



## مفاهیم اولیه

مهندس شیمی پیرامون فرایندهای شیمیایی که در بر گیرنده تبدیل مواد خام به فرآورده بهینه است بحث و بررسی می کند. مهندس شیمی باید طراحی، توسعه و مهندسی فرآیند شیمیایی و بهره برداری و راه اندازی بهینه را از نظر اقتصادی و ایمنی انجام دهد. در واحد های عملیاتی جریان یا جریان هایی از مواد مختلف وارد دستگاه های مختلف شده و در اثر انجام فرآیند های مختلفی که در دستگاه های عملیاتی انجام می گردد مواد جدیدی تولید می شود یا خلوص جریان ورودی افزایش می یابد. وضعیت جریان های فرآیندی در صورت مشخص بودن پارامترهایی مانند دما، فشار و ترکیب درصد مواد معلوم می گردد. برای دستگاه های عملیاتی باید علاوه بر تعریف پارامترهای مکانیکی، شرایط فرآیندی نیز معلوم باشد. هر فرآیند با معادلاتی مانند موازنه جرم، انرژی، مومنتوم و تعادلات فازی یا شیمیایی نشان داده می شوند که به آنها مدل حاکم بر فرآیند می گویند. پارامترهای فرآیندی جریان های ورودی و دستگاه های عملیاتی در حال تغییر هستند و در نتیجه مشخصات جریان های خروجی نیز تغییر می کنند که باید توسط مهندسین شیمی محاسبه می شوند. این امر به کمک نرم افزار های شبیه ساز نیز امکان پذیر است.

## مدل سازی (Modeling)

مدل سازی ریاضی از یک فرآیند، بدست آوردن مجموعه معادلاتی است که بیان گر رفتار فرآیند است. حل این مجموعه معادلات، نشان گر پاسخ فرآیند در مقابل اطلاعات و داده های ورودی است. بنابراین مدل، قالبی برای کمیت سنجی یک فرآیند جهت پیش بینی رفتار آن به ازای مقادیر ورودی و شرایط اعمال شده است که در نهایت به یک مجموعه معادلات منجر شده که معادلات حاکم نامیده می شود. تعیین معادلات حاکم بر فرآیند را مدل سازی می نامند. به بیان دیگر منظور از مدل سازی فرآیند توصیف ماهیت سیستم تولید (موازنه های جرم و انرژی) در قالب معادلات ریاضی است. لازم به ذکر است در نرم افزار های شبیه ساز نیازی به مدل سازی نیست و تقریباً معادلات حاکم تمام تجهیزات (به غیر از برخی فرآیند های خاص) به صورت اطلاعات کتابخانه ای در نرم افزار ذخیره شده اند.

## طراحی (Design)

طراحی عبارت است از محاسبه اندازه ها و آرایش فرآیند برای عملکرد بهتر، مطالعه کنش قسمت های مختلف فرآیند، تعیین روش های کنترلی و غیره. مسائل مربوط به جداسازی از دیدگاه طراحی Design و ری تینگ Rating بررسی

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

می شوند. در دیدگاه طراحی، جداسازی تعیین شده است و نیاز به طراحی تجهیزاتی است. به بیان دیگر تعیین مشخصات فیزیکی و مکانیکی دستگاه را طراحی می نامند.

### شبیه سازی (Simulation)

بررسی کمیتی فرآیند شبیه سازی نامیده می شود. در واقع با معلوم بودن مشخصات فرآیند جریان های ورودی، مشخصات فرآیندی و مکانیکی دستگاه عملیاتی و همچنین مدل حاکم بر فرآیند، می توان مشخصات جریان خروجی را محاسبه کرد که اصطلاحاً به این نوع محاسبات شبیه سازی می گویند. به بیان دیگر منظور از شبیه سازی فرآیند یعنی بدست آوردن اطلاعات خروجی (به طور مثال مشخصات محصول) از طریق حل مدل های فوق بر اساس اطلاعات ورودی (به طور مثال مشخصات خوراک) و اطلاعات مربوط به مشخصات دستگاه های فرآیندی است.

### نمودار فرآیند PFD (Process flow Diagram)

PFD یک نمایش شماتیک از همه مراحل عملیات وابسته ای که حول یک فرآیند اتفاق می افتد است و شامل اطلاعاتی است که برای آنالیز کردن مطلوب بشمار می آیند. به بیان دیگر از این نمودار برای نشان دادن موازنه جرم و انرژی استفاده می شود. در هر PFD :

ü فرآیندهای مختلف که در هر یک از واحدها اجرا می شوند را با دستگاه مورد نظر نشان می دهند. نوع رآکتور ، نحوه جداسازی ، تاسیسات سرمایشی و گرمایشی ، تجهیزات انتقال مواد مشخص ، نام گذاری و شماره گذاری و بالاخره بطور منطقی به یکدیگر متصل شده اند.

ü مواد از سمت چپ به هر دستگاه وارد و از سمت راست آن خارج میشوند.

ü بخار و گاز ها در بالا ، مایعات در قسمت میانی و مواد جامد در پایین حرکت می کنند (رابطه ای منطقی با دانسیته دارد)

ü جریان ها عدد گذاری شده و برای هر جریان، اطلاعاتی چون شدت جریان، دما ، فشار و ترکیب درصد اجزا و فاز هر ماده در جدولی معین می شوند.

