

راهنما و جزئیات استفاده از تهیه نرم افزار محاسبه کننده ایندکسهای خوردگی آب

چکیده:

بروز خوردگی در سیستمهای توزیع آب یکی از مهمترین مشکلاتی است که گریبانگیر جامعه مدرن می باشد. خوردگی به تخریب شدن لوله ها ، شیرها و اتصالات فلزی در اثر خوردنده بودن آب اطلاق می شود. پدیده خوردگی می تواند باعث نامطلوب شدن کیفیت آب آشامیدنی، خسران اقتصادی و تخریب سیستمهای انتقال و توزیع آب شهری و اتصالات خانگی گردد. به منظور پایش پتانسیل خوردگی منابع آب و آب تزریق شده به سیستم انتقال و توزیع شهری نرم افزاری به طور مستقل تهیه شده است که قادر است 8 ایندکس مهم خوردگی با نامهای لانژلیئر، رایزنار، پوکوریوس، نیروی رانش، مازاد لحظه ای، سطح اشباع کلسیم، لارسون-اسکولد و تهاجم را محاسبه نماید. این نرم افزار می تواند تغییرات مقادیر هر ایندکس و همچنین گونه های کربناته را نسبت به پارامتر pH محاسبه و نتایج را به شکل نمودار نشان دهد. تست صحت آنالیزهای آزمایشگاهی آب نیز از سایر قابلیت های این نرم افزار است.

Development a software for calculation of eight important water corrosion indices

Mahdi Hadi

Faculty of environmental health engineering, Hamadan University of medical sciences

Abstract:

The occurrence of corrosion in water distribution systems is one major problem which befalls modern societies. Corrosion is the affinity of water to destroy water pipes, valves and other accessories. It can causes water unpleasant aesthetically and economical losses of water transmission and distribution system equipments. In order to control of corrosion in water resources and water delivered to urban water distribution systems, a software developed independently which is able to calculate 8 important water corrosion indices, namely , Langelier, Ryznar, Pockorius, Driving force, Momentary excess, Saturation level, Larson-Scold and Aggressiveness indices. It is able to accurately determine the variation of corrosion indices and dissolved carbonate species with pH and create high quality bar and line charts. Performance of water electroneutrality test is one of another's abilities.

1- مقدمه

آب می تواند باعث خورده شدن خطوط انتقال و همچنین ایجاد لایه های ضخیم رسوبی بر روی سطوح و دیواره های تاسیسات تبادل حرارتی گردد. بدون شک راهکار های بسیار زیادی توسط دانشمندان و محققین به منظور جلوگیری از پدیده های خوردگی و رسوبگذاری در چنین تاسیساتی ارائه شده است. با این وجود بهره گیری از روشهای پیش بینی کننده، توأم با استفاده از هر روش کنترل، می تواند به نحو مطلوبتری اثرات و خسارات ناشی از این پدیده هارا در صنعت تصفیه آب کاهش دهد. با این دیدگاه توجه به کیفیت آب تحویل داده شده به مصرف کننده از اهمیت ویژه ای برخوردار خواهد شد[1]. طی سالیان متوالی بسیاری از دانشمندان، محققین و بهره برداران سیستمهای تصفیه آب و همچنین بسیاری از آژانسهای نظارتی تلاشهای بسیاری به منظور تعریف پدیده خوردگی انجام دادند. از آنجا که ترسیب کنترل شده فیلمی از کربنات کلسیم بر روی جداره داخلی مجاری انتقال آب معمولترین روش کنترل خوردگی است، عمده تلاشهایی که به منظور تعریف پدیده خوردگی صورت گرفته بر قابلیت آب در تمایل به رسوبگذاری لایه ای از کربنات کلسیم تاکید داشته اند. تا به امروز اندکسهای مختلفی از نقطه نظر اشباع کربنات کلسیم ارائه شده و مورد استفاده قرار گرفته است از این ایندکسها می توان به ایندکس رایزنار¹، ایندکس لانژلیر²، ایندکس تهاجم³، ایندکس نیروی رانش⁴، ایندکس مازاد لحظه ای⁵، ایندکس لارسون - اسکولد⁶، پوکوریوس⁷ و ایندکس سطح اشباع⁸ اشاره کرد. هیچکدام از ایندکسهای ذکر شده مقیاس مستقیمی از میزان خوردگی آب نمی باشند بلکه تنها نشان دهنده میزان تمایل آب به سمت ترسیب کربنات کلسیم می باشند[2-4]. با این وجود آگاهی از مقدار هر یک از این ایندکسها در شرایط مختلف می تواند به منظور بررسی وضعیت سیستمهای آب آشامیدنی و صنعتی از نظر کنترل پدیده خوردگی مفید باشد.

