

## ارائه‌ی رابطه‌ی تجربی جهت تخمین مقدار جذب سطحی گاز دی‌اکسید کربن روی محیط متخلخل

حمیدرضا تقفی\*، پژوهشکده‌ی ازدیاد برداشت نفت • میلاد عربلو، دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران شمال

### چکیده

حذف دی‌اکسید کربن از تجهیزات صنعتی از جمله تصفیه‌کننده‌ها و نیروگاه‌ها جهت کاهش انتشار، توجهات بسیاری را به‌خود معطوف کرده است. در میان فرآیندهای تبدیلی دی‌اکسید کربن، کاربرد جامدهای با سوراخ‌های ریز یکی از مهم‌ترین روش‌های نوید داده شده است. توصیف جذب دی‌اکسید کربن برای مواد در تقابل با محیط‌های متخلخلی که حفرات ریز دارند بر برخی مسائل مطالعات جذبی فعلی تمرکز دارد. در مطالعه‌ی حاضر روش‌های دقیق و تقویتی برای تخمین جذب دی‌اکسید کربن در جامدهای با سوراخ‌های ریز به‌عنوان تابعی از فشار و دمای نسبی دی‌اکسید کربن مدنظر است. عملکرد و دقت مدل‌های ساخته شده، مورد آزمایش قرار گرفته و قابلیت آنها در پیش‌بینی داده‌های پیشینه تأیید شده است. در این مطالعه رابطه‌ی تجربی جهت تخمین مقدار جذب گاز دی‌اکسید کربن روی محیط متخلخل ارائه می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که رابطه‌ی توسعه داده شده در مقایسه با ایزوترم‌های جذب کلاسیک شناخته شده، پیش‌بینی بهتری از تخمین داده‌های جذب دی‌اکسید کربن ارائه می‌کند. یافته‌های این مطالعه نشان می‌دهد که روش ارائه شده روشی قابل اعتماد جهت تحلیل و طراحی جداسازی دی‌اکسید کربن و فن‌آوری‌های پالایش در این زمینه است.

### اطلاعات مقاله

تاریخ ارسال نویسنده: ۹۵/۰۹/۲

تاریخ ارسال به داور: ۹۵/۰۹/۲

تاریخ پذیرش داور: ۹۵/۱۱/۰۲

### واژگان کلیدی:

دی‌اکسید کربن، مدل‌های جذبی، ANFIS، مدل رگرسیونی، تحلیل حساسیت

### مقدمه

عملیاتی مدل‌های جذبی برای طراحی ستونی مناسب محاسبه شده است.

در این مقاله بر اساس تحلیل آماری نرم‌افزار تجاری datafit، دو رابطه‌ی تجربی دقیق ارائه شده تا محاسبه‌ی ایزوترم‌های جذب دی‌اکسید کربن برای غربال مولکولی و کربن فعال شده در گستره‌های وسیع‌تری از دما و فشار انجام گردد. پس از آن قابلیت تخمین همبستگی‌های آماری، مدل توسعه یافته و مدل‌های جذب کلاسیک مقایسه خواهند شد. مدل‌های توسعه یافته می‌توانند به‌عنوان ابزار قابل اعتمادی برای پیش‌بینی سریع، ارزان و در عین حال کارآمد جذب دی‌اکسید کربن در غیاب تجهیزات آزمایشگاهی مناسب مطرح شوند.

### ۱- مدل‌های جذب سطحی

بسیاری از صورت‌ها در توضیح روابط تعادلی میان جاذب و جذب شونده ارائه شده‌اند. در این بخش فرمول کلی برخی مدل‌های ایزوترمی تجربی شناخته شده به‌صورت خلاصه بررسی می‌شود.