### نرم افزار

امروزه استفاده از کامپیوتر بخصوص در علوم مهندسی گسترش چشم گیری پیدا کرده است. ارزیابی واحدهای تولید و طراحی فرآیندی مورد استفاده در صنایع بدون استفاده از کامپیوتر وقت گیر و پیچیده می باشد و یا اینکه غیر ممکن می باشد . کاربرد های نرم افزارهای کامپیوتری در همه زمینه ها بویژه در زمینه علوم مهندسی نفت و گاز و پتروشیمی و صنایع معدنی بسیار مهم و اهمیت یافته است . نرم افزار Aspen یکی از معروفترین و پر قدرت ترین نرم افزار های مهندسی شیمی که شامل چندین بسته نرم افزاری مرتبط به هم است . این نرم افزار محصول شرکت Aspen Tech است و

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

اولین بار برای شبیه سازی و طراحی سیستم های معدنی و بالاخص فرآوری ذغال سنگ در نظر گرفته شده بود و بعد ها سیستم های پالایشگاهی و پتروشیمی هم به آن اضافه شد . نقطه قوت این نرم افزار نسبت به سایر نرم افزارها بانک اطلاعاتی واقعا قوی این نرم افزار راجع به جامدات ، مایعات و گازها هست .

نرم افزار Aspen به دلیل دارا بودن تمامی فرآیندهای موجود در صنایع نفت و گاز و پتروشیمی و فرآیندهای الکترونیکی و غذایی و حتی واحدهای تولیدی پلیمری محدوده بسیار بزرگی را فراهم آورده است. طراحی برج های تقطیر و جذب و مبدل های حرارتی که در زمینه مهندسی مکانیک و شیمی بسیار اهمیت دارند و قدرت زیاد این نرم افزار در شبیه سازی و مدلسازی دینامیکی و فرآیندها ، جایگاه ویژه ای در مهندسی شیمی به خود اختصاص می دهد . این نرم افزار قادر به حل تمامی موازنه های جرم دیفرانسیلی و جبری می باشد. و دسترسی به ضرائب سنتیکی و ترمودینامیکی را راحت تر کرده است و از مزایای آن می توان به دقت بالای آن در شبیه سازی دقیق فرآیندها اشاره کرد . در این جزوه از بسته AspenHysys از مجموعه Aspen Engineering Suite این نرم افزار استفاده شده است .

### نرم افزار AspenHysys

این نرم افزار جزء یکی از قدرتمند ترین نرم افزارهای حال حاضر در مهندسی شیمی می باشد. این نرم افزار ابتدا متعلق به شرکت HyproTech بود و با نام Hysys شناخته می شد که در سال 2004 با خریداری شدن آن توسط Aspen Technology توسط این شرکت توسعه پیدا کرد و یکی از زیر مجموعه های Aspen Engineering Suite بوده و با نام AspenHysys شناخته می شود .

امکانات این نرم افزار:

- وسعت اطلاعات کتابخانه ای Library

- وسعت معادلات ترمودینامیکی Properties

- ضرایب باینری Binary Coefficients

این نرم افزار به دانشجویان کمک می کند تا محاسبات طولانی را با روشی آسان در چند ثانیه انجام دهند. به همین دلیل دانشجویان می توانند تحلیل های پارامتریک و سایر سنجش ها را به سهولت انجام دهند و می توانند یک تحلیل عمیق تر بر اصول عملیات واحد در آزمایشگاه ها تهیه کنند. AspenHysys به گونه ای برنامه ریزی شده است که صحت و سرعت شبیه سازی را با سادگی کار شبیه سازی تلفیق می کند. برای طراحی های جدید، قادر است به سرعت مدل ها را

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

برای ارزیابی گزینه های متعدد بوجود آورد. پس از گزینش چند طرح برتر، می توان مدل هایی بسیار واقع بینانه بر مبنای آنها ایجاد کرد که تجهیزات اضافی و جزئیات فرآیند نیز در آنها در نظر گرفته شده باشد. با AspenHysys می توان عملیات مجتمع را به سرعت بهبود بخشید و نیز از درستی کارکرد دستگاه ها اطمینان حاصل کرد. برای مثال در تشخیص نقص دستگاه ها مانند میزان جرم گرفتگی مبدلها و پدیده طغیان در برج های تقطیر می توان از آن استفاده کرد. این نرم افزار به کاربر کمک می کند تا هرگونه متغیر وابسته به متغیر های دیگر را که توسط کاربر انتخاب شده است پیش بینی کنند. برای مثال یک کاربر می تواند مقادیر بالا و پایین شرایط یک ستون تقطیر که توسط خوراک ورودی داده شده است و همچنین مقادیر نرخ واکنش و سرعت بارگزاری مواد درون جوش آورنده را پیش بینی کند. بطور متناوب کاربر می تواند شرایط خوراک که توسط مشخص سازی مقادیر بالا یا پایین جوش آورنده بدست آورند و یا می توانند مقدار بارگزاری شده را مشخص کنند تا بتوانند مقادیر بالا یا پایین را بدست آورند. AspenHysys محیطی را فراهم می کند که کاربر با تسلط بر عملیات می تواند تنها با استفاده از تعداد انتخاب کمی از منو ها (Menu) نحوه عملکرد یک عملیات را پیش بینی کنند .