از آنجا که تعیین هر یک از اندکسهای مذکور مستلزم انجام برخی محاسبات از شکل ساده تا پیچیده می باشد و از طرفی توجه به صرفه جویی در وقت و هزینه در بهره برداری از سیستمهای آبی حائز اهمیت است، لذا بهره گیری از تکنولوژیهای نرم افزاری در این میان می تواند مفید باشد. امروزه نرم افزارهای گوناگونی به منظور تسهیل امر بهره برداری از سیستمهای انتقال و توزیع آب شهری ارائه شده اند که برخی از آنها با هدف کنترل پدیده خوردگی در سیستمهای توزیع تدوین شده اند. از این قبیل نرم افزار ها می توان به نرم افزار *RTW corrosivity index calculator*[5] اشاره کرد. این نرم افزار توسط انجمن آب آمریکا تدوین شده است که توانایی بررسی تاثیر تربیق مواد شیمیایی بر کیفیت خوردگی آب و همچنین بر خی از ایندکسهای متداول خوردگی را داراست. این قبیل نرم افزار ها معمولاً به شکل تجاری عرضه و با قیمت بالایی در اختیار سایر کشور ها قرار می گیرند. با توجه به ضرورت توسعه نرم افزاری در ایران و رسیدن به خودکفایی در برخی از زمینه های علمی، تدوین و تهیه و توسعه چنین نرم افزارهایی می تواند ضمن عدم نیاز به خریداری از سایر کشور ها در جهت کنترل و بهره برداری بهینه سیستمهای آب شهری و صنعتی مفید باشد.

با توجه به اهمیت مسئله و وجود برخی کمبودها در کنترل پدیده خوردگی در تاسیسات انتقال و توزیع آب شهری در ایران در این مطالعه نرم افزاری تدوین گردید که توانایی محاسبه⁸ شاخص یا ایندکس خوردگی را داشته و می تواند به منظور پایش و کنترل این پدیده در تاسیسات تصفیه و توزیع آب شهری مورد استفاده قرار گیرد.

¹ Ryznar index

² Langelier index

³ Aggressiveness index

⁴ Driving force index

⁵ Momentary excess index

⁶ Larson-Scold index

⁷ Pockorius index

⁸ Saturation level index

این برنامه می تواند به آسانی در pH های بالا و پایین در رنج بین 1 تا 14 محاسبه ایندکسها را به آسانی انجام دهد. همچنین بررسی صحت آنالیز آزمایشگاهی آب مطابق توصیه های کتب مرجع [6] توسط برنامه انجام می شود. کد این نرم افزار به زبان Visual Basic 6/0 نوشته شده است. این نرم افزار طی مدت زمان 8 ماه تدوین گردید.

2- مواد و روش ها

از آنجا که امکان آوردن تمامی محاسبات و به عبارتی الگوریتم برنامه به دلیل گسترده بودن امکان پذیر نیست ، از اینرو در ادامه به طور خلاصه به برخی از محاسبات پایه ای و نحوه محاسبه ایندکسهای مورد بررسی اشاره خواهد شد. در این برنامه محاسبات مربوط به تعادل شیمیایی آب ، شیمی کربنات به ترتیب زیر در قالب الگوریتم برنامه گنجانده شده است.

1-2 تعادل شیمیایی

مجموع غلظت یونهای مختلف موجود در آب بر حسب mg/l تقریب خوبی از مقدار جامدات محلول موجود در آب (TDS) می باشد که همچنین می توان از آن جهت تعیین هدایت الکتریکی آب (EC) استفاده کرد [7].

$$\text{TDS} = \sum \text{ionic concentrations} \quad \text{معادله 1:}$$

$$\text{EC} = \frac{\text{TDS}}{6.5} \quad \text{معادله 2:}$$

توجه : ثابت متوسط تبدیل برای ابهای سطحی برابر با 6.5 می باشد.

از مجموع غلظت کلسیم (mg/l) و منیزیم (mg/l) به منظور تعیین سختی کل آب (TH) مطابق زیر استفاده می شود (1).

$$\text{TH} = [2.497 \times \text{calcium (mg/l)}] + [4.118 \times \text{magnesium (mg/l)}] \quad \text{معادله 3:}$$

مطابق مطالعات انجام شده [8] تمامی گونه های باردار مثبت (اکسی والانهای کاتیونی) بایستی برابر با تمامی گونه های باردار منفی (اکسی والانهای آنیونی) در یک محلول باشد که این مسئله تحت عنوان خنثی بودن الکتریکی (electroneutrality) شناخته می شود.

$$[\text{X}] \text{ positive} = [\text{X}] \text{ negative} \quad \text{معادله 4:}$$

یا

$$[\text{X}] \text{ positive} - [\text{X}] \text{ negative} = 0 \quad \text{معادله 5:}$$

$$[\text{X}] \text{ positive} = 2[\text{Ca}] + 2[\text{Mg}] + [\text{K}] + [\text{Na}] + 2[\text{Zn}] + 3[\text{Al}] + 3[\text{Fe}] + 2[\text{Mn}] + [\text{H}] \quad \text{معادله 6:}$$

$$[\text{X}] \text{ negative} = [\text{Cl}] + [\text{F}] + [\text{NO}_3^-] + [\text{NO}_2^-] + 2[\text{SO}_4^{2-}] + [\text{OH}] + [\text{HCO}_3^-] + 2[\text{CO}_3^{2-}] + [\text{OCl}] \quad \text{معادله 7:}$$

$[\text{X}] \text{ positive}$ = مجموع اکیوالانتهای مثبت (eq/L)

$[\text{X}] \text{ negative}$ = مجموع اکیوالانتهای منفی (eq/L)

به منظور تعیین غلظت مولی هر گونه یونی (که برای معادلات 4 تا 7 مورد نیاز می باشند) از رابطه زیر استفاده می کنیم [9].

