

## بررسی اثر کرنل بر روی پیش‌بینی تابع توزیع انرژی در جاذبهای ناهمگن

محمد رضا قربانی<sup>۱</sup>، علی حقیقی اصل<sup>۲\*</sup>، اکبر شاهسونند<sup>۳</sup>، علی احمدپور<sup>۲</sup>

<sup>۱</sup>کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز دانشگاه سمنان

<sup>۲</sup>دانشیار، دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز دانشگاه سمنان

<sup>۳</sup>دانشیار، گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی دانشگاه فردوسی مشهد

<sup>۴</sup>دانشیار، گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی دانشگاه فردوسی مشهد

تاریخ ثبت اولیه: ۱۳۸۶/۱۲/۳، تاریخ دریافت نسخه اصلاح شده: ۱۳۹۱/۲/۲۷، تاریخ پذیرش قطعی: ۱۳۹۱/۱۰/۲۰

چکیده در مقاله حاضر تاثیر انواع ایزوترم‌های جذب بر روی پیش‌بینی تابع توزیع انرژی مورد بررسی قرار گرفته است. همانطور که می‌دانید معادله انتگرالی جذب از یک کرنل (ایزوترم) و یک تابع توزیع تشکیل شده، که هدف از حل معادله انتگرالی به دست آوردن تابع توزیع انرژی می‌باشد. از مهمترین ایزوترم‌های (کرنل‌ها) مورد بررسی می‌توان به ایزوترم‌های Sips، Toth و Unilan اشاره کرد. هر کدام از ایزوترم‌های فوق را در معادله انتگرالی جایگزین کرنل کرده و سپس با استفاده از روش رگولاریزاسیون خطی و تئوری معکوس اقدام به پیش‌بینی تابع توزیع انرژی شده است. نتایج این تحقیق در قالب نمودارهای مختلف دسته بندی شده و مورد بررسی و ارزیابی قرار گرفته است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که ایزوترم Sips تاثیر منفی بر روی پیش‌بینی تابع توزیع انرژی داشته و ایزوترم Toth نیز در مقادیر خطای تصادفی بالا بسیار عالی عمل کرده است. همچنین ایزوترم Unilan در تمام موارد به صورت بسیار عالی توانسته تابع توزیع انرژی را پیش‌بینی کند.

واژه‌های کلیدی ایزوترم جذب، رگولاریزاسیون خطی، توزیع انرژی، معادله فردولم، جذب سطحی، جاذبهای ناهمگن.

## The Effect of Kernel on the prediction of Energy Distribution Function in a Heterogeneous Solid Adsorbent

M. R. Ghorbani<sup>1</sup>, A. Haghghi Asl<sup>2\*</sup>, A. Shahsavand<sup>3</sup>, A. Ahmad Pour<sup>3</sup>

<sup>1</sup>School of Chemical Gas and Petroleum Engineering, Semnan University, Iran

<sup>2</sup>School of Chemical Gas and Petroleum Engineering, Semnan University, Semnan, Iran

<sup>3</sup>Department of Chemical Engineering, Ferdowsi University of Mashhad, Iran

**Abstract** In this article, the effect of different adsorption isotherms on the prediction of energy distribution function was considered. It is known that the adsorption integral equation has two parts, kernel (isotherm) and distribution function, in which the energy distribution function can be obtained from the solution of this equation. The important isotherms (kernels) such as Sips, Toth and Unilan were considered. The above isotherms have substituted in the integral equation as kernels and then by using the linear regularization method and inverse theory, the prediction of energy distribution function was performed. The results illustrated that the Sips isotherm have negative effect on the prediction of energy distribution function and the Toth isotherm has performed very well at high levels of stochastic errors. Also, the Unilan isotherm can predict the energy distribution function successfully in all cases.

**Keywords** Adsorption isotherm, Linear Regularization, Energy distribution, Fredholm integral equation, Adsorption, Heterogeneous adsorbents.

\*عهده‌دار مکاتبات

نشانی: دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز دانشگاه سمنان

تلفن: ۰۲۳۱-۳۳۵۴۱۲۰، دورنگار: -، پیام نگار: ahaghghi@semnan.ac.ir

## ۱- مقدمه

غیاب خطای تصادفی تعیین شود، که در بخش مربوطه به این موضوع پرداخته شده است.

مقدار کل جذب شونده بر روی یک جامد ناهمگن معمولاً توسط معادلات انتگرالی فردهولم نوع اول بیان می‌شود [۴-۱]. برآورد دقیق توزیع انرژی یا اندازه حفره‌ها در مورد اجسام جاذب ناهمگن، جزء مهمترین پارامترهای طراحی و عملیاتی جذب محسوب می‌شود در این مقاله نسبت به استفاده و آزمون یک شیوه مطمئن بر مبنای استفاده از روش‌های ریاضی پیشرفته مبنی بر معادله انتگرال فردهولم و تئوری رگولاریزاسیون خطی برای پیش بینی مستقیم توزیع انرژی یا اندازه حفره‌ها از روی اطلاعات موجود در مورد میزان کل ماده جذب شده بر روی جسم جاذب اقدام گردیده است [۵-۸].

## ۲- تئوری مسئله

شکل کلی معادله انتگرالی فردهولم نوع اول به صورت زیر می‌باشد [۲-۴]:

$$g(P_1) = \int_{\Omega} k(p_1, e) f(e) de \quad (۱) \text{ رابطه}$$

همانطور که می‌دانید در معادله فوق  $f(e)$  یک تابع توزیع ناشناخته بوده که باید محاسبه شود و  $k(p, e)$  کرنل (ایزوترم) معادله می‌باشد که بر اساس نوع جاذب و جذب شونده و شرایط دما و فشار تقریباً مشخص می‌باشد. پس از یکسری اعمال ریاضی و استفاده از روش رگولاریزاسیون خطی جهت حل معادله فوق، در نهایت به معادله ماتریسی زیر می‌رسیم [۳-۵]:

$$f = \{A^T A + \gamma I\}^{-1} A^T g. \quad (۲) \text{ رابطه}$$

در رابطه فوق  $A$ : ماتریس ضرائب،  $I$ : ماتریس همانی،  $g$  بردار داده‌های مصنوعی و  $\lambda$  هم پارامتر رگولاریزاسیون می‌باشد.