### مدل ترمودینامیکی

برای شبیه سازی و یا مدل سازی فرآیندها به منظور انجام محاسبات تعادل فازی نیازمند انتخاب مدل ترمودینامیکی هستیم. انتخاب مدل در ترمودینامیک، با توجه به در نظر گرفتن موارد زیر و بر اساس دو روش کلی  $\phi - \phi$  و  $\phi - \gamma$  انجام می گیرد :

1- شرایط عملیاتی فرآیند

2- نوع و دسته مواد موجود در مخلوط

3- فازهای موجود در فرآیند (مایع و بخار)

در سیستم های دو فازی (مایع و بخار) شرط تعادل، برابری پتانسیل شیمیایی تمام اجزای در دو فاز در نظر گرفته می شود و چون نمی توان مفهوم فیزیکی روشنی برای پتانسیل شیمیایی بیان نمود، فوگاسیته به عنوان شرط تعادل پیشنهاد گردید. فوگاسیته از جنس فشار است و مفهوم فیزیکی دارد و دامنه تغییرات آن از 0 تا  $\infty$  می باشد. فوگاسیته بخار را می توان از رابطه  $f_i^v = \gamma_i p \phi_i$  محاسبه نمود. ولی برای تعیین فوگاسیته مایع بر حسب مقدار هر ماده در فاز، دما و فشار از دو

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

رابطه مختلف استفاده می شود و بر همین اساس دو روش کلی ترمودینامیکی برای بررسی و ارزیابی تعادلات فاز مایع و بخار ارائه شده است.

### - ضریب فوگاسیته

نسبت  $\frac{f}{p}$  که انحراف رفتار گاز حقیقی از گاز ایده آل را اندازه گیری می کند، ضریب فوگاسیته نامیده می شود و از رابطه زیر به دست می آید:

$$\phi = \frac{f}{p}$$

ضریب فوگاسیته جزء  $\left(\phi_i = \frac{f_i}{x_i p}\right)$  در مخلوط عبارت است از:

رفتار انحرافی جزء  $i$  در مخلوط به عنوان گاز ایده آل از رفتار گاز ایده آل است که می توان از روابط مختلف ارائه شده آن را به دست آورد. در صورت استفاده از معادلات حالت درجه سوم، رابطه ای مجزا به کمک پارامترهای همان معادله ارائه شده است.

### - ضریب اکتیویته:

برای مخلوطها در حالت مایع، شرایط مخلوط ایده آل را می توان تعریف کرد.

در حالت کلی برای یک حالت استاندارد در محلولها ضریب اکتیویته جزء  $i$  به صورت زیر تعریف می شود:

$$\gamma_i = \frac{f_i^l}{f_i^{l,pure} \cdot x_i}$$

بنابراین ضریب فعالیت یک جزء در محلول، نسبت فوگاسیته حقیقی آن به مقدار ایده آل (که توسط قانون لوییس - رندال) در دما، فشار و ترکیب نسبی یکسان به دست می آید، است. با استفاده از معادلات NRTL و UNIQUAC و روش UNIFAC، می توان به روابط مناسبی برای ضرایب فعالیت دست یافت.

### - معادلات حالت (روشی $\phi - \phi$ )

رابطه ریاضی بین حجم، فشار و دما را اصطلاحاً معادله حالت می نامند. یکی از روش های محاسبه فوگاسیته، استفاده از معادلات حالت تجربی است. برای آنکه یک معادله حالت PVT (فشار، حجم و دما) رفتار مایعات و همچنین بخارها را نشان دهد، باید شامل محدوده بزرگی از دما و فشار باشد. این معادله نباید آنچنان پیچیده باشد که در عمل، مشکلات عددی بسیار زیاد و یا مشکلات تجزیه و تحلیلی داشته باشد. معادلات حالتی که در آنها حجم مولی از درجه سه باشد برای

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

اکثر اهداف مناسب اند. معادلات درجه سوم در واقع ساده ترین معادلات ممکن برای نشان دادن رفتار مایعات و بخار ها هستند.

معادلات حالت درجه سوم، علاوه بر پیش بینی رفتار فاز بخار، توانایی پیش بینی خواص و رفتار فاز مایع را نیز دارند. به همین دلیل می توان از معادله حالتی که برای فاز بخار استفاده می شود، برای فاز مایع نیز استفاده نمود. در این صورت فوگاسیته فاز مایع از رابطه  $f_i^l = x_i p \phi_i$  محاسبه می شود.

$$f_i^l = f_i^v \rightarrow x_i p \phi_i = y_i p \phi_i \rightarrow x_i \phi_i = y_i \phi_i$$

به این روش ترمودینامیکی بررسی فرایندها، روش  $\phi - \phi$  گفته می شود. استفاده از این روش فقط با معادلات حالت درجه سوم و برای موادی مناسب است که انحراف زیادی از حالت ایده آل ندارند. برای موادی که انحراف زیادی از حالت ایده آل دارند مانند الکل و اسید و غیره، دیگر نمی توان فوگاسیته مواد در فاز مایع را از معادله حالت محاسبه کرد و برای در نظر گرفتن انحراف زیاد فاز مایع از حالت ایده آل، مدل های ضرایب اکتیویته را باید به کار برد.