معادله 8:

$$\text{Molar concentration (mol/l)} = \frac{\text{concentration of substance (mg/l)}}{\text{molecular weight of substance (g/mol)} \times 1000 \text{ (mg/g)}}$$

تعیین برخی از گونه های یونی مثل کربنات و هیدروژن معمولاً کمی مشکل است و در این حالت نیاز است تا از ثابتهای تعادلی (مقادیر K) استفاده شود. ثابتهای تعادل خود مطابق زیر به دما وابسته می باشند [9].

$$pK_1 = \frac{17052}{T_k} + 215.21(\log T_k) - 0.12675(T_k) - 545.56 \quad \text{معادله 12:}$$

$$pK_2 = \frac{2902.39}{T_k} + 0.02379(T_k) - 6.498 \quad \text{معادله 13:}$$

$$pK_w = \frac{4787.3}{T_k} + 7.1321(\log T_k) - 0.010365(T_k) - 22.801 \quad \text{معادله 14:}$$

$$pK_S = 0.01183T_C + 8.03 \quad \text{معادله 15:}$$

$$T_k = T_C + 273.15 \quad \text{معادله 16:}$$

pK_1 = فاکتور p برای ثابت اول تعادل

pK_2 = فاکتور p برای ثابت دوم تعادل

pK_w = فاکتور p برای یونیزاسیون آب

pK_S = فاکتور p برای حاصلضرب حلالیت

T_k = دما بر حسب کلین

T_C = دما بر حسب سانتیگراد

به منظور تبدیل مقادیر pK به K (ثابت تعادل) از رابطه زیر استفاده می کنیم [10].

$$pX = -\log[X] \quad \text{معادله 17:}$$

$$[X] = 10^{-pX} \quad \text{معادله 18:}$$

بعد از بدست آوردن ثابتهای تعادل در قدم بعد می بایست آنها را بر مبنای قدرت یونی محلول (I) با استفاده از ضرایب اکتیویته (γ) اصلاح نمود. ضرایب اکتیویته برای گونه های یونی مختلف با استفاده از رابطه **Davies** به ترتیب زیر بدست می آیند [9].

$$\log g = -AZ^2 \left(\frac{\sqrt{I}}{1 + \sqrt{I}} - 0.2I \right) \quad \text{معادله 19:}$$

$$A = 1.82 \times 10^6 (DT_k)^{-\frac{3}{2}} \quad \text{معادله 20:}$$

Z = عدد اکسیداسیون گونه های شیمیایی مورد نظر

$D=78/3$, ثابت دی الکتریک برای آب

$Z=1$, برای گونه های یونی مونوالانت

$Z=2$, برای گونه های یونی دی والانت

$Z=3$, برای گونه های یونی تری والانت

$$I = (2.5 \times 10^{-5}) TDS \quad \text{معادله 21:}$$

برای ساده کردن محاسبات فوق می توان ابتدا ضریب اکتیویته برای گونه های مونو والانت (γ_m) را با استفاده از معادله 18 محاسبه کرده و سپس با استفاده از روابط زیر مقادیر ضریب اکتیویته برای گونه های دی والانت (γ_d) و تری والانت (γ_t) را بدست آورد.

$$\text{معادله 22: } \text{Log} g_d = 4 \log g_m$$

$$\text{معادله 23: } \text{Log} g_t = 9 \log g_m$$

به منظور اصلاح ثابتهای تعادلی بر مبنای قدرت یونی محلول از معادلات زیر استفاده می کنیم [9].

$$\text{معادله 24: } K'_1 = \frac{K_1}{(g_m)^2}$$

$$\text{معادله 25: } K'_2 = \frac{K_2}{g_d}$$

$$\text{معادله 26: } K'_W = \frac{K_W}{(g_m)^2}$$

$$\text{معادله 27: } K'_S = \frac{K_S}{(g_d)^2}$$

K'_1 = ثابت اول تعادل (اصلاح شده بر مبنای قدرت یونی محلول) (mol/l)

K'_2 = ثابت دوم تعادل (اصلاح شده بر مبنای قدرت یونی محلول) (mol/l)

K'_W = ثابت حاصلضرب یونیزاسیون اصلاح شده آب (mol/l)

K'_S = ثابت حاصلضرب حلالیت اصلاح شده کربنات کلسیم (mol/l)

2-2 ایندکسهای پیش بینی کننده خوردگی

در جدول شماره 1 تعریف و حد آستانه خوردگی برای هر یک از هشت ایندکس مورد مطالعه آورده شده است. و در ادامه به اختصار به توضیح هر یک از ایندکسها پرداخته خواهد شد.