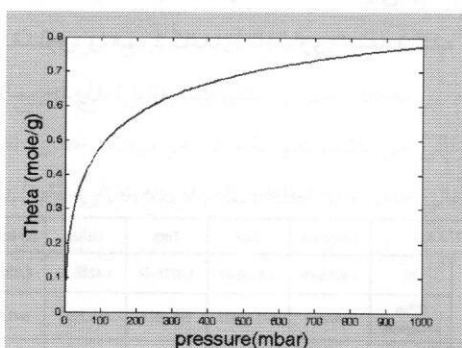
در این مقاله به دو طریق جهت تولید داده‌های مصنوعی عمل شده است:

الف) تولید داده‌ها با استفاده از گام‌های مساوی فشار  
ب) تولید داده‌ها با استفاده از گام‌های نامساوی فشار  
روش کلی به این صورت است که ابتدا یک تابع توزیع مناسب به عنوان مثال: «توزیع گوسین» مطابق زیر در نظر گرفته می‌شود (شکل ۱):

$$F(e) = 1.125 \exp \left[ \frac{(e-0.25)^2}{0.25} \right] \quad (۳) \text{ رابطه}$$

در بررسی مسئله جذب سطحی انتخاب ایزوترم مناسب یکی از نکات مهم محسوب می‌شود. بر طبق مطالعات و مشاهدات تجربی ایزوترم‌های مختلفی وجود دارد که می‌توان در معادله انتگرالی جذب از آنها استفاده کرد [۹]. از آنجایی که نوع جاذب و جذب شونده و همچنین شرایط دما و فشار مشخص می‌باشد، دامنه انتخاب ایزوترم‌های مورد بررسی، کمی محدودتر می‌شود ولی به صورت قطعی نمی‌توان در مورد شکل ایزوترم اظهار نظر نمود. بنابراین با توجه به انواع منحنی‌های ایزوترم که وجود دارد به راحتی می‌توان ایزوترم یا ایزوترم‌های مناسب را برای داده‌های مورد مطالعه استخراج کرد [۹]. بر اساس همین موضوع در مورد تحقیق اخیر داده‌های مورد بررسی در ردیف ایزوترم لانگمور قرار گرفته و در نتیجه از ایزوترم‌های  $Unilan$ ،  $Toth$ ،  $Sips$  و می‌توان استفاده کرد. در ادامه در این مقاله به بررسی تاثیر ایزوترم‌های ذکر شده، بر روی پیش‌بینی تابع توزیع انرژی پرداخته خواهد شد. به این ترتیب که ابتدا داده‌های مصنوعی با استفاده از ایزوترم لانگمور ایجاد شده و سپس در مرحله پیش‌بینی توزیع انرژی، از ایزوترم‌های دیگری غیر از لانگمور استفاده کرده و تاثیر ایزوترم مورد نظر در مقادیر مختلف خطای تصادفی بر روی پیش‌بینی تابع توزیع و همچنین بازیابی داده‌های اولیه بررسی گردیده است. برای به‌کارگیری ایزوترم‌های فوق، نیاز به این است که ابتدا پارامترهای مدل در

بررسی هر کدام از آنها پرداخته می شود.



شکل ۲. منحنی مقدار جذب در فشارهای مختلف.

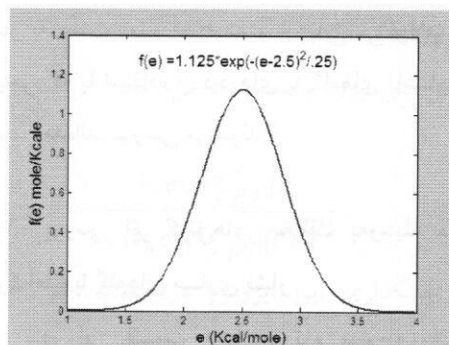
### ۲-۱-۱- روش تجربی

در این روش با استفاده از داده های آزمایشگاهی که در دماهای مختلف برحسب فشار و مقدار کل جذب شونده وجود دارد، پارامترهای مدل را محاسبه می کنند، به این ترتیب که داده های فشار برحسب مقدار کل جذب شونده را در چند دمای مختلف به دست آورده و با استفاده از نرم افزارهای مختلف از جمله Excell، E\_plot، Matlab اقدام به تطبیق کردن داده های فوق می کنند. سپس با حل همزمان معادلات به دست آمده، پارامترهای موجود در مدل جذب به دست می آیند.

### ۲-۱-۲- روش تئوری

در این روش به دلیل اینکه داده ها به طریقه تجربی به دست نیامده اند از روش مذکور استفاده می شود به این صورت که با جایگذاری معادله ایزوترم مورد بررسی در معادله انتگرالی جذب و با استفاده از داده های مصنوعی فاقد خطای تصادفی، اقدام به حل معادله انتگرالی و به دست آوردن تابع توزیع مربوطه می شود.

بر اساس نوع مدل انتخابی هر کدام از پارامترهای مدل در محدوده خاصی قرار می گیرند که با استفاده از نرم افزار Matlab و با در نظر گرفتن محدوده مجاز برای پارامترهای موجود در مدل، پارامترهایی که بتوانند مربعات خطای  $F(E)$  به دست آمده از محاسبه و  $F(e)$  اولیه را به حداقل برسانند، به عنوان پارامترهای بهینه برگزیده می شوند. در تحقیق حاضر از



شکل ۱. منحنی تابع توزیع انرژی.