انتخاب معادله حالت، با توجه به خصوصیات جریان از قبیل دما و فشار و نوع ترکیبات تشکیل دهنده آن از اهمیت ویژه ای برخوردار است. در واقع از نرم افزار برای سرعت بخشیدن به انجام محاسبات (و مزایای دیگر) استفاده می شود و لذا از نیاز به تعیین و استفاده از مدل ترمودینامیکی مستثنی نیست. در نرم افزار Aspen Hysys نیز پیشنهاداتی جهت انتخاب معادله حالت مناسب وجود دارد. در ادامه توضیحات مختصری در ارتباط با برخی علامت اختصاری استفاده شده که بیانگر یک مدل ترمودینامیکی است داده می شود. استفاده از معادلات حالت برای فرایندهای نفت، گاز و پتروشیمی که انحراف کمی از حالت ایده آل دارند توصیه می شود.

### - اکتیویته مدل (روش $\gamma - \phi$ )

با اینکه مدل های معادله حالت برای اکثر سیالات پایه هیدروکربنی، در بازه گسترده ای از شرایط عملیاتی بسیار قابل اعتماد هستند، اما کاربرد آنها به ترکیبات غیر قطبی و یا با قطبیت بسیار کم محدود می شود. سیستم های شیمیایی غیر ایده آل یا قطبی از یک مدل دوگانه استفاده می کنند که در آن از معادله حالت برای محاسبه ضرایب فوگاسیته فاز بخار (معمولاً گاز ایده آل یا معادلات حالت ردلیش کوانگ PR یا SRK) و در مدل ضرایب اکتیویته برای محاسبه ضرایب اکتیویته فاز مایع، استفاده می شود. به این روش ترمودینامیکی بررسی فرایندها روش  $\gamma - \phi$  گفته می شود.

برخی از این مدل ها (ون لار، مارگولس) قابلیت خوبی برای بیان داده های تعادلی محلول های دوجزئی دارند ولی در مورد محلول های چند جزئی، استفاده از آنها پایه و اساس تئوری ندارد.

ضریب اکتیویته برای حلال های ایده آل، یک در نظر گرفته می شود اما در بیشتر سیستم های غیر شیمیایی که انحراف زیادی از حالت ایده آل دارند این انحراف تابع قوی از ترکیب آنها می باشد. مدل ضرایب اکتیویته، به منظور محاسبه ضریب

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

اکتیویته فاز مایع به کار می‌رود. معادلات متعددی برای ارتباط دادن ضرایب فعالیت با کسرهای مولی پیشنهاد شده است. سه معادله‌ای را که برای بسیاری از محاسبات عملی مفید هستند معادله Wilson, NRTL, UNIQUAC می‌باشند. مدل‌های اکتیویته مناسب برای حالت‌های مختلف محلول‌ها

| مواد قطبی                                      | الکترولیتی                | Pitzer or ENRTL              |                                           |                                    |                                                                                                        |
|------------------------------------------------|---------------------------|------------------------------|-------------------------------------------|------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                | غیر الکترولیتی            | P<10 bar                     | LL داریم                                  | پارامتر های $\lambda$ موجودند      | NRTL , UNIQUAC                                                                                         |
|                                                |                           |                              |                                           | پارامتر های $\lambda$ موجود نیستند | UNIFAC                                                                                                 |
|                                                |                           |                              | LL نداریم                                 | پارامتر های $\lambda$ موجودند      | Wilson , NRTL , UNIQUAC                                                                                |
|                                                |                           |                              |                                           | پارامتر های $\lambda$ موجود نیستند | UNIFAC                                                                                                 |
|                                                |                           | P>10 bar                     | پارامتر های $\lambda$ موجودند             |                                    | PR یا Schwartzentruber-Renon<br>PR or PRS با قوانین اختلاط WS یا PR<br>PR or PRS با قوانین اختلاط MHV2 |
|                                                |                           |                              | پارامتر های $\lambda$ موجود نیستند        |                                    | PR یا RKS , PSRK با قوانین اختلاط<br>MHV2                                                              |
| مواد غیر قطبی<br>(برای انجام محاسبات فاز بخار) | مواد واقعی                | PR or RKS-Plocker-Kesler-Lee |                                           |                                    |                                                                                                        |
|                                                | مواد فرضی +<br>مواد واقعی | فشار خلأ                     | BraunK-10 or Ideal                        |                                    |                                                                                                        |
|                                                |                           | فشار غیر خلأ                 | BraunK-10 or Chao-Seader & Grayson-Streed |                                    |                                                                                                        |

| مدل‌های اکتیویته                                                               | معادلات حالت                                      |
|--------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------|
| برای مایعات به شدت غیر ایده آل می‌توانند استفاده شوند.                         | برای محلول‌های غیر ایده آل مناسب نیستند.          |
| در نواحی بحرانی ناسازگار هستند.                                                | در نواحی بحرانی سازگار هستند.                     |
| فقط برای فاز مایع سازگار هستند و برای فاز گاز از معادله حالت باید استفاده کرد. | برای هر دو فاز مایع و گاز می‌توانند استفاده شوند. |