جدول شماره 1 تعریف و حد آستانه خوردگی برای هر یک از هشت اندکس مورد مطالعه

نام ایندکس	تعریف	حد خوردگی
Langelier (saturation) index	$LI = pH - pH_s$	< 0
Ryznar (Stability) index	$RI = 2 pH_s - pH$	> 7
Driving force index	$DFI = [Ca^{2+}] [CO_3^{2-}] K_S'^{-1}$	< 1
Agressiveness index	$AI = pH + \log_{10} (Ca^{2+}) (Alk)$	< 12
Momentary excess index	$([Ca^{+2}] - X) ([CO_3^{-2}] - X) = K_S'$	$x < 0$
Saturation Level	$SL = (a_{Ca^{2+}} \times a_{CO_3^{2-}}) K_{SP}^{-1} = IAP \cdot K_{SP}^{-1}$	≤ 0.98
Puckorius Scaling index	$RI = 2 pH_s - pH_{eq}$	≥ 6
Larson-Scold index	$LS = (C_{(Cl^-)} + C_{(SO_4^{2-})}) (C_{(HCO_3^-)} + C_{(CO_3^{2-})})^{-1}$	$> 1/2$

2-2-1 ایندکس لانژلیر

اولین روش به منظور پیش بینی مشخصات خوردگی و یا رسوبگذار بودن آب توسط لانژلیر [11] ارائه شد. او از تئوری های پیشرفته حاکم بر محلول های آبی به منظور آنالیز مشخصات آب کمک گرفت. لانژلیر پیشنهاد کرد که اختلاف بین pH محاسبه شده از اطلاعات آنالیز شیمیایی (pH_{cal}) و مقدار pH اندازه گیری شده (pH_{msr}) می تواند به عنوان یک شاخص عددی از مشخصات آب استفاده شود. به کمک روابط زیر می توان مقدار این ایندکس را محاسبه نمود.

$$LI = pH - pH_s \quad \text{معادله 28:}$$

$$pH = -\log[H^+] \quad \text{معادله 29:}$$

$$pH_s = pK_2' + pCa^{2+} - pK_S' - \log(2[Alk]) - \log g_m \quad \text{معادله 30:}$$

$$[Alk] = [CO_3^{2-}] + 1/2[HCO_3^-] + 1/2[OH^-] - 1/2[H^+] \quad \text{معادله 32:}$$

مقدار ایندکس لانژلیر مطابق جدول شماره 2 تفسیر می شود.

جدول 2 تفسیر مقدار ایندکس لانژلیر

مقدار اندکس	تفسیر
$LI > 0$	تمایل به ترسیب $CaCO_3$ (رسوبگذار)
$LI = 0$	عدم خوردگی و رسوبگذاری
$LI < 0$	تمایل به انحلال $CaCO_3$ (خورنده)

2-2-2 ایندکس رایزنار

در ایندکس پایداری رایزنار [12] سعی شده است از اطلاعات تجربی نیز به منظور بررسی شدت خوردگی در لوله های انتقال آب شهری کمک گرفته شود. این ایندکس در سال 1944 توسط Ryznar ارائه شد. رایزنار در آزمایشهایی که به منظور بررسی ترسیب کربنات کلسیم بر روی لوله های شیشه ای انجام داد، نشان داد که چنانچه مقدار این ایندکس از 7 کمتر باشد کربنات کلسیم بر روی جداره لوله ترسیب خواهد شد. همچنین رایزنار نشان داد که در مقادیر بالاتر از 7 برای این ایندکس، رسوبی بر روی جداره لوله تشکیل نمی شود. او ایندکس خود را با تخمینهای کمی از مقادیر خوردگی که در مقیاس عملی اتفاق افتاد اصلاح کرد. مقدار ایندکس رایزنار مطابق جدول شماره 3 تفسیر می شود.

جدول 3 تفسیر مقدار ایندکس رایزنار

مقدار اندکس	تفسیر
$RI < 6$	افزایش تمایل به رسوبگذاری با افزایش مقدار ایندکس
$6 < RI < 7$	تشکیل رسوب کربنات کلسیم منجر به ایجاد فیلم محافظ نمی شود
$RI > 7$	بروز خوردگی ملایم در لوله های فولادی افزایش می یابد

2-2-3 ایندکس پوکوریوس

به طور کلی روشهایی که به منظور محاسبه میزان خوردن ه یا رسوبگذار بودن آب ارائه شده اند دو پارامتر مهم را در نظر نمی گیرند. این دو پارامتر عبارتند از ظرفیت بافری آب (Buffer capacity) و حد اکثر مقدار ته نشست ناشی از آب طبیعی در شرایط تعادل (maximum amount of deposit). در ایندکس PSI این امکان فراهم شده است که رابطه بین وضعیت فوق اشباع آب و رسوبگذاری با لحاظ شدن دو پارامتر مذکور بررسی شود. در این ایندکس به جای استفاده از pH_{msr} از pH_{eq} که نشان دهنده اکتیویته تعادلی یون هیدروژن است استفاده می شود.

مقدار pH_{eq} مطابق رابطه زیر محاسبه می شود:

$$pH_{eq} = 1.465 \times \log_{10} [Alk] + 4.54 \quad \text{معادله 33:}$$

جدول 3 تفسیر مقدار ایندکس پوکوریوس

مقدار اندکس	تفسیر
$PSI < 6$	تمایل به رسوبگذاری
$PSI > 6$	عدم تمایل به رسوبگذاری (خورنده)

رابطه 33 فقط در شرایطی که مقدار pH کمتر از 8/3 باشد صادق است از اینرو بهتر است از ایندکس پوکوریوس در شرایطی که pH آب بیشتر از 8/3 است استفاده نشود [13].