سپس با در نظر گرفتن ایزوترم لانگمور به عنوان مدل جذب همدمای محلی مقدار معادله انتگرالی جذب برای دمای حدود 77.5 کلوین و یکصد فشار بین  $1 \text{ mbar} < P_i < 1000 \text{ mbar}$  یکبار به صورت فواصل مساوی و بار دیگر به صورت فواصل نامساوی در محدوده انرژی  $1 \frac{\text{Kcal}}{\text{mol}} < e < 4 \frac{\text{Kcal}}{\text{mol}}$  محاسبه می گردد. بر این اساس پس از جایگذاری ایزوترم لانگمور در معادله انتگرالی جذب داریم:

$$\theta(P_i, T) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k_0 \exp\left[\frac{e}{RT}\right] P_i}{1 + k_0 \exp\left(\frac{e}{RT}\right) P_i} F(e) de \quad (4)$$

همان طور که می دانید در رابطه فوق  $k_0$  ثابت لانگمور و  $\theta(P_i, T)$  مقدار کل ماده جذب شده در فشار  $P_i$  و دمای  $T$  می باشد. نتایج محاسبه انتگرال فوق در شکل ۲ آورده شده است. در ادامه مقادیر به دست آمده با درصد معینی از خطای تصادفی آلوده شده و به عنوان اطلاعات مصنوعی، جهت استخراج (پیش بینی) توزیع انرژی مورد استفاده قرار خواهند گرفت. در هر مرحله با داشتن اطلاعات مربوط به مقادیر کل جذب در فشارهای مختلف و با استفاده از روش رگولاریزاسیون خطی نسبت به استخراج توزیع انرژی اقدام شده است.

### ۲-۱- به دست آوردن پارامترهای موجود در مدل های ایزوترم جذب

در این بخش چگونگی به دست آوردن پارامترهای مدل ایزوترم انتخابی بیان می شود. در این ارتباط دو روش، یکی روش تجربی و دیگری روش تئوری وجود دارد که در زیر به

فشار به دست آمده اند ارائه و ارزیابی می‌گردند و در ادامه نتایجی که با استفاده از داده‌های با گام‌های نامساوی فشار به دست آمده‌اند، بررسی می‌شوند.

### ۳-۱- بررسی اثر کرنل‌های مختلف به وسیله داده‌های به دست آمده با گام‌های مساوی فشار

در این قسمت ابتدا ایزوترم مربوطه را در معادله انتگرالی جایگذاری کرده و سپس اقدام به پیش‌بینی تابع توزیع انرژی می‌شود.

#### ۱- ایزوترم Sips

شکل کلی ایزوترم مطابق زیر می‌باشد:

$$\theta = \frac{(k_0 \exp\left[\frac{e}{RT}\right] P)^{1/n}}{1 + (k_0 \exp\left[\frac{e}{RT}\right] P)^{1/n}} \quad \text{رابطه (۶)}$$

پارامترهای معادله فوق مطابق جدول ۱ به دست آمده است. با جایگذاری این ایزوترم در معادله کلی جذب خواهیم داشت:

$$\theta(P_i, T) = \int_{\min}^{\max} \frac{(k_0 \exp\left[\frac{e}{RT}\right] P_i)^{1/n}}{1 + (k_0 \exp\left[\frac{e}{RT}\right] P_i)^{1/n}} \cdot F(e) de \quad \text{رابطه (۷)}$$

اکنون با استفاده از روش رگولاریزاسیون و تئوری معکوس  $f(e)$  در مقادیر مختلف خطای تصادفی محاسبه شده و نتایج در قالب نمودار در ادامه ارائه شده‌است.

همانطور که در شکل ۳ مشاهده می‌شود این ایزوترم عملکرد خوبی در معادله انتگرالی جذب برای پیش‌بینی تابع توزیع انرژی ندارد، بخصوص در درصد خطاهای کم، بسیار بد پیش‌بینی می‌کند ولی هر قدر که درصد خطای تصادفی زیاد می‌شود عملکرد این ایزوترم بهتر می‌شود البته مناسب عمل نکردن این ایزوترم می‌تواند به دلیل عدم توانایی روش انتخاب بهترین پارامتر رگولاریزاسیون در پیش‌بینی بهترین  $\lambda$  باشد که این موضوع باید در تحقیقات بعدی پیگیری شود.

روش فوق برای محاسبه پارامترهای مدل‌های مختلف برای یکصد نقطه در محدوده فشار ۱ تا ۱۰۰۰ میلی‌بار هم با گام‌های مساوی و هم با گام‌های نامساوی استفاده شده و نتایج در قالب جدول ۱ ارائه شده‌است.

جدول ۱. مقادیر پارامترهای مدل‌های مختلف جذب.

T=77.5 K		Langmuir	Sips	Toth	Unilan	Jovanovich
Nonequi space	k0	4.626E-09	1.686E-09	1.072E-04	1.420E-09	8.820E-10
	Other parameter	Non	n=1.68687	t=0.3571	s=1.7273	c=1.6633
Equi space	k0	4.116E-09	1.019E-03	1.072E-03	1.029E-04	8.018E-10
	Other parameter	Non	n=2.57676	t=0.43061	s=1.7273	c=1.318182

### ۳-۲- بررسی اثر کرنل‌های مختلف

اکنون با توجه به اینکه مقدار کل جذب  $(\theta)$  در فشارهای مختلف مشخص می‌باشد و همچنین پارامترهای هر کدام از ایزوترم‌های مختلف نیز موجود است، تابع توزیع انرژی را با استفاده از روش رگولاریزاسیون و تئوری معکوس پیش‌بینی می‌نماییم. در این زمینه با توجه به این نکته که عملکرد ایزوترم در درصد خطاهای مختلف مدنظر می‌باشد، فقط مقدار تابع توزیع انرژی در  $\lambda$  بهینه محاسبه شده‌است. همچنین برای محاسبه  $\lambda$  بهینه از روش‌های انتخاب خودکار پارامتر رگولاریزاسیون استفاده شده و  $\lambda$  بهینه به دست آمده‌است، مطابق زیر:

$$CV(\lambda) = \frac{\frac{1}{n} \| (Af(\lambda) - g) \|^2}{\left( \frac{1}{n} \text{trace}(I - R(\lambda)) \right)^2}, \quad \text{رابطه (۵)}$$

در رابطه فوق  $R(\lambda) = A(A^T A + \lambda I)^{-1} A^T$  می‌باشد که به آن ماتریس نرم کننده می‌گویند [۱۰-۱۲].