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

| معادله حالت        | موارد استفاده                                                                                                                                                                                                                                                                       |
|--------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| PR (Peng Robinson) | در مورد سیستم های آلی با پیچیدگی های زیاد ، در بازه های گسترده دمایی و فشاری ( $P < 15000 \text{ psia}$ , $T > -271^\circ\text{C}$ ) و حالت های یک ، دو و سه فازی قابل استفاده می باشد و پاسخ های دقیق تری را نسبت به سایر مدل ها در فاز گازی و تعادلات VLE می دهد.                 |
| Kabadi Danner      | برای تعادل سیستم های آب-هیدروکربن (بهخصوص در غلظت های پایین) انتخاب مناسبی است.                                                                                                                                                                                                     |
| Lee Kesler Plocker | برای ترکیبات و مخلوط های غیر قطبی مناسب است.                                                                                                                                                                                                                                        |
| SRK                | نتایج آن مشابه معادله PR است ولی بازه عملیاتی آن بسیار محدودتر ( $P < 5000 \text{ psia}$ , $T > -143^\circ\text{C}$ ) می باشد و برای سیستم های غیر ایده آل مناسب نیست.                                                                                                              |
| Sour PR            | ترکیب مدل PR و مدل اسیدی Wilson's Api-Sour است که برای سیستم های آبی - اسیدی استفاده می شود.                                                                                                                                                                                        |
| Sour SRK           | مشابه مدل Sour PR است ولی بازه عملیاتی آن محدودتر است.                                                                                                                                                                                                                              |
| Zud Kevitch Joffe  | مدل تغییر یافته RK است که برای تعادل های بخار - مایع سیستم های هیدروکربنی و سیستم های شامل هیدروژن مناسب است.                                                                                                                                                                       |
| مدل اکتیویته       | موارد استفاده                                                                                                                                                                                                                                                                       |
| Chein Null         | به شما این امکان را می دهد که برای هر جفت از ترکیبات ، از بهترین مدل اکتیویته استفاده کنید.                                                                                                                                                                                         |
| Extended NRTL      | در حالتی که نقطه جوش های دو ترکیب اختلاف زیادی باهم دارند و یا به حل همزمان معادلات VLE و LLE نیاز است و اختلاف زیادی بین دماهای نقطه جوش و غلظت وجود دارد ، مورد استفاده قرار می گیرد.                                                                                             |
| General NRTL       | کاربرد آن همانند مدل Extended NRTL است لیکن امکان انتخاب ساختار معادله A و T را نیز به وجود می آورد.                                                                                                                                                                                |
| Margules           | معادله ای کاملاً تجربی بوده و برای تخمین سریع خواص (بهخصوص در محاسبات پایداری) کاربرد دارد.                                                                                                                                                                                         |
| NRTL               | برای نمایش رفتار فازی LLE ، VLE و VLLE مناسب می باشد.                                                                                                                                                                                                                               |
| UNIQUAC            | کاربرد آن مشابه مدل NRTL بوده و تنها فرق آن استفاده از روش های پیچیده آماری برای محاسبات است.                                                                                                                                                                                       |
| Van Laar           | این معادله برای بسیاری از سیستم ها ، بهخصوص سیستم هایی که انحرافات مثبت و منفی زیادی از قانون راولت نشان می دهند ، مناسب است. لیکن به دلیل اینکه قادر به پیش بینی حالت ماکزیمم و مینیمم برای ضریب فعالیت نیست ، برای سیستم های شامل هیدروکربن های هالوزنه و الکل ها مناسب نمی باشد. |
| Wilson             | برای سیستم های چند جزئی مناسب بوده و لکن نمی تواند برای سیستم های با دو فاز مایع استفاده گردد.                                                                                                                                                                                      |

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

### - ثابت تعادل ترمودینامیکی

نسبت تعادلی  $k_i$  یک معیار مناسب برای سنجش گرایش یک جزء معلوم به توزیع بین فازهای مایع و بخار است که به شکل زیر تعریف می شود.

$$k_i = y_i/x_i$$

همان طور که می دانیم این کمیت را که در واقع ثابت تعادل ترمودینامیکی است ( $k_{value}$ ) می نامند و به عنوان معیار سنجش تمایل برای حضور در فاز بخار عمل می کند.

با به کار بردن معادله حالت به عنوان مدل ترمودینامیکی (روش  $\phi - \phi$ )، ثابت تعادل ترمودینامیکی برای یک جزء در حالت غیر ایده آل از معادله زیر محاسبه شده است.

$$k_{value} = \frac{\phi^L}{\phi^V} = \frac{y}{x}$$

که ضریب فوگاسیته هر دو فاز از معادله حالت مورد استفاده به دست می آید. نرم افزارهای کامپیوتری (از جمله Aspen Hysys) نیز مقادیر  $k_{value}$  را در این وضعیت از معادلات حالت SRK، PR و غیره برای برنامه های طراحی و شبیه سازی به دست می آورند.