### ۱-۱- مدل ایزوترمی لانگمویر

مدل لانگمویر در پیشینه به‌گسترده‌گی و با تشریح فرآیندهای

معضلات اقلیمی و زیست‌محیطی از جمله گرم شدن جهانی، تغییر اقلیم، اسیدسازی اقیانوسی و بالا آمدن سطح دریا در اثر انتشار گازهای گلخانه‌ای جذب شده، توجه بسیاری را به‌خود جلب کرده است [۱]. دی‌اکسید کربن که یکی از گازهای مهم گلخانه‌ای است و در سالیان اخیر در کانون توجه قرار گرفته عامل ۶۳ درصد گرمای مربوط به همه‌ی گازهای گلخانه‌ای است [۲]. بسیاری از الزامات انرژی توسط سوخت‌های فسیلی و کمبوست سوخت‌ها به‌عنوان یکی از منابع حاکم دی‌اکسید کربن مطرح می‌شود.

طی دهه‌های گذشته تلاش‌های جهانی در خصوص توسعه‌ی فرآیندهای جدید برای کاهش سطح دی‌اکسید کربن جو و ممانعت از گرم شدن جهانی انجام شده است [۳]. در این میان تبدیل کربن و تجزیه‌ی آن به‌عنوان روشی قابل پیش‌بینی در مورد وساطت غلظت دی‌اکسید کربن جوی عمل می‌کند [۴]. جامدهای متخلخل مثل کربن‌های فعال، محیطی مناسب برای ذخیره‌ی گاز هستند. یکی از مهم‌ترین عوامل طی توسعه‌ی سیستم جذب گاز، تعیین دقیق مقدار گاز جذب شده در شرایط عملیاتی خاص است [۵]. تعیین تجربی داده‌های جذب نسبتاً زمان‌بر و گران‌قیمت است. بنابراین در اکثر شرایط مشخصه‌های جذبی سیستم جذب کننده-جذب کننده در شرایط

\* نویسنده‌ی عهده‌دار مکاتبات (h.saghafi@nioc.ir)

ارتباطی و  $n_s$  توان مدل سیس است که در آن شاخص هم جنسی مشاهده می شود.

## ۲- توسعه‌ی مدل تجربی

داده‌های ضروری جهت ارائه‌ی روش‌های مفیدی از جمله داده‌های تعادلی جذب سطحی به‌عنوان تابعی از دما و فشار مطرح می‌شوند (مثل ایزوترم‌های جذب دی‌اکسید کربن برای کربن فعال مطرح شده توسط استیو و همکاران [۱۰] و ایزوترم‌های جذب دی‌اکسید کربن برای غربال مولکولی مطرح شده توسط پاک‌سرشت و همکاران [۵]). معادله‌ی ۵- معادله‌ی پیشنهادی است که در آن ده ضریب برای برقراری ارتباط میان جذب سطحی دی‌اکسید کربن ( $q_{CO_2}$ ) به‌عنوان تابعی از دما (K) و فشار (bar) ارائه شده است.

$$\ln(q_{CO_2}) = A_1 + A_2 \times T + A_3 \times \ln(P) + A_4 \times T^2 + A_5 \times (\ln(P))^2 + A_6 \times T \times \ln(P) + A_7 \times T^3 + A_8 \times (\ln(P))^3 + A_9 \times T \times (\ln(P))^2 + A_{10} \times T^2 \times (\ln(P)) \quad (5)$$

برای ارائه‌ی مدل از نرم‌افزار datafit استفاده شد. داده‌های به‌کار رفته از منابع [۵ و ۱۰] هستند. در جدول ۱- ضرایب مرتبط ارائه شده‌اند. ضرایب تنظیمی معادله‌ی ۵- برای جذب سطحی دی‌اکسید کربن در غربال مولکولی به پوشش دادن دما از ۳۰۳-۵۷۳ درجه‌ی کلویین و فشار تا ۱۰ بار کمک

