نهمین همایش بین‌المللی
توسعه فناوری در نفت، گاز، پالایش و پتروشیمی
9th International Conference on
Technology Development in Oil, Gas, Refining and Petrochemicals
www.oil.bcnf.ir

مدل سازی و شبیه سازی نرم افزاری فرآیند جداسازی آلاینده گلخانه ای دی اکسید کربن با استفاده از محلول جاذب متیل دی اتانول آمین در تماس دهنده غشایی الیاف توخالی

مسعود اسدی[۱]، علی تقوای نخجیری[۲*]

[۱]گروه مهندسی شیمی، دانشگاه آزاد اسلامی واحد ماهشهر، ماهشهر، ایران

[۲]دانشکده نفت و مهندسی شیمی، دانشگاه آزاد اسلامی علوم و تحقیقات، تهران، ایران

(masoodasadi1364@yahoo.com)

چکیده

در سالیان اخیر، انتشار بی رویه و فراتر از حد استاندارد آلاینده های مضر گلخانه ای نظیر دی اکسید کربن به معضلی جهانی تبدیل شده است. از این رو، انگیزه دانشمندان و محققین در سراسر جهان معطوف به یافتن راه های نوین، کارآمد و سازگار با محیط زیست جهت افزایش راندمان جذب و کاهش انتشار آن شده است. تماس دهنده های غشایی الیاف توخالی یکی از تکنیک های نسبتا جدید در صنعت شیرین سازی گاز بوده که به دلیل مزایای مهمی نظیر راندمان بالا، سهولت در ساخت و نبود طغیان و کف زایی در حین فرآیند توانسته محبوبیت زیادی را به دست آورد. هدف اصلی این مقاله توسعه یک مدل ریاضی و یک شبیه‌سازی محاسباتی دو بعدی برای ارزیابی راندمان جداسازی دی اکسیدکربن از مخلوط گازی دی اکسیدکربن/ متان در حالت عدم ترشوندگی منافذ غشا با استفاده از محلول آمینی متیل دی اتانول آمین (MDEA) است. با هدف ارزیابی دقت مدل توسعه یافته، نتایج آن با داده های تجربی مقایسه شد. مقایسه نتایج بیانگر وجود خطای نسبی حدود ۵٪ بود از این رو اعتبار مدل سازی و شبیه سازی انجام شده تضمین شده است. ارزیابی نتایج حاکی از بازدهی بالای متیل دی اتانول آمین در زدایش دی اکسید کربن با درصد زدایش ۹۸٪ است. همچنین دریافته شد افزایش یک سری از پارامترهای عملیاتی تخلخل، طول مدول غشایی و تعداد الیاف توخالی به دلیل افزایش ضریب نفوذ، زمان ماند و نرخ انتقال جرم تاثیر مثبتی بر راندمان جداسازی دارد در حالی که افزایش ضریب پیچش غشا و سرعت جریان گاز باعث افزایش مقاومت در برابر انتقال جرم می‌شود و در نتیجه باعث کاهش میزان بازدهی زدایش می شود.

کلمات کلیدی: مدول غشایی، محلول آمینی، شبیه سازی، راندمان زدایش.

۱. مقدمه

در دهه‌های گذشته، گسترش فعالیت‌های صنعتی منجر به افزایش غلظت آلاینده‌های گلخانه ای نظیر دی‌اکسیدکربن، هیدروژن سولفید، نیتروژن دی اکسید در اتمسفر شده است [۱-۳]. بنابراین، فرآیند جداسازی دی اکسید کربن از مخلوط‌های گازی مختلف به عنوان یک فرض ضروری و غیرقابل انکار برای کاهش انتشار انسانی این آلاینده با هدف مدیریت اثرات مخرب آن مانند آلودگی هوا، گرمایش جهانی، باران های اسیدی و و خوردگی در خطوط لوله تلقی می‌شود [۴-۶]. اصولاً تکنیک‌های رایج جذب مانند ستون‌های حباب‌دار، تقطیر برودتی و همچنین برج‌های سینی برای جداسازی دی اکسید کربن در دسترس هستند که استفاده از هر یک از آن‌ها به طور قابل‌توجهی به پارامترهای عملیاتی مختلف مانند غلظت اولیه ، دما، فشار خوراک و همچنین ماهیت سایر اجزای موجود در مخلوط گازی بستگی دارد. جدای از وجود اهمیت تجاری غیرقابل انکار، تکنیک های جذب فوق از چندین محدودیت عملیاتی مانند هزینه سرمایه گذاری بالا، نیاز به فضای زیاد و طغیان رنج می برند [۷, ۸]. بنابراین، به نظر می‌رسد که توسعه تکنیک‌های کارآمدتر با هدف حذف آلاینده‌های اسیدی و ارتقای راندمان زدایش آلاینده های گلخانه ای از جریان‌های گازی، یک نیاز حیاتی باشد. تماس دهنده غشایی الیاف توخالی (HFMC) که به طور همزمان از مزایای فرآیندهای جداسازی غشا و تکنیک های جذب سنتی برخوردار است، می تواند به طور قابل توجهی بر محدودیت های فنی و عملیاتی فرآیندهای جذب سنتی غالب شود و ممکن است به عنوان یک فناوری جایگزین رقابتی و کارآمد در نظر گرفته می شود [۹-۱۱].