2-2-4 ایندکس لارسون-اسکولد

ایندکس لارسون-اسکولد (Larson-scold index) [14] به منظور بررسی خورنده بودن آب در مجاورت با لوله های فولادی و لوله های فولادی با ساختار کربنی سبک (Low-carbon steel) و لوله های چدنی ارائه شد. این ایندکس مطابق جدول 5 تفسیر می شود. ایندکس لارسون-اسکولد مطابق رابطه 34 محاسبه می شود. در رابطه زیر C نشان دهنده غلظت هر یک از مولفه های رابطه بر حسب میلی گرم بر لیتر کربنات کلسیم می باشد.

$$LS = \frac{C_{(Cl^-)} + C_{(SO_4^{2-})}}{C_{(HCO_3^-)} + C_{(CO_3^{2-})}} \quad \text{معادله 34:}$$

جدول 5 تفسیر مقدار ایندکس لارسون-اسکولد

مقدار اندکس	تفسیر
$LS < 0/8$	تشکیل فیلم محافظ بدون دخالت یونهای کلرید و سولفات
$0/8 < LS < 1/2$	تشکیل فیلم محافظ با دخالت یونهای کلرید و سولفات در مقادیر بالا خوردگی فولاد رخ می دهد
$LS > 1/2$	بروز خوردگی ناحیه ای

2-2-5 ایندکس تهاجم

ایندکس تهاجم [15] مقیاسی از تمایل آب به تخریب لوله های انتقال آب که از جنس آذبت -سیمان هستند می باشد.

$$AI = pH + \log_{10}(Ca^{2+})(Alk) \quad \text{این ایندکس مطابق رابطه زیر محاسبه می شود:}$$

معادله 35:

در رابطه فوق (Ca^{2+}) و (Alk) به ترتیب نشان دهنده غلظت یون کلسیم و مقدار قلیائیت بر حسب میلی گرم کربنات کلسیم بر لیتر می باشند. این ایندکس برای لوله های آب از جنس آذبت -سیمان و شرایط دمایی بین 4 تا 27 درجه سانتیگراد (40 تا 80 درجه فارنهایت) قابل استفاده می باشد. مقدار ایندکس تهاجم مطابق جدول 6 تفسیر می شود.

جدول 6 تفسیر مقدار ایندکس تهاجم

مقدار اندکس	تفسیر
$LS < 10$	به شدت خورنده
$10 < LS < 12$	خورنده (ملایم)
$LS > 12$	غیر خورنده (رسوبگذار)

2-2-6 ایندکس نیروی رانش

این ایندکس در سال 1960 توسط McCauley ارائه شد [16]. او این ایندکس را برابر با مقدار واقعی تمایل به ترسیب کربنات کلسیم تعریف کرد که بر مبنای قانون اثر جرم قابل اثبات خواهد بود. این ایندکس مطابق رابطه زیر قابل

محاسبه است. در رابطه Ca^{2+} و CO_3^{2-} به ترتیب نشان دهنده غلظت یونهای کلسیم و کربنات بر حسب مول بر لیتر می باشند.

معادله 36:

$$DFI = \frac{[Ca^{2+}][CO_3^{2-}]}{K'_S}$$

مقدار اندکس نیروی رانش مطابق جدول 7 تفسیر می شود.

جدول 7 تفسیر مقدار ایندکس نیروی رانش

مقدار اندکس	تفسیر
$DFI \approx 1$	آب نسبت به کربنات کلسیم در حالت اشباع است. (خورنده ملایم)
$DFI > 1$	آب نسبت به کربنات کلسیم در حالت فوق اشباع است. (رسوبگذار)
$DFI < 1$	آب نسبت به کربنات کلسیم در حالت تحت اشباع است. (خورنده)

2-2-7 ایندکس مازاد لحظه ای

این ایندکس در سال 1952 توسط Dye ارائه شد [17]. مطابق این ایندکس مقدار X در رابطه 37 برابر با تعداد مولهایی از کربنات کلسیم است که بایستی ترسیب شوند تا رابطه زیر برقرار گردد:

$$([Ca^{+2}] - X)([CO_3^{-2}] - X) = K'_S \quad \text{معادله 37}$$

با ضرب کردن X در سایر مولفه های رابطه فوق و جمع کردن عبارتها خواهیم داشت:

$$X^2 - X([Ca^{+2}] - [CO_3^{-2}]) + ([Ca^{+2}] \times [CO_3^{-2}]) - K'_S = 0 \quad \text{معادله 38}$$

رابطه فوق یک رابطه درجه دوم بوده که با استفاده از روشهای حل معادلات درجه دو حل خواهد شد. برای محاسبه مقدار X از رابطه ریاضی زیر استفاده می شود:

$$X = \frac{-B - \sqrt{B^2 - 4AC}}{2A} \quad \text{معادله 39}$$

در رابطه فوق مقادیر مولفه های A ، B و C به ترتیب زیر تعریف می شوند:

$$A = 1 \quad \text{معادله 40}$$

$$B = -[Ca^{2+}] - \left(Alk + [H^+] - \frac{K'_w}{[H^+]} \right) \left(\frac{K'_2}{[H^+] + 2K'_2} \right) \quad \text{معادله 41}$$

$$C = -K'_S + [Ca^{2+}] \left(Alk + [H^+] - \frac{K'_w}{[H^+]} \right) \left(\frac{K'_2}{[H^+] + 2K'_2} \right) \quad \text{معادله 42}$$

مقدار ایندکس مازاد لحظه ای مطابق جدول 8 تفسیر می شود.