۱ | ضرایب تنظیم شده‌ی به‌کار رفته در معادله‌ی ۵-

ضرایب در معادله‌ی ۵-	غربال مولکولی	جاذب کربن فعال
$A_1$	7.9984E+07	-1.3313E+02
$A_2$	-6.1800E+05	1.3762E+00
$A_3$	8.4234E-01	-1.5271E+00
$A_4$	1.5426E+03	-4.7491E-03
$A_5$	-2.9439E-01	-1.7237E-02
$A_6$	-3.1679E-03	1.2611E-02
$A_7$	-1.2351E+00	5.3665E-06
$A_8$	2.7579E-02	-9.1682E-04
$A_9$	3.5077E-04	-2.1369E-05
$A_{10}$	5.4514E-06	-1.6884E-05

جذب سطحی مختلف همراه است. معادله‌ی ریاضی مدل لانگمویر طبق رابطه‌ی ۱- است [۶]:

$$q_e = \frac{Q_0 k_1 p}{1 + k_1 p} \quad (1)$$

که در آن  $q_e$  مقدار جذب سطحی تعادل،  $p$  فشار و  $k_1$  ثابت ایزوترمی لانگمویر و ظرفیت تک‌لایه‌ای نظری آنست. ایزوترم نشان‌دهنده‌ی جذب سطحی فیزیکی تک‌لایه‌ای در سطح یکنواخت است. ثابت‌های لانگمویر،  $k_1$  و  $Q_0$  از طریق خطی‌سازی معادله‌ی ۱- و با رسم  $1/Q_0$  بر حسب  $k_1$  به‌دست می‌آید.

## ۲-۱- مدل ایزوترمی فروندلیچ

مدل فروندلیچ [۷] شناخته‌شده‌ترین معادله‌ی تشریح‌کننده‌ی جذب سطحی غیرایده‌آل و معکوس است [۸]. معادله‌ی فروندلیچ به‌شکل رابطه‌ی ۲- بیان می‌شود:

$$q_e = k_f p^{n_f} \quad (2)$$

که در آن  $q_e$  مقدار جذب سطحی تعادل،  $p$  فشار و  $k_f$  و  $n_f$  به‌ترتیب ثابت مدل ایزوترم و نمای مدل هستند.

## ۳-۱- مدل ایزوترمی ردلیچ-پترسون

با در نظر گرفتن محدودیت‌های مدل‌های قبل، در سال ۱۹۵۹ مدل ایزوترم ردلیچ-پترسون [۹] ارائه شد. این مدل متغیرها را درون یک ایزوترم تجربی ترکیب می‌کند. ایزوترم ردلیچ-پترسون به‌شکل رابطه‌ی ۳- ارائه می‌گردد:

$$q_e = \frac{k_{RP} \times p}{1 + \alpha_{RP} p^{n_{RP}}} \quad (3)$$

که در آن  $q_e$  غلظت جذبی حالت جامد در تعادل،  $p$  فشار،  $k_{RP}$  ثابت ایزوترمی ردلیچ-پترسون و  $n_{RP}$  توانی بین یک و صفر است.

## ۴-۱- مدل ایزوترمی سیس

ایزوترم سیس طبق رابطه‌ی ۴- تعریف می‌شود:

$$q_e = \frac{k_s p^{n_s}}{1 + \alpha_s p^{n_s}} \quad (4)$$

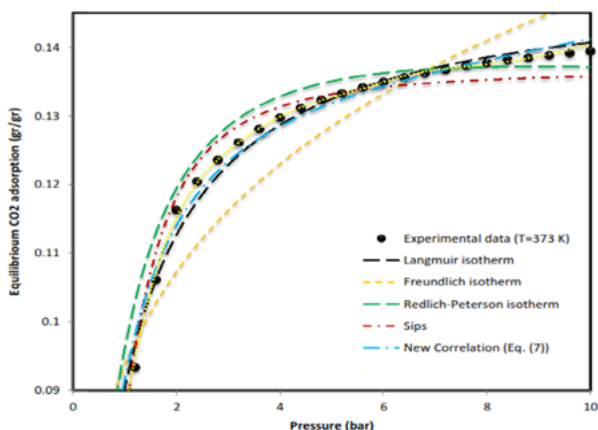
که در آن  $k_s$  ثابت ایزوترمی (تعداد کل مکان‌های اتصال)،  $\alpha_s$  ثابت

