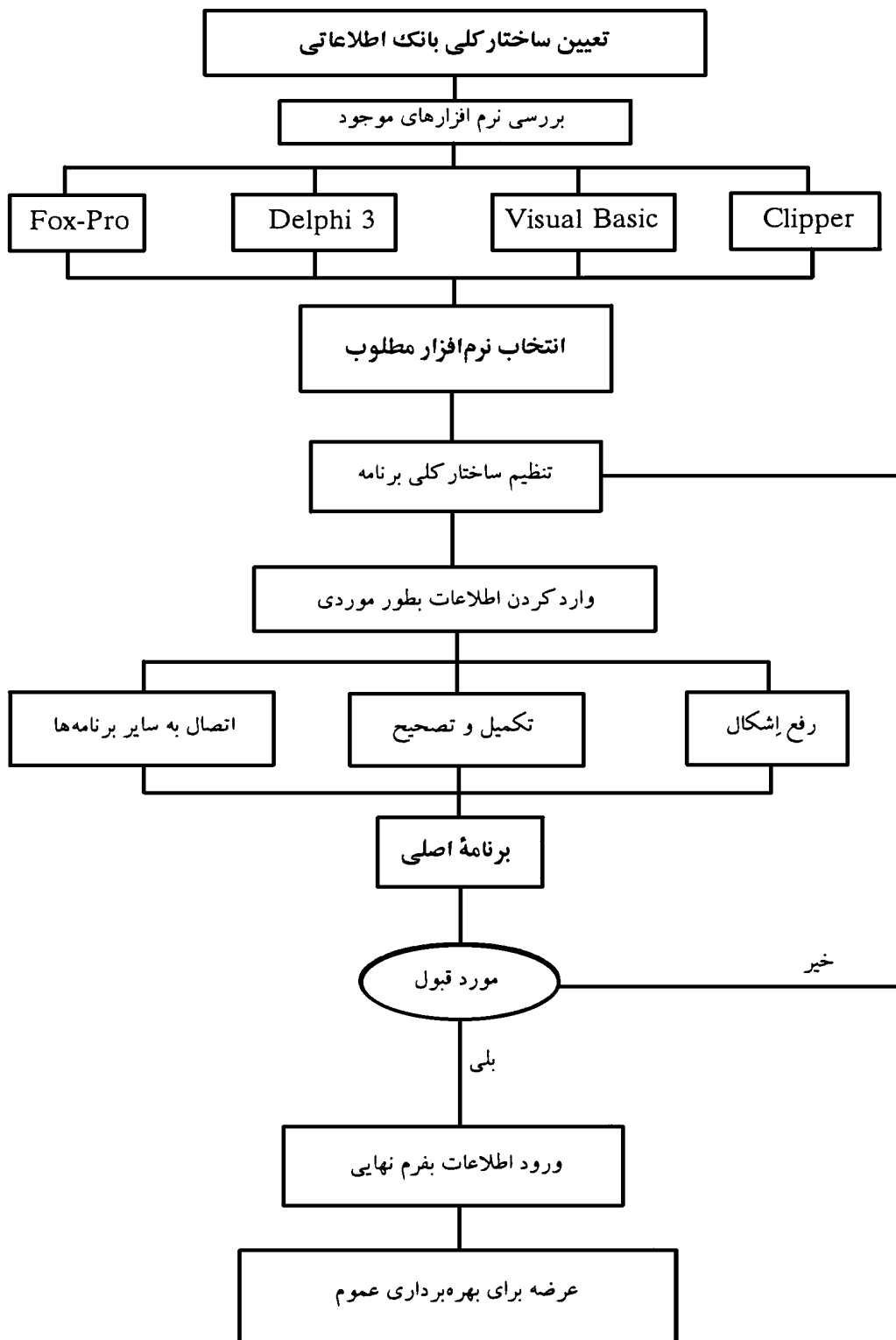
برای این منظور، برنامه‌های گرافیکی در دو ویرایش نوشته شد و بصورت ۳۲ بیتی کامپایل گردید. این برنامه‌ها که از سرعت و دقت نسبتاً بالایی برخوردارند، برای وارد کردن و استخراج اطلاعات تنظیم شده و دوران تکامل خود را طی می‌کنند. اطلاعات سینتیک از قبیل معادله فرایند، ثابت سرعت، درجه واکنش، فاکتور فرکانس، انرژی تحریک، نوع فرایند (مقدماتی، پسچیده، همگن، غیر همگن، شیمیایی، الکترو شیمیایی، فتوشیمیایی، زنجیری، غیر زنجیری، پی‌درپی، موازی، کاتالیزوری، غیر کاتالیزوری و ...)، محدوده‌های فیزیکی، شیمیایی و الکتریکی پوشش داده شده، مکانیزم، مراحل، سرعت‌های نسبی و در نهایت آدرس مراجع ارایه دهنده اطلاعات، به کمک ویرایش اول وارد پایگاه شده و آن را کاملتر می‌کنند. پنجره ورود اطلاعات، برای مثال، در شکل ۴ نشان داده شده است.