در ادامه پس از محاسبه تابع توزیع، منحنی بازایی داده‌ها (منحنی مقدار کل جذب بر حسب فشار) برای بررسی چگونگی صحت عملکرد ایزوترم به دست آمده و نمودار آن در مقایسه با داده‌های اولیه رسم شده و به نتایج قابل‌توجهی منجر گردیده که در بخش مربوطه بیان خواهد شد. در این بخش ابتدا نتایجی که با استفاده از داده‌های با گام‌های مساوی

## ۲- ایزوترم Toth

شکل کلی ایزوترم مطابق زیر می‌باشد:

$$\theta = \frac{k_0 \exp\left[\frac{e}{RT}\right]P}{1 + (k_0 \exp\left[\frac{e}{RT}\right]P)^{1/n}} \quad \text{رابطه (۸)}$$

با جایگذاری این ایزوترم در معادله کلی جذب

خواهیم داشت:

$$\theta(P, T) = \int_{e_{\min}}^{e_{\max}} \frac{k_0 \exp\left[\frac{e}{RT}\right]P}{1 + (k_0 \exp\left[\frac{e}{RT}\right]P)^{1/n}} \cdot F(e) de \quad \text{رابطه (۹)}$$

نتایج به دست آمده برای  $f(e)$  در شکل ۴ آورده شده

است. از مقایسه نمودارهای شکل ۴ مربوط به ایزوترم فوق این نتیجه را می‌توان گرفت که عملکرد ایزوترم فوق برای پیش‌بینی تابع توزیع انرژی در معادله انتگرالی جذب تقریباً خوب و مناسب می‌باشد. هر چند این روش نیز در درصد خطاهای بسیار پایین ضعیف ظاهر شده است ولی در اکثر مواقع و در درصد خطاهای تصادفی بالا به خوبی توانسته تابع توزیع انرژی را پیش‌بینی کند.

## ۳- ایزوترم Unilan

شکل کلی ایزوترم مطابق زیر می‌باشد:

$$\theta = \frac{1}{2S} \ln \left[ \frac{1 + k_0 \exp\left[\frac{-e}{RT_0} \left(1 - \frac{T_0}{T}\right)\right] \exp(S) \cdot P}{1 + k_0 \exp\left[\frac{-e}{RT_0} \left(1 - \frac{T_0}{T}\right)\right] \exp(-S) \cdot P} \right] \quad \text{رابطه (۱۰)}$$

پارامترهای معادله فوق مطابق جدول ۱ به دست آمده-

است. با جایگذاری این ایزوترم در معادله کلی جذب خواهیم

داشت:

$$\theta(P, T) = \int_{e_{\min}}^{e_{\max}} \frac{1}{2S} \ln \left[ \frac{1 + k_0 \exp\left[\frac{-e}{RT_0} \left(1 - \frac{T_0}{T}\right)\right] \exp(S) \cdot P}{1 + k_0 \exp\left[\frac{-e}{RT_0} \left(1 - \frac{T_0}{T}\right)\right] \exp(-S) \cdot P} \right] \cdot F(e) de \quad \text{رابطه (۱۱)}$$

نتایج محاسبه  $f(e)$  در قالب نمودار در زیر آورده شده-

است.

همانطور که در شکل ۵ مشاهده می‌شود عملکرد این

ایزوترم در معادله انتگرالی برای پیش‌بینی تابع توزیع انرژی بسیار عالی می‌باشد، بطوریکه در هر درصد خطای تصادفی بسیار عالی ظاهر شده است و تابع توزیع انرژی به دست آمده بر اساس این ایزوترم تطابق خوبی با تابع توزیع انرژی اصلی دارد.

## ۴- ایزوترم Jovanovich

شکل کلی ایزوترم مطابق زیر می‌باشد:

$$\theta = 1 - c \exp(-k_0 \exp\left[\frac{e}{RT}\right] \cdot P) \quad \text{رابطه (۱۲)}$$

با جایگذاری این ایزوترم در معادله کلی جذب

خواهیم داشت:

$$\theta(P, T) = \int_{e_{\min}}^{e_{\max}} (1 - c \exp(-k_0 \exp\left[\frac{e}{RT}\right] \cdot P)) \cdot F(e) de \quad \text{رابطه (۱۳)}$$

نتایج محاسبه  $f(e)$  در قالب نمودار در شکل ۶ آورده

شده است.

به نظر نمی‌رسد که این ایزوترم بتواند در معادله

انتگرالی جذب برای پیش‌بینی تابع توزیع انرژی مناسب باشد هرچند در درصد خطای تصادفی بالا بهتر توانسته جواب مناسب را به دست آورد، ولی به طور کلی ایزوترم مناسبی، حداقل برای داده‌های مورد مطالعه در این تحقیق نمی‌باشد.

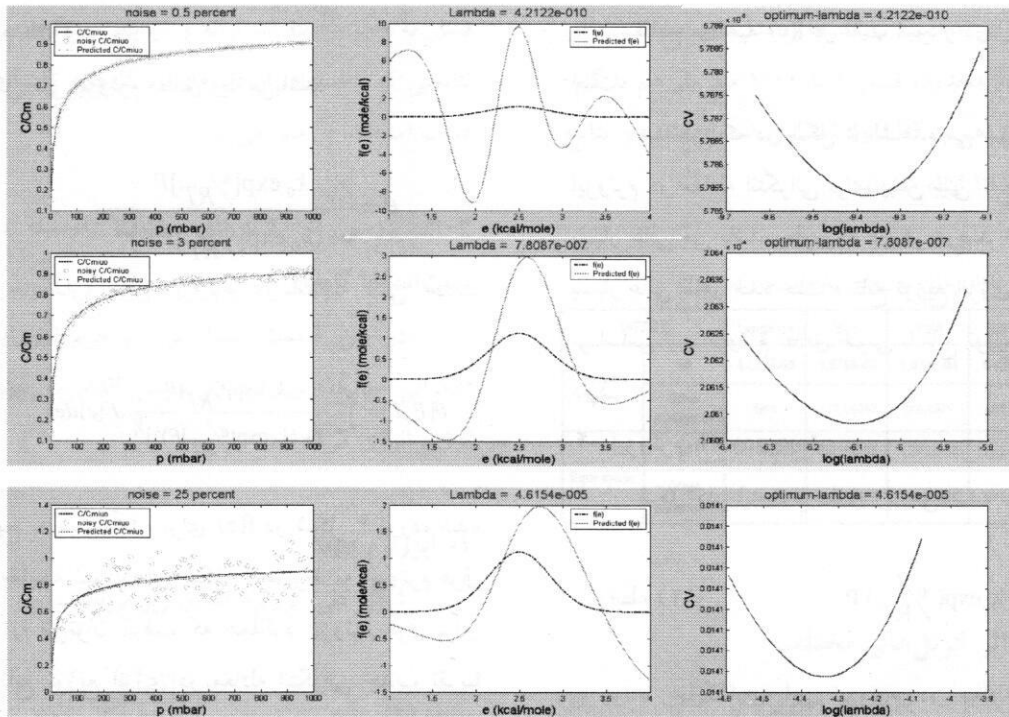
در ادامه این مبحث با انتخاب داده‌های مصنوعی