### ۳- نتایج و بحث و بررسی

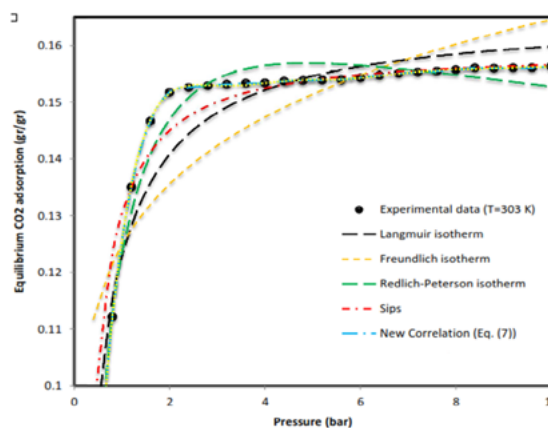
#### ۳-۱- ارزیابی مدل‌های توسعه یافته

شکل ۱- نشان‌دهنده‌ی نتایج ابزار پیشنهادی در مقایسه با داده‌های تجربی حاصل همراه با غربال مولکولی است [۵]. آشکار است که روش‌های پیشنهادی به‌خوبی در بازه‌ی دقتشان عمل می‌کنند. شکل ۲- نیز نشان‌دهنده‌ی نتایج

می‌کنند. همچنین ضریب توسعه داده شده برای جذب سطحی دی‌اکسیدکربن در مورد کربن فعال شده برای فشارها و دماهای بیش از ۳۵ بار و ۳۳۰ درجه‌ی کلوین مطرح می‌شود. با این وجود، اندازه‌های بهینه‌ی ضرایب تنظیمی در جدول ۱- می‌تواند به‌سرعت برای گستره‌ی عظیمی از شرایط تجربی و جاذب‌ها مطرح گردد.



شکل ۲ | تخمین جذب دی‌اکسیدکربن بر غربال مولکولی در دمای ۳۷۳ درجه‌ی کلوین با استفاده از روش‌های پیشنهادی در مقایسه با ایزوترم‌های کلاسیک جذب



شکل ۱ | تخمین جذب دی‌اکسیدکربن بر غربال مولکولی در دمای ۳۰۳ درجه‌ی کلوین با استفاده از روش‌های پیشنهادی در مقایسه با ایزوترم‌های کلاسیک جذب

#### ۲ | متغیرهای ایزوترم کلاسیک برای پیش‌بینی داده‌های جذب تعادلی دی‌اکسیدکربن بر کربن فعال [۱۱]

دما (کلوین)	ایزوترم لاتکیر		ایزوترم فرندلیچ		ایزوترم ردلیچ-پترسون			ایزوترم سیس		
	$Q_0$	$k_1$	$k_f$	$n_f$	$k_{RP}$	$\alpha_{RP}$	$n_{RP}$	$k_s$	$\alpha_s$	$n_s$
273.15	1.167	0.06532	0.1243	0.5444	0.1876	0.8008	0.6005	0.111	0.05095	0.7051
279.4	1.137	0.06012	0.1096	0.5648	0.2216	1.249	0.5445	0.1023	0.03823	0.6780
290.1	0.9938	0.05646	0.08689	0.5878	0.1958	1.441	0.5123	0.08288	0.02881	0.6728
310.5	0.7889	0.04722	0.05951	0.6084	0.08672	0.705	0.5493	0.05332	0.03337	0.7397
323.3	0.7294	0.04011	0.04703	0.6350	0.05395	0.4217	0.5786	0.04027	0.03116	0.7866
299.1	0.4851	0.1280	0.06169	0.6688	0.1166	0.9076	0.5397	0.06431	0.06966	0.7953
310.2	0.422	0.1174	0.04794	0.7026	0.09719	1.022	0.4826	0.05001	0.05424	0.8008
319.2	0.4041	0.1008	0.04051	0.7209	0.06932	0.7241	0.5067	0.04179	0.05287	0.8286