تماس دهنده غشایی الیاف توخالی یک تجهیزات فرآیندی است که تماس گاز/مایع را بدون پراکندگی یک فاز در فاز دیگر فراهم می‌کند. کنترل دقیق گرادیان فشار بین فازهای گاز/مایع باعث به دام افتادن سیالات در منافذ غشایی می شود که منجر به ظهور یک فصل مشترک گاز/مایع در هر منفذ می شود. این رویکرد مزایای مختلفی را در مقایسه با تماس دهنده‌های سنتی فاز پراکنده (به عنوان مثال برج‌های سینی دار) نظیر نسبت سطح به حجم بالا و عدم وجود امولسیون در مقیاس بزرگ ارائه می‌کند [۱۲, ۱۳]. در سالیان اخیر، بسیاری از محققین راندمان جداسازی دی اکسید کربن از مخلوط های گازی را مورد مطالعه قرار دادند. برای رسیدن به بهتر درک در مورد مکانیسم جداسازی این آلاینده از طریق تماس دهنده غشایی الیاف توخالی میکرو متخلخل، ژانگ و همکاران به طور ریاضی و تجربی عملکرد حذف دی‌اکسیدکربن را با استفاده از جاذب دی اتانول آمین (DEA) و آب مقطر درون تماس دهنده غشایی الیاف توخالی بررسی کردند. آن‌ها تأیید کردند که در شرایط عملیاتی ثابت، محلول جاذب دی اتانول آمین

حدود ۹۵٪ از دی اکسید کربن موجود در مخلوط گازی را جدا می کند در حالی که درصد جداسازی با استفاده از آب مقطر فقط ۲۵ ٪ بود [۱۴]. رضاکاظمی و همکاران یک مدل ریاضی دو بعدی برای مطالعه جداسازی همزمان دی اکسید کربن و هیدروژن سولفید از گاز طبیعی با استفاده از متیل دی اتانول آمین پیشنهاد کردند. آن‌ها دریافتند متیل دی اتانول آمین می تواند تقریباً تمام هیدروژن سولفید و حدود ۸۰ درصد دی اکسید کربن ورودی به سیستم را حذف کند [۱۵]. اخیراً استفاده از روش اجزا محدود (FEM)برای تجزیه و تحلیل عملکرد حذف گازهای گلخانه‌ای مختلف از جریان‌های گازی و همچنین شبیه‌سازی پدیده های مختلف انتقال نظیر مومنتوم، جرم و حرارت توسط محققین مختلف توسعه یافته است و دقت قابل قبولی در مقایسه با داده‌های تجربی نشان می‌دهد [۱۶-۱۸]. به عنوان مثال، اسلامی و همکاران گزارش کردند که UMFPACK به دلیل عملگرد حافظه قابل توجهی که دارد به عنوان یک حل کننده عددی مناسب در نظر گرفته می شود [۱۶].

هدف این مقاله توسعه یک مدل ریاضی و یک شبیه سازی دوبعدی برای مطالعه راندمان جداسازی دی اکسیدکربن از مخلوط گازی دی اکسیدکربن/ متان با استفاده از با استفاده از محلول آمینی متیل دی اتانول آمین (MDEA) در داخل تماس دهنده غشایی الیاف توخالی است. همچنین تأثیر عوامل مختلف عملیاتی و مشخصات ماژول الیاف توخالی مانند سرعت جریان گاز، سرعت جریان مایع ، تعداد الیاف توخالی، تخلخل و پیچش غشا، طول مدول غشایی بر روی راندمان جداسازی CO_2 با استفاده از مدل پیشنهادی بررسی شده است.

۲. توسعه مدل ریاضی

در این مقاله، یک مدل‌سازی ریاضی جامع به همراه یک شبیه‌سازی دوبعدی به منظور حل معادلات جرم و مومنتوم فازهای گاز و مایع و همچنین ارزیابی راندمان جداسازی CO_2 درون تماس‌دهنده غشایی الیاف توخالی میکرو متخلخل از جنس پلی‌پروپیلن توسعه داده می‌شود. محلول جاذب متیل دی‌اتانول‌آمین به عنوان جاذب برای جداسازی CO_2 استفاده شد. گاز ورودی متشکل از مخلوطی از CO_2 و CH_4، در سمت پوسته از $z = L$ به سمت پایین حرکت می‌کند و جاذب مایع در سمت لوله به سمت بالا (از $z = 0$ به سمت $z = L$) تغذیه می‌شود. شمای کلی تماس‌دهنده غشایی الیاف توخالی مورد استفاده در پژوهش حاضر به وضوح در شکل ۱ نشان داده شده است. مدل سطح آزاد هاپل به طور کلی برای پیش‌بینی شعاع مؤثر فرضی پوسته در اطراف هر فیبر توخالی

استفاده می‌شود [۱۹]. بر اساس این مدل، تنها بخشی از سیال که فیبرها را در بر می‌گیرد در نظر گرفته شده و می‌توان آن را به صورت مقطع دایره‌ای تخمین زد. به منظور ساده سازی معادلات حاکم و توسعه مدل سازی جامع، مفروضات زیر به کار می رود:

۱) حالت پایدار و شرایط همدما

۲) عدم وجود گرادیان زاویه ای

۳) وجود حالت عدم ترشوندگی حفرات غشا

۴) عدم وجود واکنش شیمیایی در فاز گاز

۵) استفاده از قانون هنری برای بررسی تعادل گاز/مایع فصل مشترک دو فاز

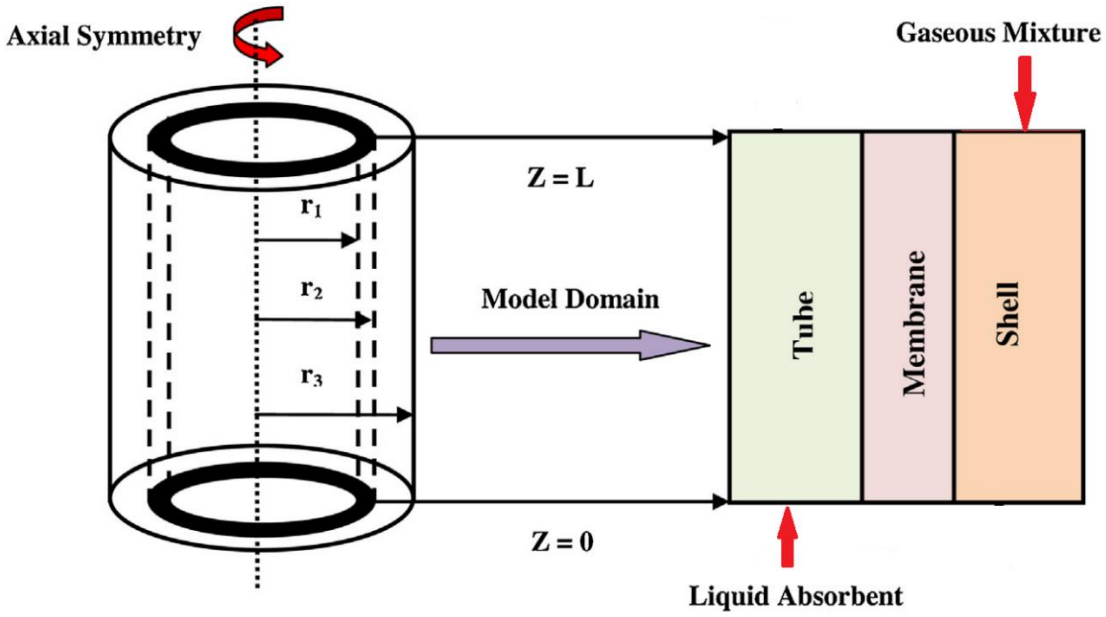
۶) استفاده از مدل سطح آزاد هاپل برای پیش‌بینی شعاع موثر فرضی پوسته در اطراف هر رشته میان‌تهی

۷) الگوی جریان ناهمسوی گاز/ مایع در داخل تماس‌دهنده

۸) فرض رفتار گاز ایده‌آل در داخل پوسته

۹) وجود رژیم جریان آرام مایع و گاز آرام در داخل به ترتیب محفظه‌های لوله و پوسته

شکل ۱ شمای یک تماس دهنده غشایی الیاف توخالی و جریان گاز و مایع درون هر هندسه تماس دهنده غشایی را ارائه می‌کند.



شکل ۱. شمای تماس‌دهنده غشایی الیاف توخالی پلی‌پروپیلن. برگرفته شده از [۲۰].

مشخصات ماژول غشایی میکرو متخلخل در جدول ۱ ارائه شده است.

جدول ۱. مشخصات تماس‌دهنده غشایی الیاف توخالی جهت مدل‌سازی و شبیه‌سازی [۲۱]

پارامتر / متغیر	مقدار	واحد
قطر داخلی الیاف (r_1)	$۳/۲۵\times۱۰^{-۴}$	m
قطر خارجی الیاف (r_2)	۵×۱۰^{-۴}	m
شعاع داخلی مدول غشایی (R)	۵×۱۰^{-۳}	m
ضریب تخلخل (ε)	۰/۷۵	---
ضریب پیچش (τ)	$\frac{(2-\varepsilon)^2}{\varepsilon}$	---
طول مدول (L)	۰/۲۷	m
تعداد الیاف توخالی (n)	۵۰	---
دما (T)	۳۰۳/۱۵	K

به منظور حل معادلات اساسی جرم و مومنتوم در فازهای گاز و مایع با در نظر گرفتن رژیم جریان آرام و حالت عدم ترشوندگی غشا، از روش اجزای محدود با استفاده از نرم افزار COMSOL نسخه ۶ استفاده شده است. مش‌بندی تطبیقی و در نتیجه کنترل خطا توسط حل‌گر عددی UMFPACK به دلیل قابلیت های غیرقابل انکار آن مانند استحکام و کارایی زیاد برای حل مسائل مرزی غیرخطی اجرا می شود. زمان محاسباتی برای حل معادلات اساسی ریاضی و دستیابی به نتایج شبیه سازی حدود ۳ دقیقه است. جدول ۲ به ترتیب معادلات جرم و مومنتوم به همراه شریط مرزی متناظر آن‌ها در هر سه بخش پوسته، غشا و لوله را ارائه می‌دهد.

جدول ۲. معادلات جرم و مومنتوم به همراه شریط مرزی متناظر آن‌ها درون تماس دهنده غشایی [۱۰, ۲۲]

معادلات بخش لوله	
انتقال مومنتوم	**انتقال جرم**
$V_{z,t} = 2\overline{V_t}\left[1-\left(\frac{r}{r_1}\right)^2\right]$ (2)	$D_{CO_2,t}\left[\frac{\partial^2 C_{CO_2,t}}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial C_{CO_2,t}}{\partial r}+\frac{\partial^2 C_{CO_2,t}}{\partial z^2}\right]+R_i = V_{z,t}\frac{\partial C_{CO_2,t}}{\partial z}$ (1)
شرایط مرزی	
$at\ z=0 \quad \begin{cases} C_{IL,s}=C_{initial} \\ C_{CO_2,s}=0 \end{cases}$ (3)	
$at\ z=L \quad Convective\ flux$ (4)	
$at\ r=0 \quad \frac{\partial C_{CO_2,t}}{\partial r}=0$ (5)	
$at\ r=r_1 \quad C_{CO_2,t}=m_{CO_2}C_{CO_2,m}$ (6)	
معادلات بخش غشا	
شرایط مرزی	**انتقال جرم**
$at\ z=0 \quad Insulated$ (9)	$D_{CO_2,m}\left[\frac{\partial^2 C_{CO_2,m}}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial C_{CO_2,m}}{\partial r}+\frac{\partial^2 C_{CO_2,m}}{\partial z^2}\right]=0$ (7)
$at\ z=L \quad Insulated$ (10)	$D_{CO_2,m}=\frac{\varepsilon D_{CO_2,t}}{\tau}$ (8)
$at\ r=r_1 \quad C_{CO_2,mem}=C_{CO_2,t}/m_{CO_2}$ (11)	
$at\ r=r_2 \quad C_{CO_2,mem}=C_{CO_2,s}$ (12)	