بصورت نامساوی در محدوده فشاری ۱ تا ۱۰۰۰ میلی بار

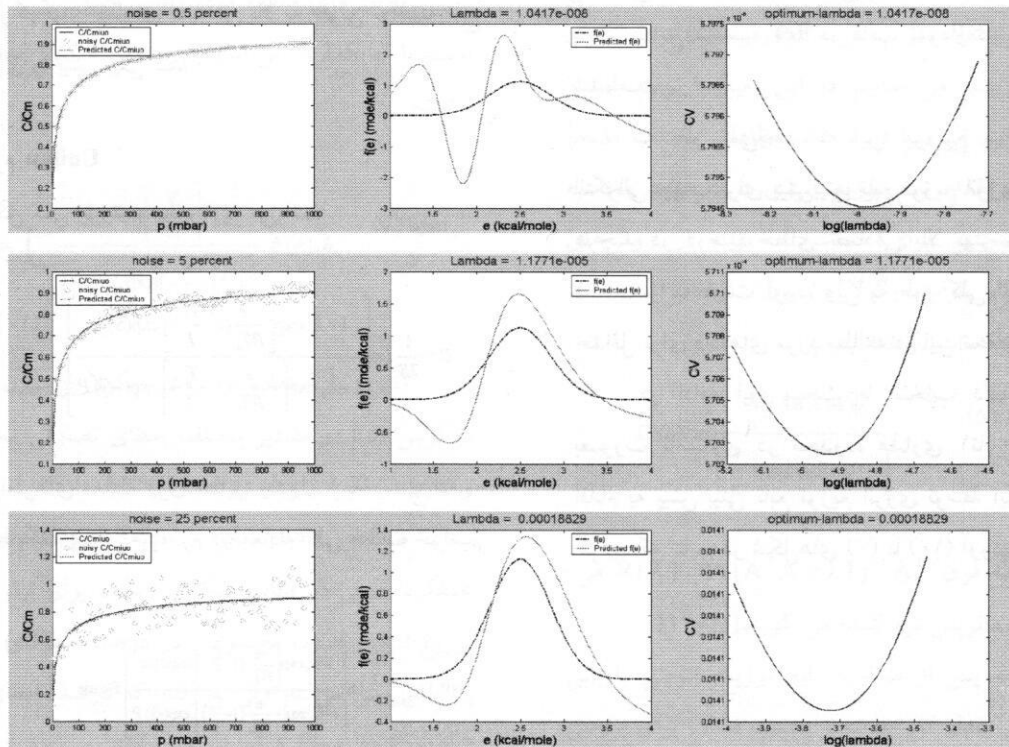
اقدام به پیش‌بینی تابع توزیع انرژی توسط ایزوترمهای فوق

گردید که نتایج در شکل‌های (۷) تا (۱۰) آورده شده است.