۳ | متغیرهای ایزوترم کلاسیک برای پیش‌بینی داده‌های جذب تعادلی دی‌اکسیدکربن بر غربال مولکولی [۱۲]

دما (کلوین)	ایزوترم لانگمیر		ایزوترم فرندلیچ		ایزوترم ردلیج-پترسون			ایزوترم سیبس		
	Q <sub>0</sub>	k <sub>L</sub>	k <sub>f</sub>	n <sub>f</sub>	k <sub>RP</sub>	α <sub>RP</sub>	n <sub>RP</sub>	k <sub>S</sub>	α <sub>S</sub>	n <sub>S</sub>
303	0.1654	2.862	0.1247	0.1205	0.2848	1.317	1.127	0.7141	4.566	1.924
373	0.15	1.51	0.09363	0.1969	0.1923	1.151	1.048	0.2351	1.611	1.137
573	0.1139	0.06961	0.008814	0.7347	0.6932	77.69	0.2677	0.008442	0.0486	0.8845

$$\text{Error (\%)} = \frac{q_{CO_2}^{experimental} - q_{CO_2}^{predicted}}{q_{CO_2}^{experimental}} \times 100$$

۴ | مقایسه‌ی نتایج پیش‌بینی شده‌ی رویکردهای مختلف با برخی از داده‌های آزمایشگاهی جذب دی‌اکسیدکربن بر کربن فعال [۱۱]

دما (کلوین)	فشار (بار)	q <sub>CO<sub>2</sub></sub> <sup>exp</sup> (gr/gr)	ایزوترم لانگمیر	خطا (%) <sup>a</sup>	ایزوترم فرندلیچ	خطا (%)	ایزوترم ردلیج-پترسون	خطا (%)	ایزوترم سیبس	خطا (%)	معادله‌ی جدید (Eq8)	خطا (%)		
273.3	1.589	0.148	0.110	25.9	0.160	-8.1	0.145	2.1	0.144	2.9	0.151	-1.8		
273.3	2.056	0.174	0.138	20.6	0.184	-5.8	0.173	0.8	0.170	2.2	0.177	-1.8		
273.3	20.112	0.654	0.663	-1.3	0.637	2.6	0.644	1.5	0.647	1.0	0.638	2.5		
273.3	33.663	0.809	0.802	0.8	0.843	-4.2	0.829	-2.5	0.824	-1.8	0.816	-0.9		
279.4	0.298	0.042	0.020	52.4	0.055	-31.7	0.040	4.5	0.044	-5.4	0.042	-0.7		
279.4	0.426	0.054	0.028	47.4	0.068	-25.3	0.053	2.1	0.056	-4.0	0.055	-1.4		
279.4	3.807	0.237	0.212	10.6	0.233	1.6	0.235	0.7	0.231	2.4	0.235	0.7		
279.4	12.65	0.466	0.491	-5.4	0.459	1.4	0.469	-0.7	0.471	-1.1	0.471	-1.1		
279.4	34.366	0.780	0.766	1.8	0.695	10.9	0.685	12.2	0.683	12.5	0.786	-0.8		
290.1	0.861	0.071	0.046	35.1	0.080	-12.1	0.072	-1.7	0.073	-2.9	0.070	1.6		
290.1	3.683	0.191	0.171	10.4	0.187	2.1	0.189	0.9	0.186	2.4	0.188	1.5		
290.1	31.991	0.661	0.640	3.2	0.666	-0.8	0.659	0.3	0.658	0.5	0.662	-0.2		
299.1	0.739	0.047	0.042	10.8	0.050	-7.2	0.049	-3.5	0.048	-2.0	0.050	-5.9		
310.2	0.251	0.016	0.012	24.5	0.018	-13.4	0.016	0.0	0.016	-1.5	0.016	-0.9		
310.5	30.583	0.472	0.466	1.2	0.477	-1.0	0.472	-0.1	0.472	0.0	0.471	0.1		
310.5	31.727	0.482	0.473	1.8	0.488	-1.2	0.482	0.0	0.481	0.2	0.481	0.2		
310.5	34.542	0.505	0.489	3.2	0.513	-1.7	0.505	0.0	0.502	0.5	0.505	0.1		
319.2	0.445	0.021	0.017	17.4	0.023	-7.6	0.021	0.8	0.021	0.9	0.021	-2.0		
323.3	17.824	0.298	0.304	-2.0	0.293	1.7	0.297	0.2	0.299	-0.2	0.297	0.3		
323.3	20.2	0.321	0.326	-1.7	0.317	1.2	0.320	0.2	0.322	-0.2	0.321	0.0		
متوسط خطای مطلق (%)			13/88%			7/08%			1/74%			2/23%		1/23%