ویرایش دوم، برای استفاده کاربرها طراحی شده و در نهایت ویرایش اصلی برنامه خواهد بود. در این ویرایش امکان جستجوی پایگاه براساس کلمات کلیدی، اسامی محققین، کاربردهای عملی و صنعتی، نوع واکنش، عوامل واکنش، نشانی مراجع، الگوهای سینتیک 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 بهره‌برداری مستقیم کاربران از طریق شبکه اینترنت را فراهم ساخته و در صورت در اختیار داشتن یک کامپیوتر نسبتاً قوی برای جستجو^۹ و احداث یک پایگاه اینترنتی^{۱۰}، سرویس دهی مستقیم به کاربران نیز میسر خواهد شد.

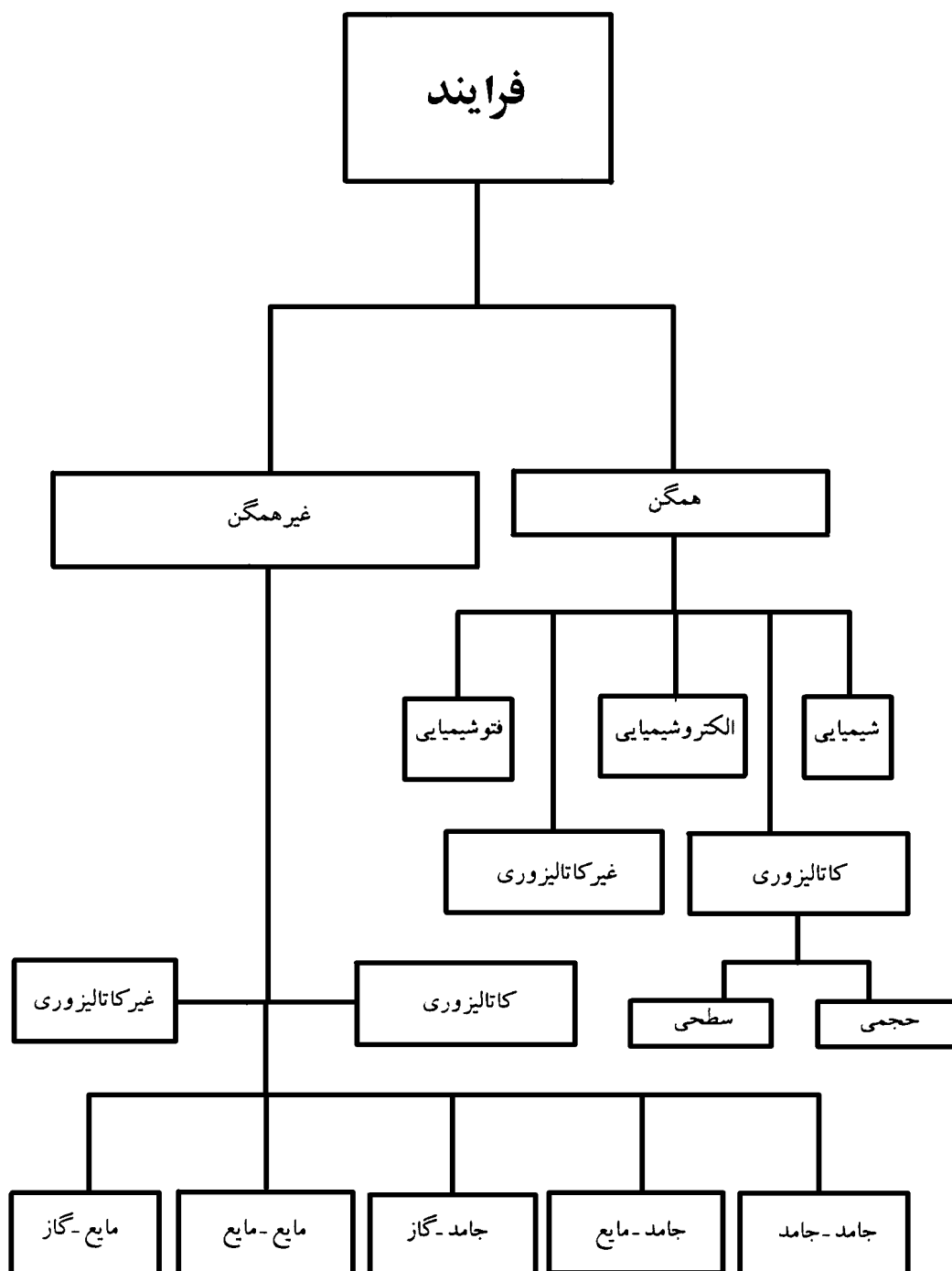
Clipper ۳	Fox-Pro ۲	Visual Basic ۱
Windows ۶	Hypertext ۵	Delphi ۴
Web Server ۹	D-Base ۸	Visual ۷
		Web Site ۱۰



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



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



شکل ۳ - تقسیم فرایندهای سینتیکی در سر تیرهای کلی.



جدول ۱. نمونه‌هایی از الگوهای خرد^{۱۱} و کلان^{۱۲} برای واکنشهای همگن و

غیرهمگن ذخیره شده در پایگاه اطلاعات سینتیک فرایند [۱].