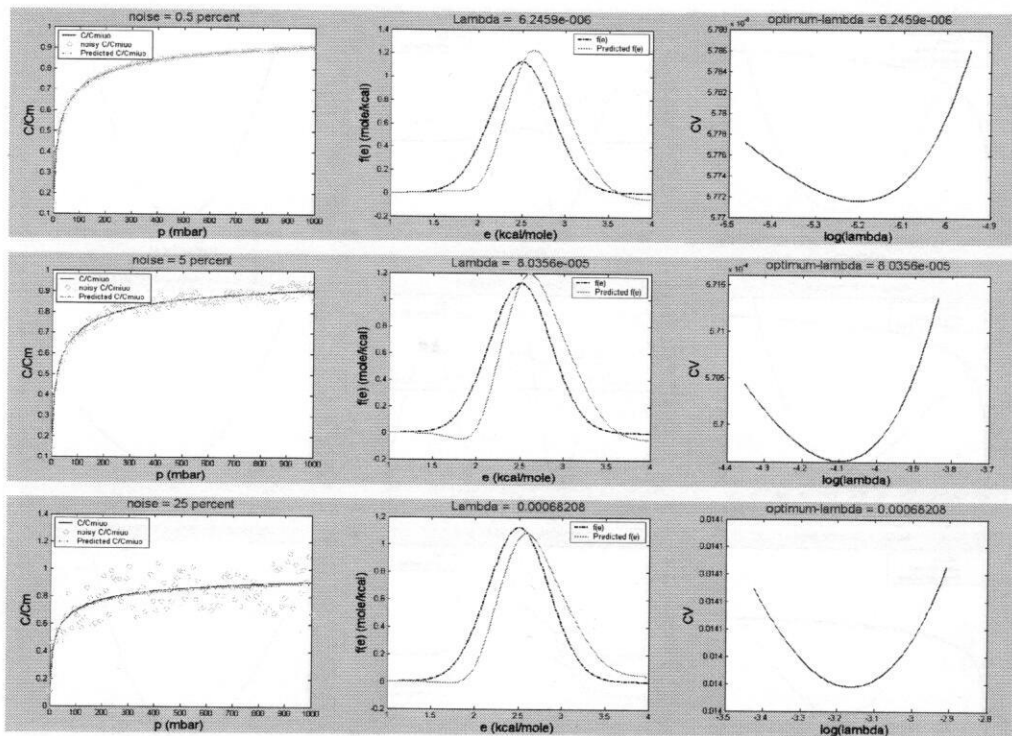




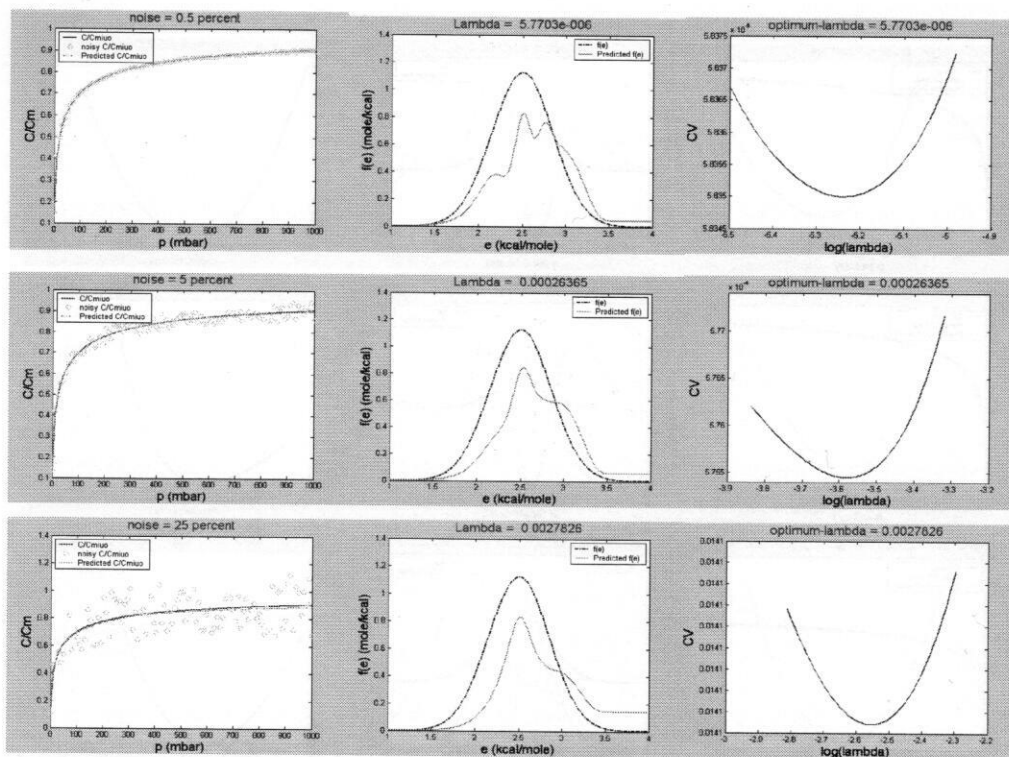
شکل ۳. عملکرد ایزوترم Sips در درصد خطاهای مختلف (گامهای مساوی فشار).



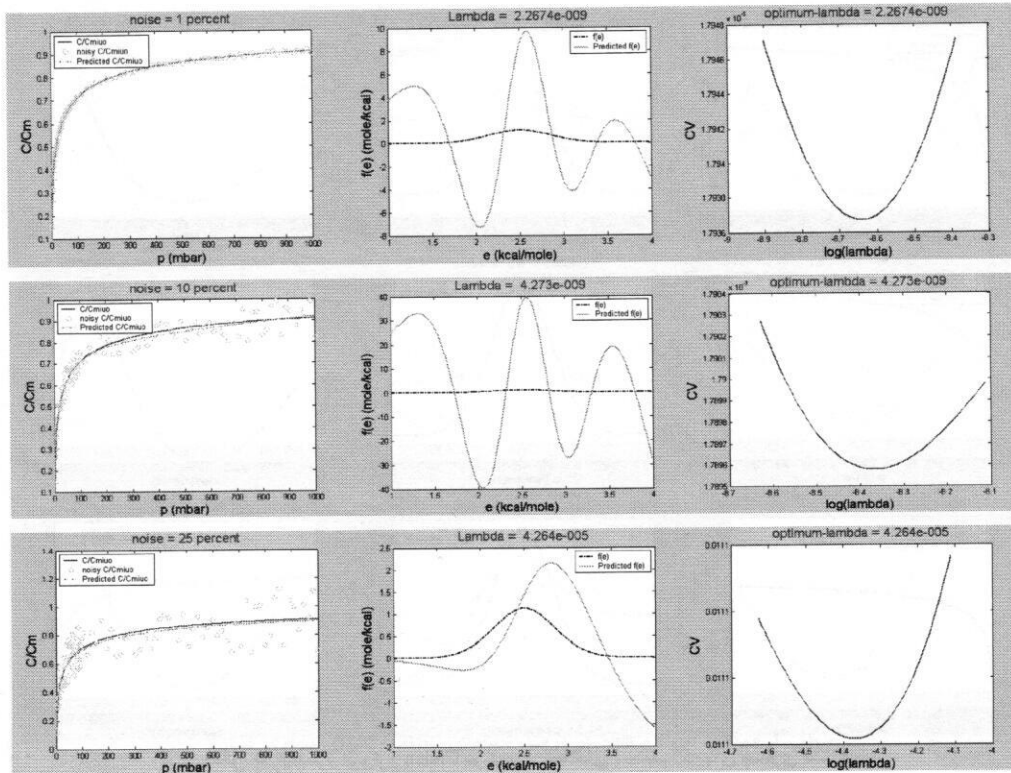
شکل ۴. عملکرد ایزوترم Toth در درصد خطاهای مختلف (گامهای مساوی فشار).