معادلات بخش پوسته	
انتقال مومنتوم	**انتقال جرم**
$V_{z,s} = 2\overline{V_s}\left[1-\left(\frac{r_2}{r_3}\right)^2\right]\times\left[\frac{(r/r_3)^2-(r_2/r_3)^2+2\,ln(r_2/r)}{3+(r_2/r_3)^4-4(r_2/r_3)^2+4\,ln(r_2/r_3)}\right]$ (14) $1-\varphi=\frac{n{r_2}^2}{R^2}$ (15) $r_3=r_2\sqrt{1/(1-\varphi)}$ (16)	$D_{CO_2,s}\left[\frac{\partial^2 C_{CO_2,s}}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial C_{CO_2,s}}{\partial r}+\frac{\partial^2 C_{CO_2,s}}{\partial z^2}\right]=V_{z,s}\frac{\partial C_{CO_2,s}}{\partial z}$ (13)
شرایط مرزی	
$at\ z=0$ *Convective flux* (17)	
$at\ z=L \quad C_{CO_2,s}=C_{initial}$ (18)	
$at\ r=r_2 \quad C_{CO_2,s}=C_{CO_2,m}$ (19)	
$at\ r=r_3 \quad \frac{\partial C_{CO_2,s}}{\partial r}=0$ (20)	

ترکیب معادلات ۱۵ و ۱۶ برای پیش بینی مقدار پیش‌بینی شعاع موثر فرضی پوسته در اطراف هر رشته میان‌تهی استفاده می‌شود. [۲۰, ۲۳]. بر اساس محاسبات، مقدار r_3 ۷/۰۷×۱۰$^{-۴}$ متر به دست آمد. جدول ۳ پارامترهای شیمی-فیزیکی و انتقال جرم را برای توسعه شبیه سازی عددی نشان می دهد.

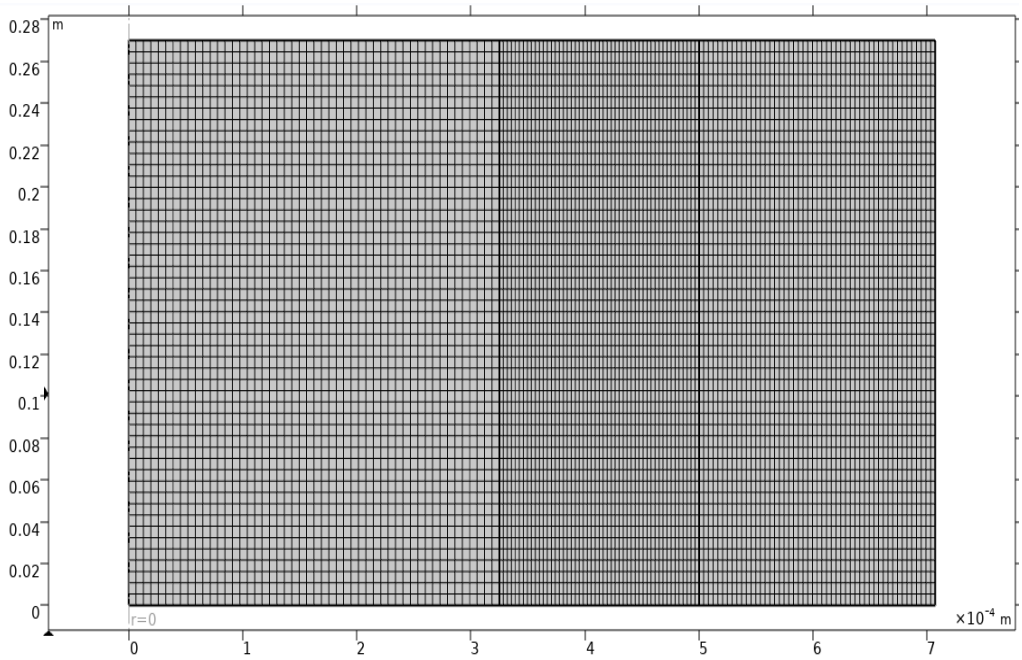
جدول ۳. پارامترهای شیمی-فیزیکی و انتقال جرم را برای توسعه شبیه سازی عددی

پارامتر / متغیر	مقدار	واحد	مرجع
$D_{CO2,shell}$	۱/۸×۱۰$^{-۵}$	m^2s^{-1}	[۲۴]
$D_{CO2,membrane}$	۱/۸×۱۰$^{-۵}(\frac{\varepsilon}{\tau})$	m^2s^{-1}	[۲۴]
$D_{CO2,MDEA}$	۱/۱۸×۱۰$^{-۹}$	m^2s^{-1}	[۲۵]
$m_{CO2\ ,MDEA}$	۰/۸۲	---	[۲۶]

$r_{CO2,MDEA}$	$-۸/۷۴۱\times۱۰^{۱۲}\exp(-۸۶۲۵/T)\ C_{CO2}\ C_{MDEA}$	s^{-1}	[۲۱]

۳. مش بندی

هدف اصلی در تکنیک مش بندی، تقسیم کردن دامنه‌های مختلف تماس‌دهنده غشایی به ابعاد کوچکتر با هدف افزایش دقت و کاهش خطای محاسباتی نرم‌افزار در مرحله پس‌پردازش نتایج حاصل از مدل‌سازی و شبیه‌سازی می‌شود. شکل ۲، نحوه استفاده از مش های مشبک (mapped meshing) در این مقاله را ارائه داده است. مش بندی مشبک به دلیل توانایی قابل توجه در پوشش کل نقاط هر دامنه که منجر به کاهش خطای محاسباتی و در نتیجه افزایش دقت خروجی‌ها می‌شود، نسبت به سایر روش‌های مش‌بندی مناسب‌تر در نظر گرفته می‌شود [۲۷]. با توجه به تماس گاز/مایع واکنش آن ها در اطراف غشا، مش بندی صورت گرفته در این ناحیه بسیار ریز در نظر گرفته می‌شود تا تغییرات با دقت محاسباتی بیشتر و خطای کمتر محاسبه شوند.