حالت دیگر فرمولاسیون  $k_{value}$  به صورت زیر است که کاربرد وسیعی برای مخلوط های حاوی اجزاء قطبی و غیر قطبی دارد. در واقع این رابطه هنگامی که اکتیویته مدل (روش  $\gamma - \phi$ ) به عنوان مدل ترمودینامیکی در نظر گرفته ایم استفاده می شود.

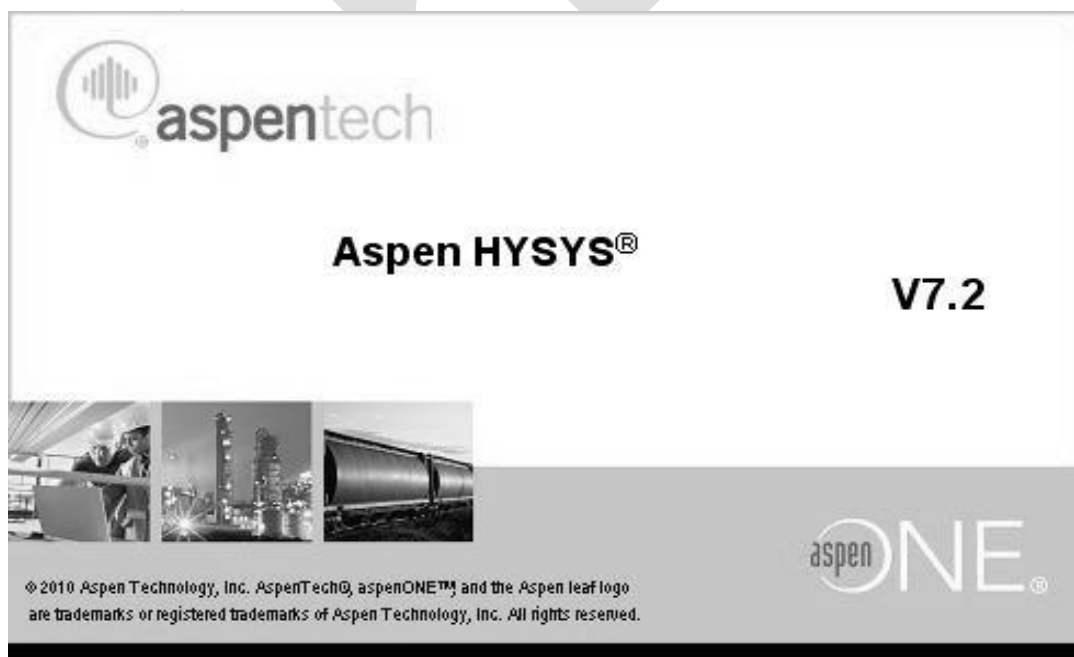
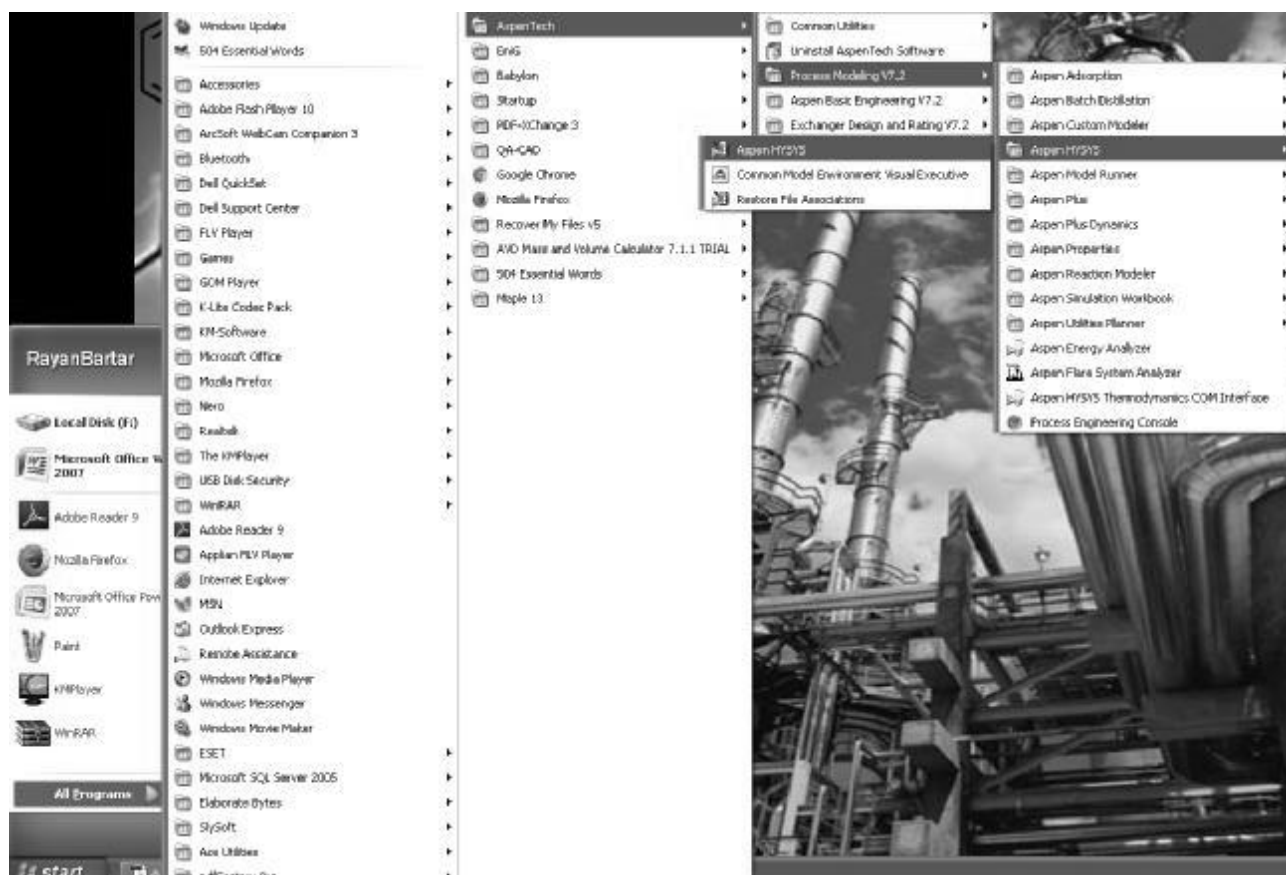
$$k_{value} = \frac{\gamma^L \phi^L}{\phi^V} = \frac{y}{x}$$