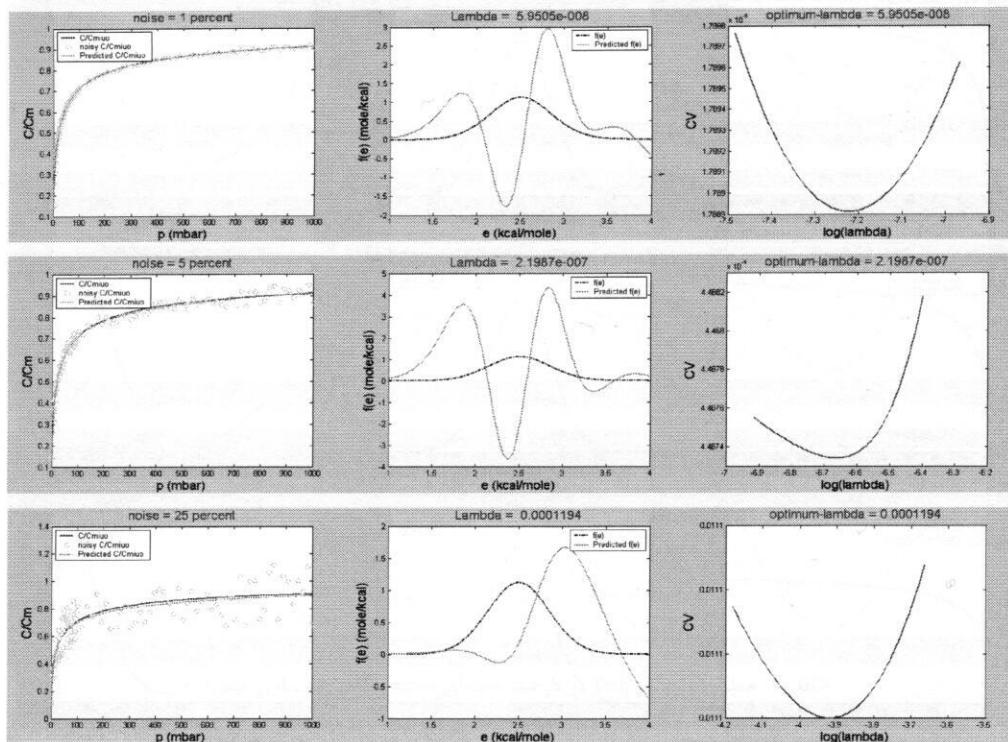
شکل ۵. عملکرد ایزوترم Unilan در درصد خطاهای مختلف (گامهای مساوی فشار).



شکل ۶. عملکرد ایزوترم Jovanovich در درصد خطاهای مختلف (گامهای مساوی فشار).

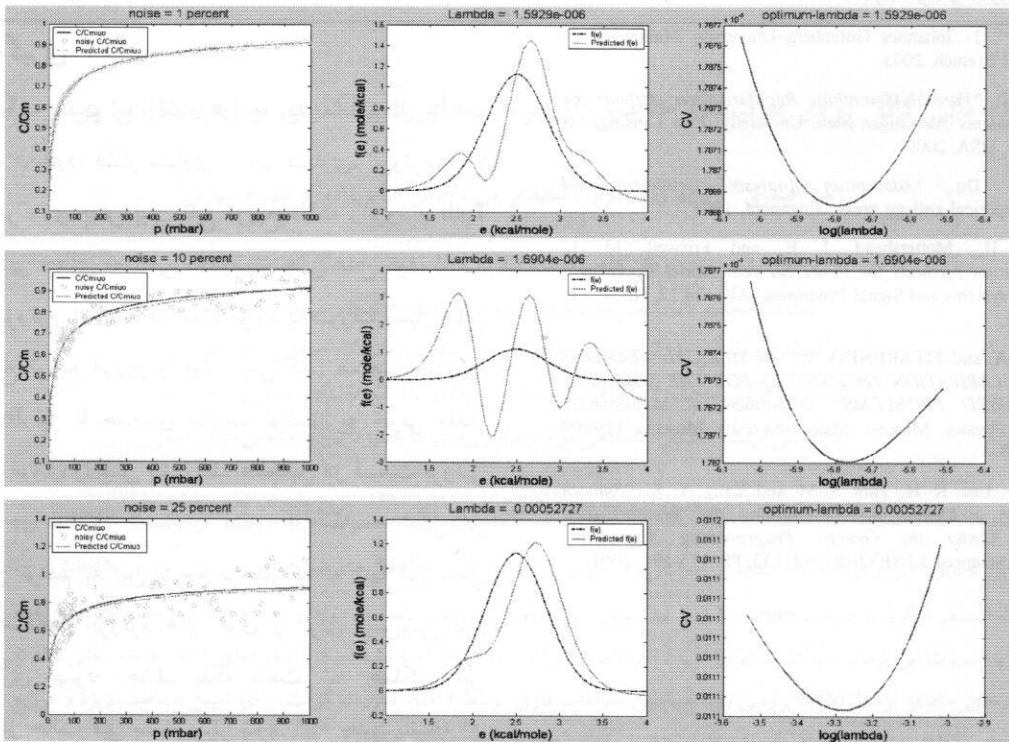


شکل ۷. عملکرد ایزوترم Sips در درصد خطاهای مختلف (گامهای نامساوی فشار).