$A + B \rightarrow C$	$\begin{array}{c} \xrightarrow{k_1} \\ A \rightarrow A^* \\ \xrightarrow{k_2} \\ A + B \rightarrow C^* \\ \xrightarrow{k_3} \\ \xrightarrow{k_4} \end{array}$	$\frac{dC_c}{dt} = \frac{k_1 k_3 C_A C_B^2 - k_2 k_4 C_c}{k_2 + k_3 C_B}$
$A_2 + B_2 \rightarrow 2AB$	$\begin{array}{c} \xrightarrow{k_1} \\ A_2 \rightarrow 2A \\ \xrightarrow{k_2} \\ A + B_2 \rightarrow AB + B \\ \xrightarrow{k_3} \\ \xrightarrow{k_4} \\ A_2 + B \rightarrow AB + A \end{array}$	$\frac{dC_{AB}}{dt} = \frac{2k_3 C_{B_2} \sqrt{\frac{k_1}{k_2} C_{A_2}}}{1 + \frac{k_4 C_{AB}}{k_3 C_{A_2}}}$
Non-Porous, Constant-Size	-	$t^* = g_{F_g}(X) + \phi_g^2 \cdot P_{F_g}(X) + \phi_g^2 \cdot \frac{2}{Sh^*} \cdot q_{F_g}(X)$
Non-Porous, Variable-Size	$Z = \frac{\rho_B d M_D}{\rho_D b M_B}$	$t^* = g_{F_g}(X) + \phi_g^2 \cdot P_{F_g}(X) + \phi_g^2 \cdot \frac{2}{Sh^*} \cdot q_{F_g}(X)$
Porous, with Constant- or Variable-Size Grains	$\phi_g^2 = \frac{(1-\epsilon)kF_p}{2D_s} \left(\frac{V_p}{A_p} \right)^2 \frac{A_g}{F_p V_g}$	$t^* = g_{F_g}(X) + \phi_g^2 \cdot P_{F_g}(X) + \phi_g^2 \cdot P_{F_p}(X) + \phi_g^2 \cdot \frac{2q_{F_p}(X)}{Sh^*}$