$$\text{Error (\%)} = \frac{q_{CO_2}^{\text{experimental}} - q_{CO_2}^{\text{predicted}}}{q_{CO_2}^{\text{experimental}}} \times 100$$

۵ | مقایسه‌ی نتایج پیش‌بینی شده‌ی رویکردهای مختلف با برخی از داده‌های آزمایشگاهی [۱۲]

دما (کلوین)	فشار (بار)	$q_{CO_2}^{\text{exp}}$ (gr/gr)	ایزوترم لاتمیر	خطا (%) <sup>a</sup>	ایزوترم مفرندلیج	خطا (%)	ایزوترم ردلیج-پتسون	خطا (%)	ایزوترم سیس	خطا (%)	معادله‌ی جدید (Eq. (8))	خطا (%)	مدل ANFIS	خطا (%)
303	0.8	0.1121	0.1151	-2.7	0.1214	8.3	0.1126	-0.4	0.1170	-4.4	0.1117	0.4	0.1120	1.1E-01
303	2.4	0.1526	0.1444	5.4	0.1386	-9.2	0.1508	1.2	0.1503	1.5	0.1515	0.7	0.1529	-2.0E-01
303	2.8	0.1529	0.1470	3.8	0.1412	-7.7	0.1533	-0.3	0.1518	0.7	0.1539	-0.6	0.1530	-5.9E-02
303	6.8	0.1550	0.1573	-1.5	0.1571	1.3	0.1559	-0.5	0.1555	-0.3	0.1557	-0.4	0.1550	3.4E-02
303	7.2	0.1553	0.1577	-1.6	0.1582	1.9	0.1555	-0.2	0.1556	-0.2	0.1554	-0.1	0.1553	-3.6E-02
303	7.6	0.1554	0.1581	-1.7	0.1592	2.4	0.1552	0.2	0.1557	-0.2	0.1551	0.2	0.1556	-7.7E-02
373	0.4	0.0547	0.0565	-3.2	0.0782	42.8	0.0534	2.5	0.0529	3.4	0.0532	2.9	0.0556	-1.6
373	5.6	0.1341	0.1341	0.0	0.1314	-2.0	0.1346	-0.3	0.1342	0.0	0.1334	0.5	0.1340	9.5E-02
373	6.0	0.1349	0.1351	-0.1	0.1332	-1.3	0.1353	-0.3	0.1350	-0.1	0.1343	0.4	0.1350	-1.4E-02
373	6.4	0.1356	0.1359	-0.3	0.1349	-0.5	0.1359	-0.3	0.1357	-0.1	0.1352	0.3	0.1358	-1.7E-01
373	6.8	0.1362	0.1367	-0.4	0.1366	0.3	0.1365	-0.2	0.1364	-0.1	0.1360	0.2	0.1365	-1.8E-01
373	7.2	0.1367	0.1374	-0.5	0.1381	1.0	0.1369	-0.1	0.1369	-0.1	0.1367	0.0	0.1369	-1.0E-01
373	7.6	0.1373	0.1380	-0.5	0.1396	1.7	0.1373	0.0	0.1374	-0.1	0.1374	-0.1	0.1372	4.9E-02
373	8.0	0.1377	0.1385	-0.6	0.1410	2.4	0.1377	0.0	0.1379	-0.1	0.1381	-0.3	0.1375	1.3E-01
573	1.2	0.0105	0.0088	16.5	0.0101	-4.2	0.0101	4.2	0.0098	6.6	0.0100	4.5	0.0098	6.4
573	1.6	0.0128	0.0114	10.9	0.0124	-2.8	0.0124	2.8	0.0125	2.5	0.0125	2.2	0.0124	3.0
573	3.6	0.0217	0.0228	-5.2	0.0226	4.1	0.0226	-4.1	0.0239	-9.9	0.0225	-3.6	0.0216	4.8E-01
573	4.0	0.0236	0.0248	-5.0	0.0244	3.3	0.0244	-3.3	0.0259	-9.4	0.0242	-2.5	0.0236	1.8E-01
573	8.0	0.0413	0.0407	1.3	0.0406	-1.6	0.0406	1.6	0.0426	-3.2	0.0406	1.6	0.0409	1.0
573	8.4	0.0426	0.0420	1.2	0.0421	-1.1	0.0421	1.1	0.0440	-3.5	0.0422	0.8	0.0420	1.3
573	8.8	0.0437	0.0433	0.9	0.0436	-0.2	0.0436	0.2	0.0454	-4.0	0.0438	-0.4	0.0432	1.0
متوسط خطای مطلق (%)			3.01%		4.77%		1.13%		2.40%		1.08%		0.77%	