به طوری که معادلات حالت متفاوت ممکن است برای پیش بینی ضریب فوگاسیته جزء خالص در مخلوط در فاز مایع ( $\phi^L$ ) و در فاز بخار ( $\phi^V$ ) استفاده شود و یکی از مدل های اکتیویته جهت به دست آوردن ضریب اکتیویته جزء در فاز مایع ( $\gamma^L$ ) استفاده شود که مدل های NRTL و UNIQUAC نسبت به بقیه ترجیح داده می شوند.

### مراحل شبیه سازی و معرفی محیط ها و کلید های نرم افزار

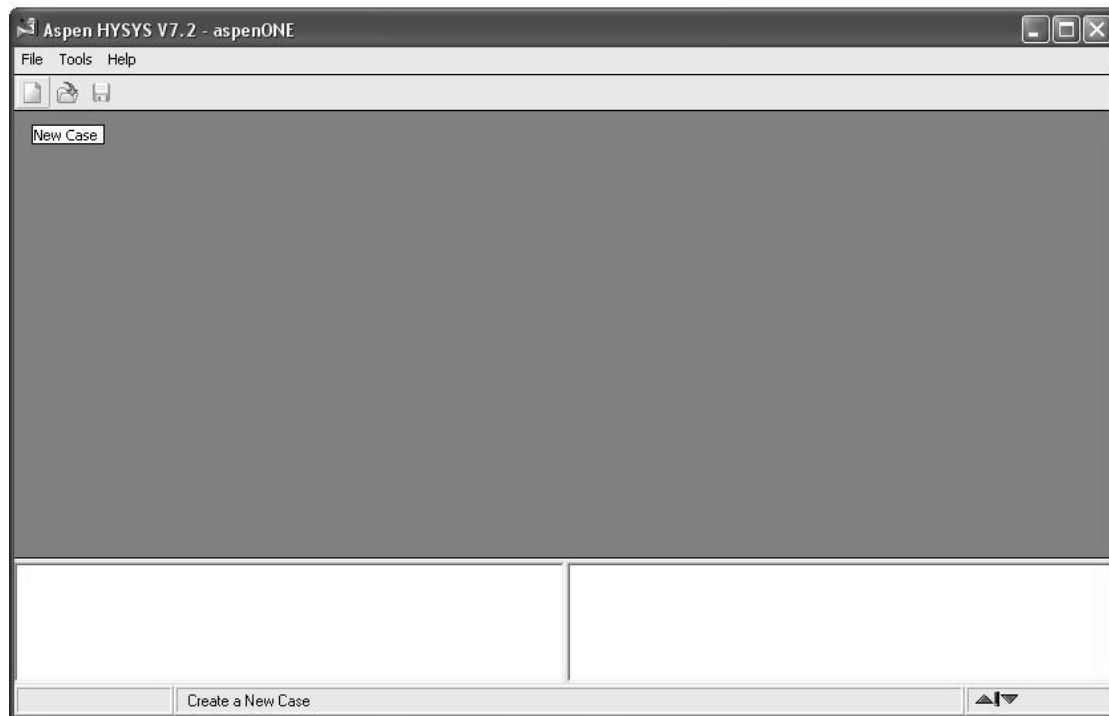
1- ابتدا نرم افزار را باز می کنیم

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)