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	$\frac{k V_g}{2D_g A_g}$	$\frac{k V_g}{2D_g A_g}$	$\frac{k V_g}{2D_g A_g}$
Sh*	$\frac{h_D l_0}{D_g \sqrt{D_s}}$	$\frac{h_D r_0}{D_g \sqrt{D_s}}$	$\frac{h_D r_0}{D_g \sqrt{D_s}}$



1 Kinetic Simulator & D Base In Metallurgy

Reaction specifications ·

Reaction

Reaction order Activation energy

Freq. factor Rate constant

Reaction type

Chemical Electrochemical Elementary

Complex Homogeneous Heterogeneous

Chain Nonchain Catalytic

Noncatalytic

System type in heterogeneous reactions

Gas/Liquid Gas/Solid Liquid/Liquid

Liquid/Solid Solid/Solid

Catalytic reactions Autocatalytic Externalcatalytic

Catalyst

Keywords

1st 2nd

3rd 4th

Applications

1st

2nd

Source Proceeding Report Patent

Journal Book

Proceeding specification

Proceeding

Report specifications

Report Id

Patent specification

Serial no.

Country

Journal specification

Jour. name

Volume

Book specification

Book name

Page

Operator keys

Next Back

Last

شکل ۴ - پنجره ورود و ثبت اطلاعات به پایگاه داده‌های سینتیکی.



اطلاعات جمع آوری شده در سریتیرهای کلی تنظیم و برای استفاده در تکمیل بانک اطلاعاتی آماده سازی شد. جستجوی سیستماتیک منابع کتابخانه‌ای مانند فهرست‌نامه‌ها^{۱۳} و چکیده‌نامه‌ها^{۱۴}ی مقالات^{۱۵}، اختراعات^{۱۶} و گزارشهای علمی^{۱۷} و نیز پایگاههای معتبر اطلاعات علمی مانند Science Citation Index، Metadex، Compendex Plus 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 می‌شود. دسته بندی و بازیابی اطلاعات به طریق کل به جزء و براساس فهرستهای الفبایی هر یک از داده‌ها (نوع واکنش، فرمول کلی، کلید واژه، کاربرد، مأخذ، مکانیزم، معادله سرعت، درجه واکنش، ثابت سرعت، انرژی تحریک، فاکتور فرکانس و نام ماده) صورت می‌گیرد. این فعالیت نیز همچنان ادامه داشته و تاکنون نزدیک به ۱۰۰۰ مقاله و اختراع، جمع آوری شده و فرایندهای مربوط در حال دسته‌بندی و بررسی قرار دارند.

یکی از معیارهای قابل استفاده برای تست داده‌ها، معادله سرعت است. این معادله می‌تواند با کمک نرم افزارهای CRS و MKS [۸] و براساس داده‌های آزمایشگاهی و تجربی، ارزیابی شده و تأیید و یار د شود. در این رابطه لازم است جزئیات شرایط آزمایش و فهرست داده‌ها به سبک مورد نیاز برای اجرای برنامه، قبلاً مشخص گردند.