ابزارهای توسعه یافته در این مطالعه می‌توانند مقادیر عملی و مهندسی را برای تصمیم‌گیری منجر به تصمیمات آگاهانه جهت گزینش جاذب‌ها برای کاربرد در هر صنعت فرآیندی به دست دهند.

### نتیجه‌گیری

تعیین دقیق جذب سطحی دی‌اکسید کربن در فشارها و دماهای مختلف، متغیری کلیدی در تبدیل دی‌اکسید کربن و الگوهای ذخیره‌سازی آنست. با حفظ این موضوع در ذهن، مطالعه‌ای فعلی بر کاربرد روش‌های مدل‌سازی ریاضی برای پیش‌بینی دقیق جذب سطحی دی‌اکسید کربن در دما و فشار بالا مانده‌ی جاذب‌های با تخلخل ریز تمرکز دارد. مقادیر کمتر خطاهای پیش‌بینی نشان دادند که پیش‌بینی‌های مدل ارائه شده برای داده‌های تجربی مناسبند و مدل‌های ارائه شده در مقایسه با دیگر ایزوترم‌های جذب سطحی کلاسیک شناخته شده از جمله لانگمویر، فروندلیچ، ردلیچ-پترسون و سیس، سازگاری بهتری با داده‌های تجربی دارند. روش توسعه یافته می‌تواند در بررسی سریع ظرفیت‌های جذب سطحی یک جاذب در فشار و دماهای مختلف بدون ضرورت انجام هر آزمایش، مقادیری عملی را برای دانشمندان و مهندسان در نظر بگیرد.

روش‌های پیشنهادی برای تخمین جذب سطحی دی‌اکسید کربن است. ایزوترم‌ها در کربن فعال شده به‌عنوان تابعی از فشار و دما عمل می‌کنند. برای قضاوت صحیح، مقادیر پیش‌بینی شده برای گستره‌ی وسیعی از دما و فشار معقول به‌نظر می‌رسد.