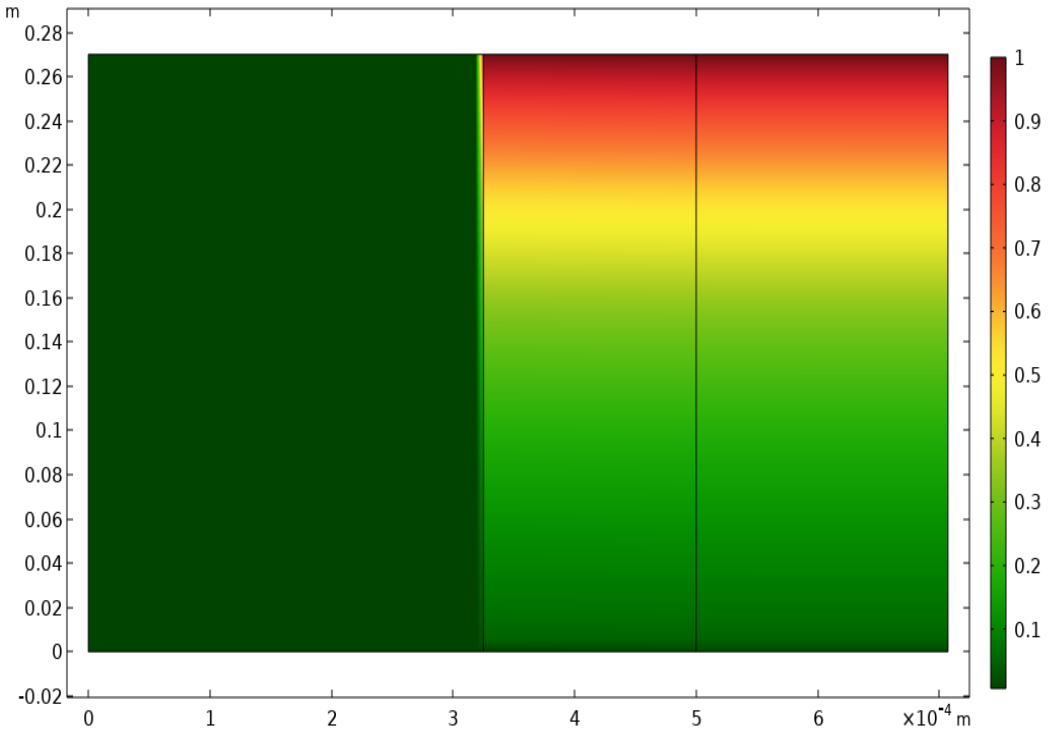


شکل ۲. تکنیک مش‌های مشبک (mapped meshing) به کار گرفته شده.

۴. نتایج و بحث

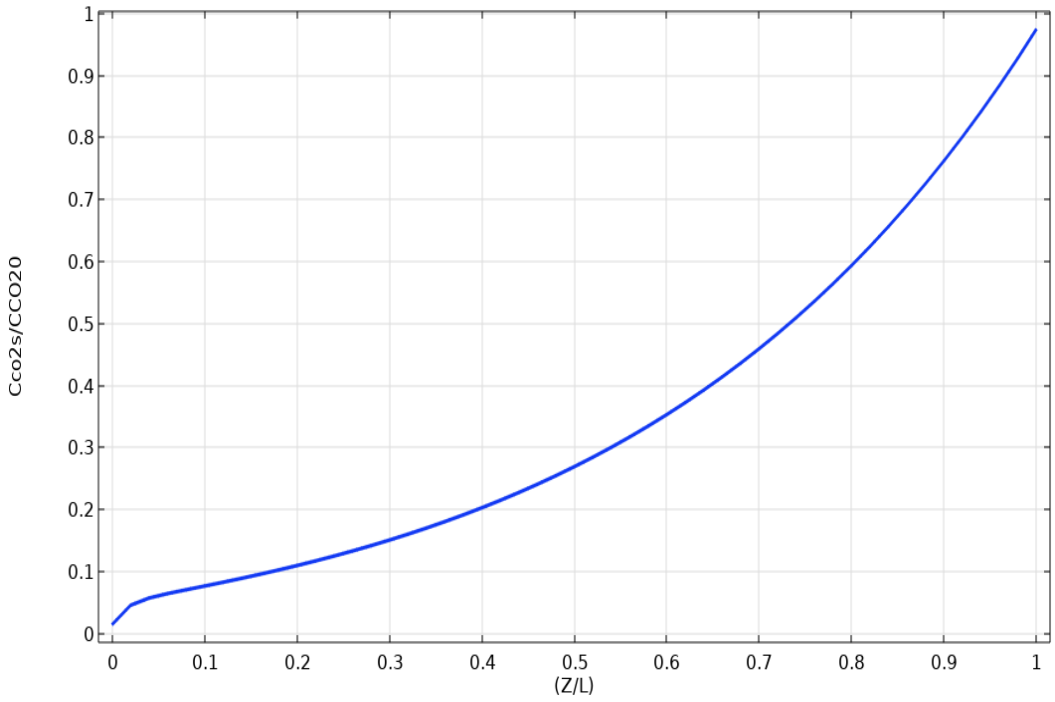
۱.۴. پروفایل غلظت دی اکسید کربن و ارزیابی میزان زدایش

نفوذ و جابه جایی به عنوان مکانیسم‌های برجسته انتقال جرم در تماس دهنده غشایی شناخته می‌شوند. دلیل انتقال جرم جابه جایی به دلیل جریان توده سیال در جهت محوری (z) است. همچنین، مکانیسم انتقال جرم نفوذ مولکولی به دلیل وجود گرادیان غلظت در جهت شعاعی (r) است. فرآیند زدایش در تماس‌دهنده غشایی با انتقال مولکول‌های CO_2 از جریان گاز (جریان در پوسته) به ریزمنفذهای غشا و از ریزمنفذها به لوله و جذب آن توسط محلول جاذب آمینی متیل دی اتاول آمین رخ می‌دهد. توزیع غلظت در هر سه دامنه تماس دهده غشایی و غلظت بدون بعد CO_2 ($C_{CO2,out}/C_{CO2,in}$) در فصل مشترک لوله-غشاء تماس‌دهنده به ترتیب در شکل‌های ۳ و ۴ نشان داده شده است.



