Modeling of the Effect of Nanoparticles on CO2/CH4 Selectivity of Poly (4-methyl-1-pentene)-Based Mixed Matrix Membranes

By Ali H Alibak

Soran University (SUN)

Faculty of Engineering

لینکی توێژینەوە:

https://doi.org/10.1007/s13369-024-09216-x

eng.soran.edu.iq

Abstract

Membrane-based technologies have a broad range of industrial applications for separating specific substances from either liquid or gas mixtures. Removing carbon dioxide (CO2) from natural gas is likely the most important application of membrane technology in the gas processing field. Although it is possible to fabricate many polymer-based membranes to separate CO2 from a gas mixture mainly consisting of methane (CH4), their CO2 permeability, CO2/CH4 selectivity, stability, and price are not good enough. So, researchers enhance the achievable CO2/CH4 selectivity by incorporating nanomaterials in the polymer structure, i.e., mixed matrix membranes (MMMs). Those MMMs constitute Poly (4-methyl-1-pentene) (i.e., PMP) and nanoparticles have recently found high popularity in this regard. Despite conducting many experiments to monitor the CO2–CH4 separation ability of these MMMs, there is no mathematical model to compute CO2/CH4 selectivity as a function of membrane chemistry and pressure. This study applies support vector machines (SVM) to build a model to precisely compute the CO2/CH4 selectivity of PMP-containing MMMs from the membrane chemistry (i.e., nanofiller type/dose and polymer dose) and pressure. The relevancy test proves that CO2/CH4 selectivity correlates well with all involved design features, so the nanofiller type and polymer dose are the strongest. Sensitivity analyses confirm that the SVM provides the lowest uncertainty once it is equipped with the Gaussian kernel function. This model predicts the collected literature data with an absolute average relative error of 3.23%. The leverage method identified four outliers among the experimentally measured CO2/CH4 databank of the considered PMP-containing mixed matrix membranes

الملخص

تتمتع التقنيات القائمة على الأغشية بمجموعة واسعة من التطبيقات الصناعية لفصل مواد معينة من مخاليط السوائل أو الغازات. ومن المرجح أن يكون إزالة ثاني أكسيد الكربون (CO2) من الغاز الطبيعي هو التطبيق الأكثر أهمية لتكنولوجيا الأغشية في مجال معالجة الغاز. على الرغم من أنه من الممكن تصنيع العديد من الأغشية القائمة على البوليمر لفصل ثاني أكسيد الكربون عن خليط غاز يتكون بشكل أساسي من الميثان (CH4)، إلا أن نفاذية ثاني أكسيد الكربون وانتقائية ثاني أكسيد الكربون/الميثان واستقرارها وسعرها ليست جيدة بما فيه الكفاية. لذا، يعمل الباحثون على تعزيز انتقائية ثاني أكسيد الكربون/الميثان القابلة للتحقيق من خلال دمج المواد النانوية في بنية البوليمر، أي الأغشية ذات المصفوفة المختلطة (MMMs). تشكل هذه الأغشية ذات المصفوفة المختلطة بولي (4-ميثيل-1-بنتين) (أي PMP) وقد وجدت الجسيمات النانوية مؤخرًا شعبية كبيرة في هذا الصدد. على الرغم من إجراء العديد من التجارب لمراقبة قدرة هذه الأغشية ذات المصفوفة المختلطة على فصل ثاني أكسيد الكربون-الميثان، لا يوجد نموذج رياضي لحساب انتقائية ثاني أكسيد الكربون/الميثان كدالة لكيمياء الغشاء والضغط. تطبق هذه الدراسة آلات الدعم المتجهة (SVM) لبناء نموذج لحساب انتقائية CO2/CH4 بدقة لأغشية المصفوفة المختلطة المحتوية على PMP من كيمياء الغشاء (أي نوع/جرعة الحشو النانوي وجرعة البوليمر) والضغط. يثبت اختبار الصلة أن انتقائية CO2/CH4 ترتبط جيدًا بجميع ميزات التصميم المعنية، وبالتالي فإن نوع الحشو النانوي وجرعة البوليمر هما الأقوى. تؤكد تحليلات الحساسية أن SVM توفر أدنى درجة من عدم اليقين بمجرد تزويدها بدالة النواة الغاوسية. يتنبأ هذا النموذج ببيانات الأدبيات المجمعة بخطأ نسبي متوسط مطلق يبلغ 3.23٪. حددت طريقة الرافعة المالية أربع قيم متطرفة بين قاعدة بيانات CO2/CH4 المقاسة تجريبياً للأغشية المصفوفة المختلطة المحتوية على PMP.