جداول-۳ و ۲ متغیرهای مدل‌های کلاسیک یا سنتی متنوع شامل لانگمویر، ردلیچ-پترسون و سیس را برای پیش‌بینی داده‌های ایزوترم در مورد دی‌اکسید کربن در غربال مولکولی و کربن فعال شده در دماهای مختلف نشان می‌دهند. خلاصه‌ای از تخمین‌ها در مورد روش‌های پیشنهادی و همچنین مدل‌های جذب سطحی سنتی در جداول-۴ و ۵ نشان داده شده است. در تطابق با نتایج این نتیجه حاصل می‌شود که هر دو روش ارائه شده برای تخمین جذب دی‌اکسید کربن در غربال مولکولی و کربن فعال شده می‌توانند داده‌های گزارش شده در پیشینه را با دقت مناسبی مدنظر قرار دهند [۱۰ و ۱۵]. این سازگاری با دیگر روابط موجود درون گستره‌ی بررسی شده قابل دست‌یابی نیست. رابطه‌ی توسعه یافته رابطه‌ای کاملاً تجربی است که با توجه به نوع داده‌ها و ارتباط بین متغیرهای مسأله، طرح و قالب را به‌صورت مدل یک چندجمله‌ای با ضرایب کسری با توانی یا لگاریتمی و ... پیشنهاد می‌دهد.

### منابع

- [1] J. Raven, K. Caldeira, H. Elderfield, O. Hoegh-Guldberg, P. Liss, U. Riebesell, J. Shepherd, C. Turley, A. Watson, Ocean acidification due to increasing atmospheric carbon dioxide, The Royal Society, 2005.
- [2] Y. Luo, B. Tan, Microporous Organic Polymers for Carbon Dioxide Capture, in: Porous Materials for Carbon Dioxide Capture, Springer, 2014, pp. 143-180.
- [3] R.S. Tol, On the optimal control of carbon dioxide emissions: an application of FUND, Environmental Modeling & Assessment, 2 (1997) 151-163.
- [4] S.A. Rackley, Chapter 11 - Geological Storage, in: S.A. Rackley (Ed.) Carbon Capture and Storage, Butterworth-Heinemann, Boston, 2010, pp. 227-266.
- [5] S. Pakseresht, M. Kazemeini, M.M. Akbarnejad, Equilibrium isotherms for CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> and C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> on the 5A molecular sieve by a simple volumetric apparatus, Separation and Purification Technology, 28 (2002) 53-60.
- [6] J.M. Smith, Chemical engineering kinetics, McGraw-Hill, 1981.
- [7] H. Freundlich, Uber die adsorption in lasugen, Zeitschrift fur Physikalische Chemie (Leipzig) A, 57 (1906) 385-470.
- [8] I. Langmuir, The adsorption of gases on plane surfaces of glass, mica and platinum, Journal of the American Chemical Society, 40 (1918) 1361-1403.
- [9] O. Redlich, D.L. Peterson, A Useful Adsorption Isotherm, The Journal of Physical Chemistry, 63 (1959) 1024-1024.
- [10] I.A. Esteves, M.S. Lopes, P. Nunes, J.P. Mota, Adsorption of natural gas and biogas components on activated carbon, Separation and Purification Technology, 62 (2008) 281-296.
- [11] I.A. Esteves, M.S. Lopes, P. Nunes, J.P. Mota, Adsorption of natural gas and biogas components on activated carbon, Separation and Purification Technology, 62 (2008) 281-296.
- [12] S. Pakseresht, M. Kazemeini, M.M. Akbarnejad, Equilibrium isotherms for CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> and C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> on the 5A molecular sieve by a simple volumetric apparatus, Separation and Purification Technology, 28 (2002) 53-60.