جدول 8 تفسیر مقدار ایندکس مازاد لحظه ای

مقدار اندکس	تفسیر
$ME \approx 0$	آب نسبت به کربنات کلسیم در حالت اشباع است. (خورنده ملایم)
$ME > 0$	آب نسبت به کربنات کلسیم در حالت فوق اشباع است. (رسوبگذار)
$ME < 0$	آب نسبت به کربنات کلسیم در حالت تحت اشباع است. (خورنده)

2-2-8 ایندکس سطح اشباع کربنات کلسیم

سطح اشباع آب از نظر کربنات کلسیم به حاصلضرب مولفه کربنات کلسیم (K_{sp}) اطلاق می شود. برای مثال حاصلضرب اکتیویته یونی (Ion Activity Product(IAP)) برای یونهای که در در تشکیل شدن رسوب کربنات کلسیم دخالت دارند به صورت زیر تعریف می شود:

$$K_{SP} = IAP = a_{Ca^{2+}} \times a_{CO_3^{2-}} \quad \text{معادله 43:}$$

سطح اشباع کربنات کلسیم در آب از نسبت حاصلضرب اکتیویته یونهای کلسیم و کربنات بر حاصلضرب حلالیت کربنات کلسیم مطابق رابطه زیر محاسبه می شود.

$$SL = \frac{a_{Ca^{2+}} \times a_{CO_3^{2-}}}{K_{SP}} = \frac{IAP}{K_{SP}} \quad \text{معادله 44:}$$

ایندکس سطح اشباع کربنات کلسیم مطابق جدول 9 تفسیر می شود.

جدول 9 تفسیر مقدار ایندکس سطح اشباع کربنات کلسیم

مقدار اندکس	تفسیر
$SL < 1$	آب نسبت به کربنات کلسیم در حالت تحت اشباع است. (خورنده)
$SL \approx 1$	آب نسبت به کربنات کلسیم در حالت تعادل است.
$SL > 1$	آب نسبت به کربنات کلسیم در حالت فوق اشباع است. (رسوبگذار)

2-3 مشخصات فنی نرم افزار

نرم افزار تهیه شده در این مطالعه یک نرم افزار تحت ویندوز بوده که قابلیت نصب بر روی سیستمهای عامل ویندوز را داشته و از اینرو به آسانی قابل استفاده می باشد. این نرم افزار بر روی رایانه های پنتیوم 1 به بالا قابل نصب و حذف می باشد. زبان برنامه انگلیسی بوده و حجم بسته نرم افزاری در حدود 7 مگابایت می باشد که امکان ارسال آن از طریق پست الکترونیک وجود خواهد داشت.

2-4 قابلیت های نرم افزار

از قابلیت های این نرم افزار می توان به موارد زیر اشاره کرد :

- محاسبه ایندکسهای مختلف خوردگی یا رسوبگذاری که عبارتند از :
ایندکس اشباع لانتلیر، ایندکس پایداری یا رایزنر، ایندکس پوکوریوس ، ایندکس نیروی رانش، ایندکس مازاد لحظه ای، ایندکس لارسون – اسکولد، ایندکس سطح اشباع کربنات، ایندکس تهاجم
- انجام تست تعادل الکتریکی* آب به منظور بررسی صحت نتایج آنالیزهای آزمایشگاهی مطابق با توصیه های کتب مرجع [18].
- محاسبه دقیق تغییرات ایندکسهای نام برده و همچنین تغییرات گونه های کربناته نسبت به تغییر pH و ترسیم نمودار میله ای و خطی از این تغییرات.
- تفسیر متنی مقادیر ایندکسهای خوردگی و اعلام هشدار با استفاده از تصاویر رنگی.
- ارائه پیشنهاد جهت کنترل خوردگی با توجه به مقدار هر ایندکس.
- امکان چاپ نتایج و نمودارها و همچنین ذخیره کردن نتایج در قالب فرمت متنی Microsoft Word .

* Electroneutrality

- ذخیره نمودار ها در قالب فرمت تصویری GIF.

5-2 خلاصه راهنمای نرم افزار

مطابق شکل 1 اطلاعات مربوط به نمونه آب میتواند به سه شکل به برنامه وارد شود :

- 1- وارد کردن مقادیر دما، pH، قلیائیت کل، TDS و کاتیون کلسیم
- 2- وارد کردن مقادیر دما، pH، قلیائیت کل، EC و کاتیون کلسیم
- 3- وارد کردن مقادیر دما، pH، قلیائیت کل و مقادیر آنیونها و کاتیونهای آنالیز شده

انتخاب هر یک از موارد با استفاده از منوی Setting قابل انجام خواهد بود.