پوختە

تەکنەلۆژیاکانی بنەمای پەردە کۆمەڵێک بەکارهێنانی پیشەسازی بەرفراوانیان هەیە بۆ جیاکردنەوەی ماددە تایبەتەکان لە تێکەڵەی شلە یان گازی. لابردنی دووەم ئۆکسیدی کاربۆن (CO2) لە گازی سروشتی پێدەچێت گرنگترین بەکارهێنانی تەکنەلۆژیای پەردە بێت لە بواری پرۆسێسکردنی غازدا. هەرچەندە دەتوانرێت زۆرێک لە پەردەی بنەمای پۆلیمر دروست بکرێت بۆ جیاکردنەوەی CO2 لە تێکەڵەیەکی گازی کە بە شێوەیەکی سەرەکی لە میتانی (CH4) پێکهاتووە، بەڵام توانای ڕژانی CO2، هەڵبژاردنی CO2/CH4، سەقامگیری و نرخیان بەس نییە. کەواتە، توێژەران هەڵبژاردنی CO2/CH4ی بەدەست هێنراو بەرز دەکەنەوە بە تێکەڵکردنی نانۆماددە لە پێکهاتەی پۆلیمردا، واتە، پەردەی ماتریکسی تێکەڵ (MMMs). ئەو MMMانە پۆلی (4-میثیل-1-پێنتین) (واتە، PMP) پێکدەهێنن و نانۆگەردیلەکان لەم دواییانەدا ناوبانگێکی بەرزیان لەم ڕووەوە دۆزیەوە. سەرەڕای ئەنجامدانی زۆرێک لە تاقیکردنەوەکان بۆ چاودێریکردنی توانای جیاکردنەوەی CO2–CH4ی ئەم MMMانە، هیچ مۆدێلێکی بیرکاری نییە بۆ حیسابکردنی هەڵبژاردنی CO2/CH4 وەک کارکردی کیمیای پەردە و پەستان. ئەم توێژینەوەیە ئامێری ڤێکتەری پشتگیری (SVM) بەکاردەهێنێت بۆ دروستکردنی مۆدێلێک بۆ حیسابی وردی هەڵبژاردنی CO2/CH4ی MMMی PMP-پێکهاتوو لە کیمیای پەردە (واتە، جۆری نانۆفیلەر/ژەمە و ژەمی پۆلیمر) و پەستان. تاقیکردنەوەی پەیوەندیدارێتی دەیسەلمێنێت کە هەڵبژاردنی CO2/CH4 پەیوەندییەکی باشی لەگەڵ هەموو تایبەتمەندییە دیزاینە بەشداربووەکاندا هەیە، بۆیە جۆری نانۆفیلەر و ژەمی پۆلیمر بەهێزترینن. شیکارییەکانی هەستیاری پشتڕاستی دەکەنەوە کە SVM کەمترین نادڵنیایی دابین دەکات کاتێک بە فەنکشنی ناوکی گاوسی تەیار دەکرێت. ئەم مۆدێلە پێشبینی داتای ئەدەبیاتی کۆکراوە دەکات بە تێکڕای هەڵەی ڕێژەیی 3.23%. شێوازی بەکارهێنانی چوار لایەنی دەرەوەی لە نێوان بانکی داتاکانی CO2/CH4 کە بە شێوەیەکی تاقیکاری پێوانە کراوە لە پەردەی ماتریکسی تێکەڵاوی PMP-ی تێدایە کە لەبەرچاو گیراوە دەستنیشان کرد.

About Soran University

Soran University (SUN) is located in the city of Soran, which is about a two-hour drive north-east of Erbil (Arbil, Hewlér), the capital of the Kurdistan Region of Iraq (KRIQ). The city is flanked by the famous Korek, Zozik, Henderén, and Biradost mountains. The medieval mountain village of Rewandiz (Rawanduz, ڕەواندز) is a stone-cast away, and the two cities share this lovely, harmonious upland. While waiting for its green, environmentally friendly building to be erected on a hilltop overlooking the cities of Soran and Rewandiz, its existing city campus has been meticulously set out to accommodate the lovely natural landscape. The new campus will be the first of its type, being walkable, balanced, powered by renewable energy, and compliant with all international environmental regulations. There are 5 Faculties in SUN; Faculty of Arts (FAAR), Faculty of Science (FSCN), Faculty of Education (FEDU), Faculty of Law, Political Science, and Management (FLAW/PSM), and Faculty of Engineering (FENG). Also, there is SUN research centre. Moreover, at SUN, there is a Language Center. SUN signed many Memoranda of Understandings (MoU) with many International Universities,

How to get here

Soran University (SUN) is located in the heart of the city of Soran. The main city campus is easily found on Google Maps for direction.