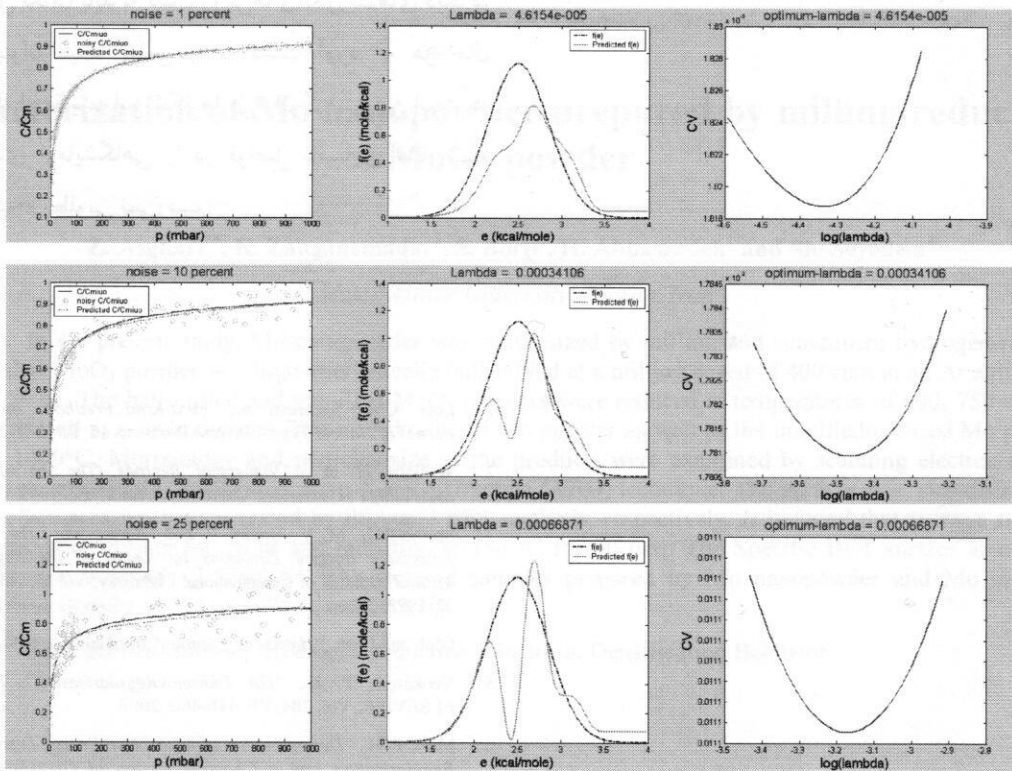


شکل ۸. عملکرد ایزوترم Toth در درصد خطاهای مختلف (گامهای نامساوی فشار).





شکل ۹. عملکرد ایزوترم Unilan در درصد خطاهای مختلف (گامهای نامساوی فشار).



شکل ۱۰. عملکرد ایزوترم Jovanovich در درصد خطاهای مختلف (گامهای نامساوی فشار).

engineering", 1- Johannes Gutenberg-University Mainz and 2- University of Bremen, 2003.

8. Lamm. P. K., "Variable-Smoothing Regularization Methods for Inverse Problems", Michigan State University, East Lansing, MI 48824-1027, USA, 2000.
9. Doung. D. Do., "Adsorption Analysis :Equilibria and Kinetics", Imperical college press, Singapore, 1998.
10. Ahmadian. H., Mottershead. J. E. and Friswell. M. I., "Regularisation Methods for Finite Element Model Updating", Mechanical systems and Signal Processing, AP, Vol.12, No. 1, PP. 47-64, 1998.
11. YAGOLA. A. and TITARENKO. V., " NUMERICAL METHODS AND REGULARIZATION TECHNIQUES FOR THE SOLUTION OF ILL-POSED PROBLEMS", Department of Mathematics, Faculty of Physics, Moscow State University Moscow 119899 Russia, 2000.
12. Yeun. Y. S., Lee. K. H., Han. S. M. and Yang. Y. S., "Smooth Fitting With a Method for Determining the Regularization Parameter Under the Genetic Programming Algorithm", Information Sciences, ELSEVIER, Vol. 133, PP. 175-194, 2001.

#### ۴- نتیجه‌گیری

نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که به طور کلی در هر دو قسمت محدوده فشار مساوی و غیر مساوی، ایزوترم Sips تاثیر منفی بر روی پیش بینی تابع توزیع داشته و ایزوترم Toth نیز در مقادیر خطای تصادفی بالا بسیار عالی عمل کرده است. همچنین ایزوترم Unilan در تمام موارد به صورت بسیار عالی توانسته تابع توزیع انرژی را پیش بینی کند. همچنین ایزوترم Jovanovich نیز تا حدودی مناسب توانسته به خوبی مقدار تابع توزیع انرژی را پیش بینی کند. همچنین در قسمت بررسی ایزوترم‌ها در فواصل نامساوی فشار، از مقایسه شکل‌های مذکور می‌توانیم به این نتیجه برسیم که نه تنها این عمل توانست عملکرد ایزوترم‌های فوق را برای پیش‌بینی تابع توزیع انرژی بهبود بخشد، بلکه باعث شد عملکرد این ایزوترم‌ها از حالت قبل بسیار بدتر شود. البته چنین نتیجه‌ای را اگر روش انتخاب بهترین پارامتر رگولاریزاسیون مناسب باشد، می‌توان گرفت، اما اگر روش فوق صحیح نباشد ( به خوبی عمل نکند) باید به دنبال روش‌ها و الگوریتم‌های دیگری رفت تا بتوان نتیجه قطعی را به دست آورد. به هر حال نتیجه‌ای که از مقایسه این شکل‌ها می‌توان گرفت این است که اگر داده‌های آزمایشگاهی را در فواصل نامساوی فشار تهیه کنیم، به نتیجه مطلوبی نمی‌رسیم.

#### مراجع

1. Losi. A and Secchetti. A., "First-Kind Fredholm Integral with Kernel of Hancel Type", Inverse Problems 15, PP. 281-290, 1999.
2. William. H. et al, "Numerical Recipes (The art of scientific computing)", Cambridge University Press 2<sup>nd</sup> Ed. 1992.
3. Szobathely. M. V., Brauer. P. and Jaroniec. M., "The Solution of Adsorption Integral Equations by Means of the Regularization Method", Journal of Computational Chemistry, Vol.13, No. 1, PP. 17-32, 1992.
4. Glob and Loan., "Matrix computation", third edition, 1996.
5. Venkatesh. P. K., "On Tikhonov Regularisation", Physica A, ELSEVIER, Vol. 284, PP. 448-460, 2000.
6. Merz. P. H., "Determination of Adsorption Energy Distribution by Regularization and a Characterization of Certain Adsorption Isotherms", Journal of Computational Physics, Vol. 38, PP. 64-85, 1980.
7. Hansen. O.<sup>1</sup>, Fischer. S.<sup>2</sup> and Ramlau. R.<sup>2</sup> "Regularization of Mellin-type Inverse Problems with an application to oil