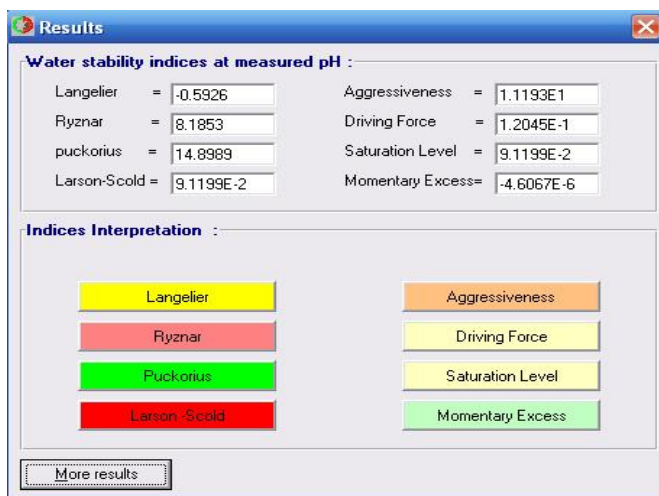
در صورت انتخاب مورد سوم محاسبه قدرت یونی آب با استفاده از رابطه Lewis & Randall صورت گرفته و بعد از دریافت اطلاعات در این حالت امکان بررسی صحت آنالیز با استفاده از دکمه Water analysis accuracy test فراهم خواهد شد.

مطابق اشکال 2 و 3 امکان انتخاب ایندکسهای مورد نیاز جهت محاسبه و همچنین تعریف فاصله ای دلخواه از pH به منظور بررسی اثر تغییرات pH بر مقادیر ایندکسها و مقادیر گونه های کربناته فراهم شده است.

شکل 1 در یافت اطلاعات مربوط به نمونه آب و امکان بررسی صحت آنالیز نمونه

شکل 3 تعریف فاصله ای دلخواه از pH به منظور بررسی اثر تغییرات pH

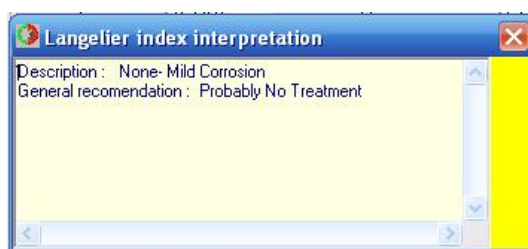
شکل 2 امکان انتخاب ایندکسهای مورد نیاز جهت محاسبه



نتایج محاسبه مقادیر ایندکسهای خوردگی و تفسیر رنگی هر ایندکس از حیث شدت خطر در شکل 4 نشان داده شده است. با کلیک کردن بر روی هر دکمه پنجره تفسیر متنی و پیشنهاد باز می شود.

شکل 4 مقادیر ایندکسهای خوردگی و تفسیر رنگی هر ایندکس از حیث شدت خطر

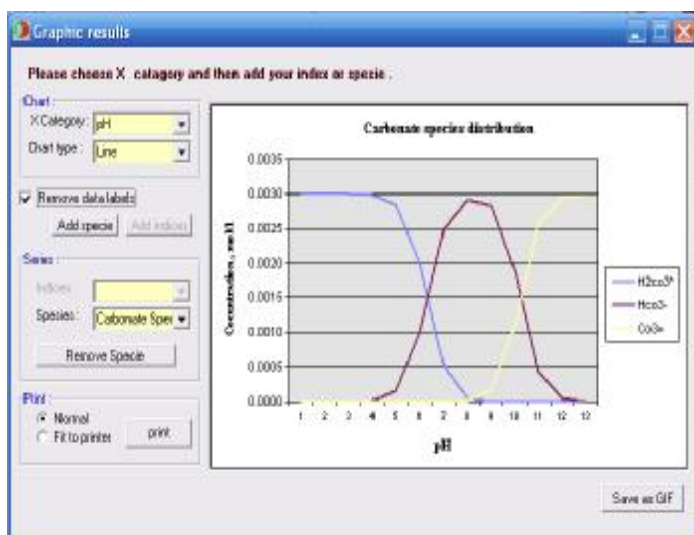
در اشکال 5 و 6 تفسیر متنی و ارائه پیشنهاد با توجه به مقدار هر ایندکس توسط برنامه، نشان داده شده است.