شکل ۳. گرادیان غلظت دی اکسید کربن در دامنه های مختلف تماس دهنده غشایی.

وقوع انتقال جرم (به دلیل اختلاف غلظت بین دو طرف غشاء) از لوله به ریزمنافذ غشاء و از منافذ غشاء به پوسته باعث حذف آنها توسط متیل دی اتانول آمین در بخش پوسته می‌شود. با ارزیابی غلظت CO_2 در خروجی لوله با استفاده از شکل ۴، مشاهده می‌شود که متیل دی اتانول آمین دارای عملکرد جداسازی عالی هستند که به دلیل واکنش پذیری سریع آن‌ها با CO_2 و عملکرد عالی در حذف است. غلظت بدون بعد دی اکسید کربن در فصل مشترک پوسته-غشا از ۱ به ۰.۰۲ رسیده که بیانگر توانایی محلول جاذب متیل دی اتانول آمین در زدایش ۹۸٪ دی اکسید کربن ورودی به سیستم دارد.



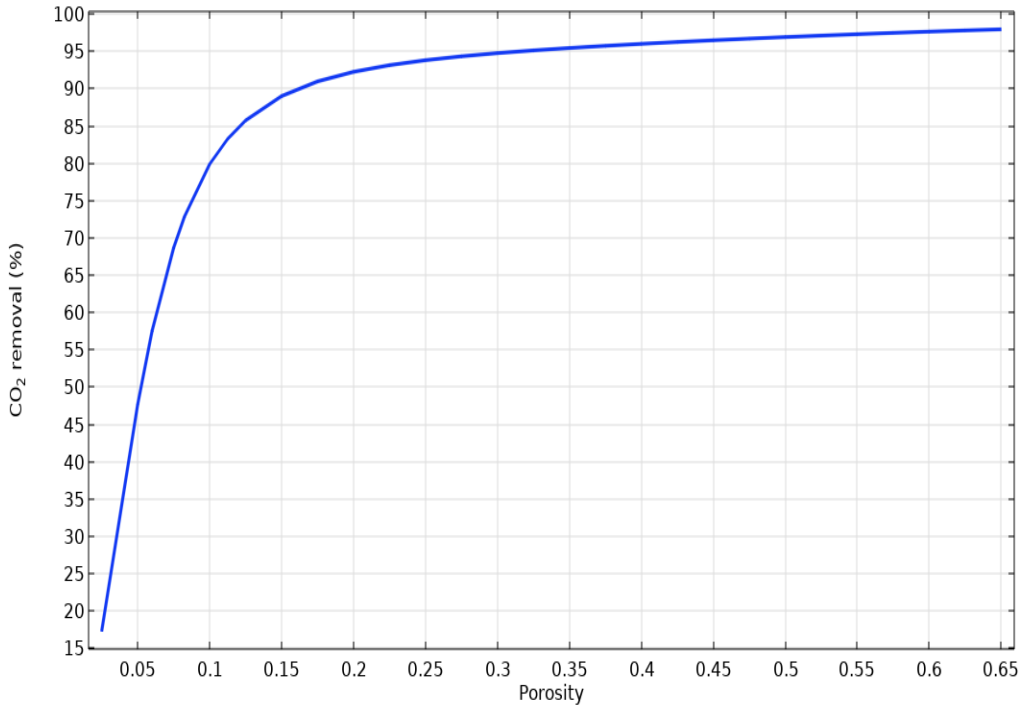
شکل ۴. غلظت بدون بعد CO_2 ($C_{CO2,out}/C_{CO2,in}$) در فصل مشترک پوسته-غشای تماس‌دهنده

۲.۴. تأثیر پارامترهای ماژول/غشا بر براندمان جداسازی

معادله ۱۷ برای تخمین درصد درون تماس دهنده غشایی الیاف توخالی به صورت زیر به کار گرفته می شود [۲۷]:

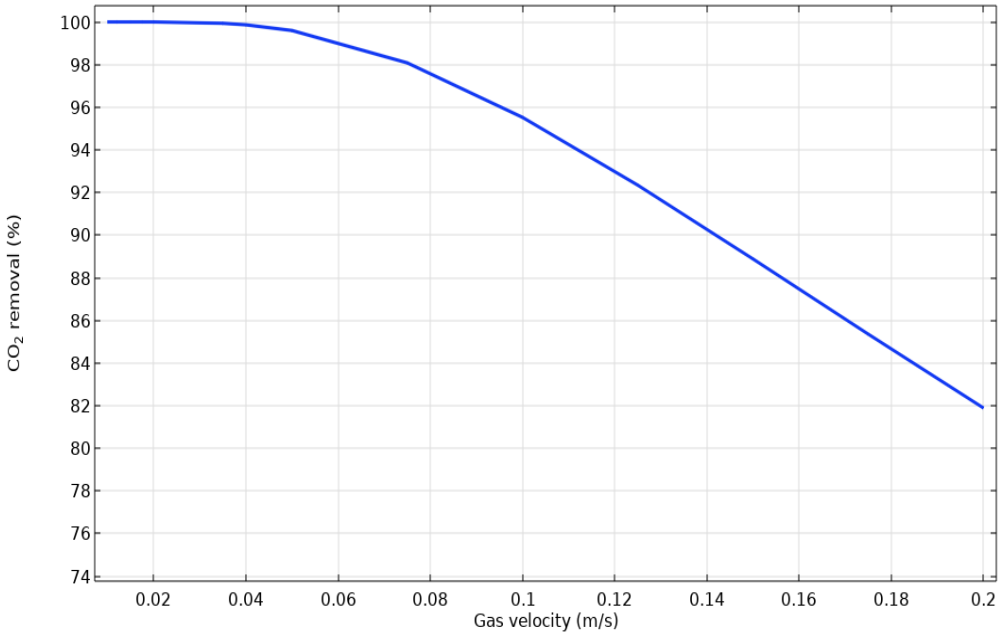
$$\text{درصد جداسازی (٪)} = \left(1 - \frac{C_{outlet}}{C_{inlet}}\right) \quad (۱۷)$$