تلفیق اطلاعات واکنشهای همگن و غیرهمگن 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 داده‌ها خواهد شد. اینکار همچنین می‌تواند با استفاده از فهرست الفبایی واکنشهای موجود در حافظه CRMS، بر امکان واری و انتخاب سریع بیفزاید. فعالیتهای تحقیقاتی به منظور اصلاح، بهبود و تکمیل برنامه‌ها همزمان با استخراج و ذخیره اطلاعات بیشتر در حال اجراست.

نتیجه گیری

استاندارد سازی اطلاعات سینتیکی، تنها باعث آشکار شدن نارساییها و تناقضات موجود در ارائه این نوع اطلاعات می‌شود، بلکه امکان دسته‌بندی، ذخیره‌سازی و بازیابی مؤثر و مفید آنها را نیز فراهم می‌سازد. بنابراین تشکیل پایگاه اطلاعات سینتیکی بدون شک نیازمند در اختیار داشتن اطلاعات استاندارد شده‌ای 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 با کمک 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 یافته‌های علمی مربوط به سرعت و مکانیزم واکنشها که در کتب، مقالات و 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 بر اساس ذخیره و بازیابی اطلاعات سینتیکی با سرعت، دقت و استفاده حداقل، از حافظه است. برای تحقق این هدفها، ضابطه‌های اساسی زیر در نظر گرفته شده‌اند:

- ۱- حداقل بودن میزان افزونگی برای کاهش حجم حافظه مورد نیاز و هزینه بهنگام سازی داده‌ها.
- 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 روزآمد کردن سیستم.
 - ۶- قابلیت بالای سیستم و وجود اطمینان به داده‌ها.
 - ۷- امکان اتصال مستقیم برای جستجوی 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 نرم‌افزار قرار داده است؛ بطوریکه امکان استفاده از راه دور می‌تواند سبب افزایش تعداد کاربران و دامنهٔ بکارگیری نرم‌افزار برای دستیابی به اطلاعات ارزشمند پایگاه شود. تحقق این هدف، در شرایط حاضر، بسیار آسان بوده و با کمک یک نرم‌افزار خدمت دهنده و یک پایگاه اینترنتی، امکان پذیر خواهد بود.

قدردانی

از دانشجویانی که با مولفین در جمع‌آوری، طبقه‌بندی و تصحیح اطلاعات همکاری داشته‌اند و نیز معاونت پژوهشی دانشگاه صنعتی شریف بخاطر تصویب طرح، بعنوان پروژه تحقیقات دانشگاهی قدردانی می‌شود.

مراجع

۱. صدرنژاد، س.خ. و فرازی، م.، "الگوهای سینتیکی گاز - جامد"، کارنامه پژوهشی شریف، متالورژی، ۱۳۷۳، صص ۱۴۶ - ۱۷۲.
۲. صدرنژاد، س.خ. و فرازی، م.، "سینتیک واکنش H_2S با CaO در دمای $873^{\circ}K$ تا $1073^{\circ}K$ "، تهیه شده برای ارائه در ششمین کنگره ملی خوردگی، ۱۳۷۸.
۳. صدرنژاد، س.خ.، رضایی، م. و امیری، م. د.، "شبیه‌سازی سرعت در فرایندهای کاربردی"، کارنامه پژوهشی شریف، ۱۳۷۲، صص ۱۰۶ - ۱۱۳.
۴. صدرنژاد، س.خ. "گزارش شرکت در چهارمین کنفرانس دوسالانه نرم‌افزارهای کامپیوتری برای محاسبات متالورژی استخراجی و شیمیائی"، دانشکده مهندسی متالورژی و معاونت پژوهشی دانشگاه صنعتی شریف، تیر ماه ۱۳۷۱.
۵. صدرنژاد، س.خ. و فرازی، م.، "کاربرد الگوی گاز - SO_2 با CaO در دمای ۱۱۲۳ جامد برای بررسی سینتیک واکنش درجه کلون": کارنامه پژوهشی شریف، متالورژی، ۱۳۷۴، صص ۱۰۸ - ۱۱۸.
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 Calculations": *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.