شکل 6 تفسیر ایندکس لائولیر و ارائه پیشنهاد

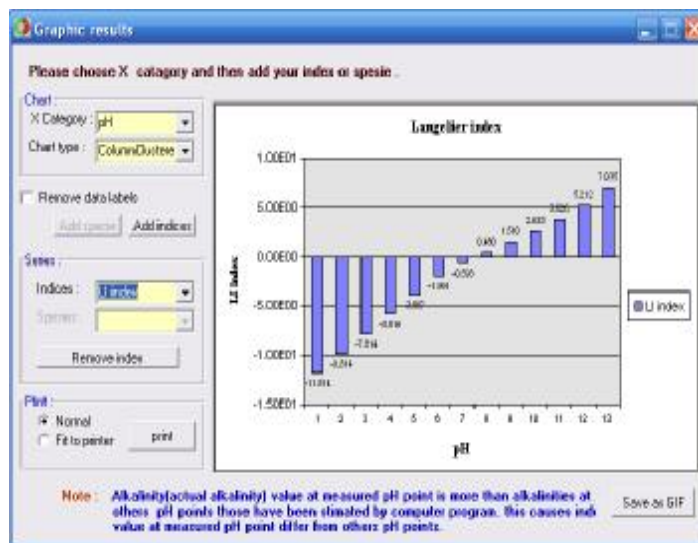


شکل 5 تفسیر ایندکس رایزنار و ارائه پیشنهاد



در شکل 7 و 8 به ترتیب تغییر در گونه های کربناته و مقدار ایندکس خوردگی نسبت به تغییرات pH برای نمونه نشان داده شده است.

شکل 7 ترسیم نمودار تغییرات گونه های کربناته نسبت به تغییرات pH



شکل 8 ترسیم نمودار تغییرات ایندکس خوردگی نسبت به تغییرات pH

3- صحت نتایج برنامه

صحت نتایج محاسبات برنامه با استفاده از نتایج آنالیزهای متعدد آبهای مختلف در دانشکده بهداشت علوم پزشکی همدان و همچنین مقایسه نتایج آن با برخی از نرم افزارهای مشابه و گرافهای موجود انجام شد.

4- منابع

- [۱] Prisyazhniuk, V. A. (۲۰۰۷). Prognosticating scale-forming properties of water Applied Thermal Engineering, ۲۷, ۱۶۴۱-۱۶۳۷
- [۲] Gallegos, A. A., Martinez, S. S., Ramirez Reyes, J. L. (۲۰۰۵). Evaluation of water corrosivity using corrosion rate model for a cooling water system, J New Electrochem systems, ۸, ۱۳۳-۱۴۲
- [۳] Imran, S. A., Dietz, J. D., ASCE, M., Mutoti, G., Taylor, J. S., ASCE, M., et al. (۲۰۰۵). Modified Larsons Ratio Incorporating Temperature, Water Age, and Electroneutrality Effects on Red Water Release, Journal of Environmental Engineering, ۱۳۱, ۱۵۲۰-۱۵۱۴
- [۴] Rossum, J. R., Merrill, D. T. (۱۹۸۳). An Evaluation of the Calcium Carbonate Saturation Indexes, AWWA, ۷۵, ۱۰۳-۹۵
- [۵] Tamburini & Winsor Inc. . RTW Corrosivity Index Calculator. ۴ed. Denver, Colorado
- [۶] Clesceri, L. S., Greenberg, A. E., Eaton, A. D. (۱۹۹۸). ۲۰ed, Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater APHA/AWWA/WEF ,
- [۷] Haarhoff, J. State of the art of modelling in water treatment. Proceedings IWA workshop Modelling of conventional drinking water production processes; ۲۰۰۰; Delft; ۲۰۰۰
- [۸] Sawyer, C. N., McCarty, P. L. (۱۹۷۸). ۳ed, Chemistry of environmental engineering, McGraw-Hill Book company, New York, USA.
- [۹] Benefield, L., Judkins, J. F., Weand, B. L. (۱۹۸۲). Process chemistry for water and wastewater treatment, Prentice-Hall, Inc., New Jersey, USA.
- [۱۰] Loewenthal, R. E., Morrison, I., Wentzel, M. C. (۲۰۰۴). Control of corrosion and aggression in drinking water systems, Water Sci Technol, ۴۹, ۱۸-۹

- [١١] Langelier, W. F. (١٩٣٦). The analytical control of anti-corrosion water treatment, J Am Water Works Assoc, ١٠, .١٥٢١-١٥٠٠.
- [١٢] Ryznar, J. W. (١٩٤٤). A new index for determining amount of calcium carbonate scale formed by a water, J Am Water Works Assoc ,
- [١٣] Indexes for calcium cabonate. ٢٠٠٤[cited; Available from: http://www.water-services.info/pdf/CALCIUM_CARBONATE.pdf
- [١٤] Larson, T. E., Skold, R. V. (١٩٥٨). Laboratory studies relating mineral quality of water to corrosion of steel and cast iron, Corrosion, ١٤, .٢٨٨-٢٨٥
- [١٥] AWWA standard C٧٧-٤٠٢. (١٩٧٧). Standard for asbestos-cement transmission pipe, ١٨in. through ٤٢in. , for water and other liquids, AWWA, Denver,Colo.
- [١٦] Dye, J. F. (١٩٦٤). Review of anticorrosion water treatment J Am Water Works Assoc, ٥٦, .٤٦٥-٤٥٧
- [١٧] Dye, J. F. (١٩٥٢). Calculations of the effect of temperture on pH, free carbon dioxide and the three form of alkalinity, J Am Water Works Assoc, ٤٤, .٣٥٦
- [١٨] APHA/AWWA/WEF. (١٩٩٨). ٢٠ed, Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater APHA/AWWA/WEF, Washington,DC.