شکل‌های ۵ و ۶ به ترتیب تاثیر تخلخل حفرات و طول غشا بر راندمان جداسازی دی‌اکسیدکربن از مخلوط گازی را با استفاده از محلول جاذب متیل دی‌اتانول‌آمین درون تماس‌دهنده غشایی را نشان می‌دهد. همان‌گونه که از شکل ۵ مشخص است، افزایش میزان تخلخل غشا به طرز چشم‌گیری مسیرهای بیشتری برای انتقال جرم دی اکسید کربن از حفرات غشا به سمت لوله و واکنش آن با محلول جاذب فراهم می آورد که سبب افزایش ضریب نفوذ و در نتیجه میزان زدایش دی اکسید کربن می‌شود.



شکل ۵. تاثیر افزایش تخلخل غشا بر میزان زدایش دی اکسید کربن

شکل شماره ۶ تاثیر افزایش سرعت جریان گاز بر میزان زدایش دی اکسید کربن را نشان می دهد. همان گونه که از شکل بر می‌آید، افزایش سرعت جریان گاز به دلیل کاهش زمان تماس مایع-گاز و همچنین کاهش زمان ملند، به طور قلبل توجهی میزان جداسازی دی اکسید کربن را کاهش می دهد.



شکل ۶. تاثیر افزایش سرعت جریان گاز بر میزان زدایش دی اکسید کربن

۵. نتیجه گیری

در این مقاله، یک مدل‌سازی ریاضی به همراه شبیه‌سازی جامع دوبعدی به منظور ارزیابی عملکرد جداسازی آلاینده گلخانه ای دی‌اکسید کربن در تماس‌دهنده غشایی الیاف توخالی ارائه شده است. محلول جاذب متیل دی اتانول آمین (MDEA) با هدف جداسازی دی اکسید کربن به کار گرفته شده‌اند. نتایج مدل‌سازی و شبیه‌سازی دینامیکی، حاکی از توانایی عالی دی اکسید کربن در جذب دی اکسید کربن با راندمان ۹۸٪ می باشد. در این مقاله تکنیک مش بندی مشبک (mapped meshing) با هدف تقسیم کردن دامنههای تماس دهنده به ابعاد کوچکتر به منظور افزایش دقت و کاهش خطای محاسباتی به کار گرفته شده است. افزایش برخی پارامترهای عملیاتی مانند تخلخل، درصد جداسازی دی اکسید کربن را به دلیل افزایش ضریب نفوذ دی اکسید کربن از جریان گازی افزایش می‌دهد، در حالی که افزایش برخی پارامترهای دیگر مانند سرعت گاز تأثیر منفی بر حذف CO_2 از جریان گازی CO_2/CH_4 به دلیل کاهش زمان تماس مایع-گاز و همچنین کاهش زمان ماند دارند.

مراجع

[۱] A. T. Nakhjiri, A. Heydarinasab, O. Bakhtiari, and T. Mohammadi, "Experimental investigation and mathematical modeling of CO_2 sequestration from CO_2/CH_4 gaseous mixture using MEA and TEA aqueous absorbents through polypropylene hollow fiber membrane contactor," *Journal of Membrane Science,* vol. 565, pp. 1-13, 2018.

[۲] Z. U. Rehman *et al.*, "Enhanced Carbon Dioxide Separation using Aqueous Amine Blends and Nanofluids in PVDF Hollow Fiber Membrane Contactor," *Chemical Engineering Research and Design,* 2025.

[۳] S. Shirazian, A. Taghvaie Nakhjiri, A. Heydarinasab, and M. Ghadiri, "Theoretical investigations on the effect of absorbent type on carbon dioxide capture in hollow-fiber membrane contactors," *Plos one,* vol. 15, no. 7, p. e0236367, 2020.

[٤] A. Shiravi, M. S. Maleh, A. Raisi, and M. Sillanpää, "Hollow fiber membrane contactor for CO_2 capture: A review of recent progress on membrane materials, operational challenges, scale-up and economics," *Carbon Capture Science & Technology,* vol. 10, p. 100160, 2024.

[٥] R. Ramezani, L. Di Felice, and F. Gallucci, "A review on hollow fiber membrane contactors for carbon capture: Recent advances and future challenges," *Processes,* vol. 10, no. 10, p. 2103, 2022.

[٦] A. Marjani, A. T. Nakhjiri, M. Pishnamazi, and S. Shirazian, "Evaluation of potassium glycinate, potassium lysinate, potassium sarcosinate and potassium threonate solutions in CO_2 capture using membranes," *Arabian Journal of Chemistry,* vol. 14, no. 3, p. 102979, 2021.

[۷] A. Gabelman and S.T. Hwang, "Hollow fiber membrane contactors," *Journal of membrane science,* vol .159 , no. 1-2, pp. 61-106, 1999.

[۸] M. Vaezi, H. Sanaeepur, A. Ebadi Amooghin, and A. Taghvaie Nakhjiri, "Modeling of CO_2 absorption in a membrane contactor containing 3-diethylaminopropylamine (DEAPA) solvent," *International Journal of Greenhouse Gas Control,* vol. 127, p. 103938, 2023.

[۹] A. Imtiaz *et al.*, "A critical review in recent progress of hollow fiber membrane contactors for efficient CO_2 separations," *Chemosphere,* vol. 325, p. 13830, 2023.

[۱۰] A. T. Nakhjiri, A. Heydarinasab, O. Bakhtiari, and T. Mohammadi, "The effect of membrane pores wettability on CO_2 removal from CO_2/CH_4 gaseous mixture using NaOH, MEA and TEA liquid absorbents in hollow fiber membrane contactor," *Chinese Journal of Chemical Engineering,* vol. 26, no. 9, pp. 1845-1861, 2018.

[۱۱] Y. Cao, A. Khan, A. T. Nakhjiri, A. B. Albadarin, T. A. Kurniawan, and M. Rezakazemi, "Recent advancements in molecular separation of gases using microporous membrane systems: A comprehensive review on the applied liquid absorbents," *Journal of Molecular Liquids,* vol. 337, p. 116439.

[۱۲] N. Ghasem, "Modeling and simulation of the impact of feed gas perturbation on CO2 removal in a polymeric hollow fiber membrane," *Polymers,* vol. 14, no. 18, p. 3783, 2022.

[۱۳] S. Kiani, A. Taghizade, R. Ramezani, R. Di Felice, G. F. Molelekwa, and S. Mazinani, "Enhancement of CO_2 removal by promoted MDEA solution in a hollow fiber membrane contactor: A numerical and experimental study," *Carbon Capture Science & Technology,* vol. 2, p. 100028, 2022.

[۱٤] H.Y. Zhang, R. Wang, D. T. Liang, and J. H. Tay, "Modeling and experimental study of CO_2 absorption in a hollow fiber membrane contactor," *Journal of membrane science,* vol. 279, no. 1-2, pp. 301-310, 2006.

[۱۵] M. Rezakazemi, Z. Niazi, M. Mirfendereski, S. Shirazian, T. Mohammadi, and A. Pak, "CFD simulation of natural gas sweetening in a gas–liquid hollow-fiber membrane contactor," *Chemical Engineering Journal,* vol. 168, no. 3, pp. 1217-1226, 2011.

[۱۶] S. Eslami, S. M. Mousavi, S. Danesh, and H. Banazadeh, "Modeling and simulation of CO_2 removal from power plant flue gas by PG solution in a hollow fiber membrane contactor," *Advances in Engineering Software,* vol. 42, no. 8, pp. 612-620, 2011.

[۱۷] H.L. Lee, S.W. Wang, Y.C. Yang, and W.J. Chang, "Effect of porosity on the mechanical properties of a nanoporous graphene membrane using the atomic-scale finite element method," *Acta Mechanica,* vol. 228, pp. 2623-2629, 2017.

[۱۸] Y. Yin, Q. Liu, H. Gao, M. Xiao, T. Sema, and Z. Liang, "3D models guide the design of hollow fiber membrane contactors with complex internal structures for CO_2 capture," *AIChE Journal,* vol. 70, no. 4, p. e18336, 2024.

[۱۹] J. Happel, "Viscous flow relative to arrays of cylinders," *AIChE Journal,* vol. 5, no. 2, pp. 174-177, 1959.

[۲۰] A. T. Nakhjiri and A. Heydarinasab, "Computational simulation and theoretical modeling of CO_2 separation using EDA, PZEA and PS absorbents inside the hollow fiber membrane contactor," *Journal of Industrial and Engineering Chemistry,* vol. 78, pp. 106-115, 2019.

[۲۱] A. T. Nakhjiri and A. Heydarinasab, "CFD analysis of CO_2 sequestration applying different absorbents inside the microporous PVDF hollow fiber membrane contactor," *Periodica polytechnica chemical engineering,* vol. 64, no. 1, pp. 135-145, 2020.

[۲۲] M. Pishnamazi, H. O. Alsaab, and M. Al-Bahrani, "CFD comparison of novel [emim][DCA] and [emim][MS] ionic liquids for the separation of CO2 greenhouse gas in the membrane contactor," *Scientific Reports,* vol. 15, no. 1, p. 9150, 2025.

[۲۳] Q. Sohaib, A. Muhammad, M. Younas, and M. Rezakazemi, "Modeling pre-combustion CO_2 capture with tubular membrane contactor using ionic liquids at elevated temperatures," *Separation and Purification Technology,* vol. 241, p. 116677, 2020.

[۲۴] R. Faiz and M. Al-Marzouqi, "Mathematical modeling for the simultaneous absorption of CO_2 and H2S using MEA in hollow fiber membrane contactors," *Journal of Membrane Science,* vol. 342, no. 1, pp. 269-278, 2009.

[۲۵] G. Versteeg and W. P. M. van Swaaij, "On the kinetics between CO_2 and alkanolamines both in aqueous and non-aqueous solutions—I. Primary and secondary amines," *Chemical engineering science,* vol. 43, no. 3, pp. 573-585, 1988.

[۲۶] A. Portugal, F. Magalhães, and A. Mendes, "Carbon dioxide absorption kinetics in potassium threonate," *Chemical Engineering Science,* vol. 63, no. 13, pp. 3493-3503, 2008.

[۲۷] A. T. Nakhjiri, A. Heydarinasab, O. Bakhtiari, and T. Mohammadi, "Modeling and simulation of CO_2 separation from CO_2/CH_4 gaseous mixture using potassium glycinate, potassium argininate and sodium hydroxide liquid absorbents in the hollow fiber membrane contactor," *Journal of Environmental Chemical Engineering,* vol. 6, no. 1, pp. 1500-1511, 2018.