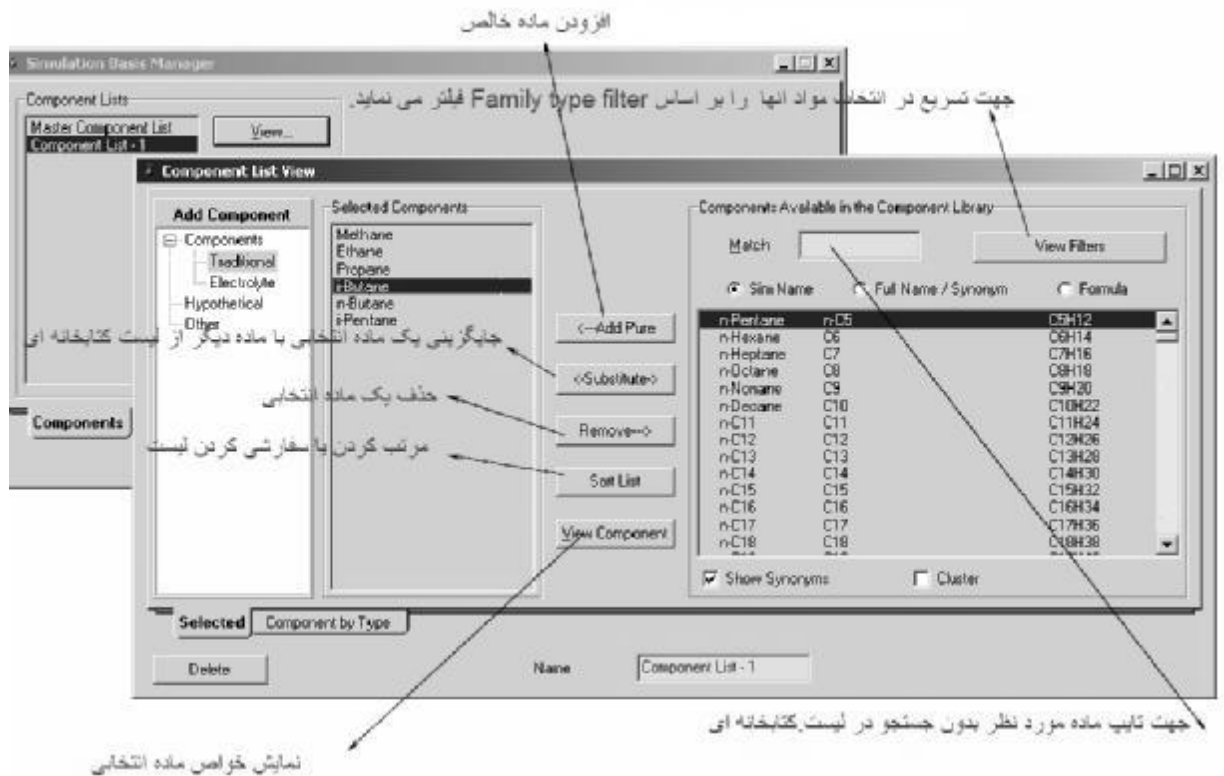
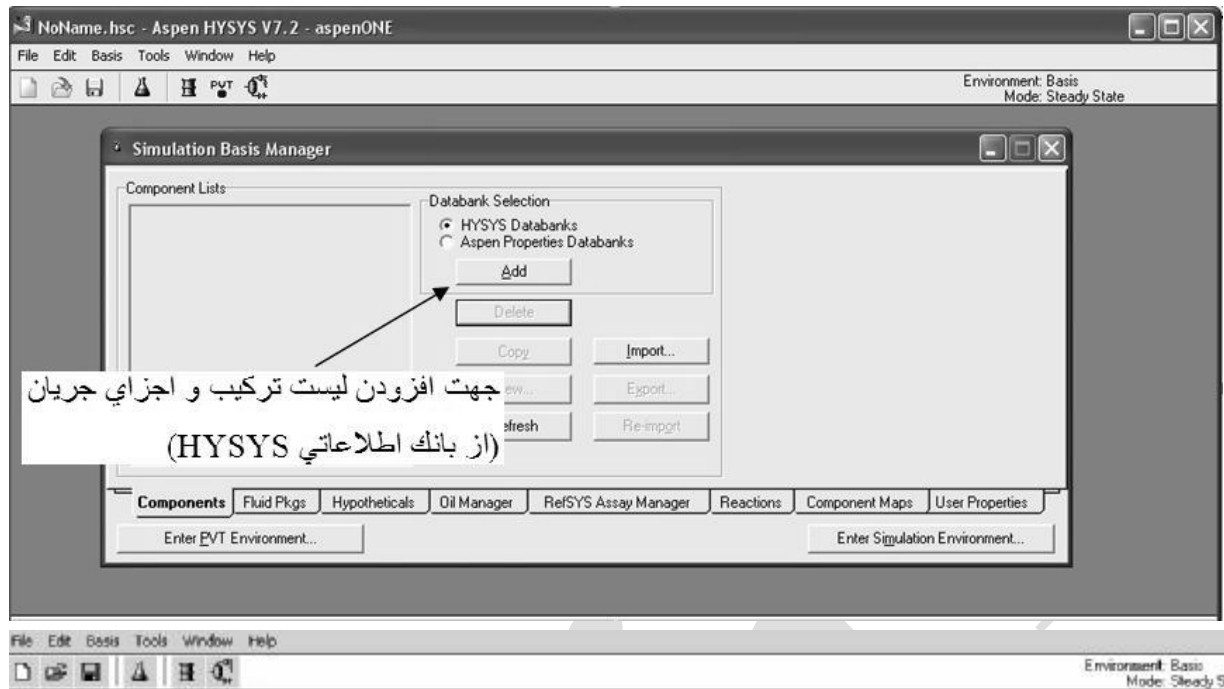
## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره: 1)

2- پس از باز شدن نرم افزار پنجره زیر ظاهر می شود. با انتخاب گزینه New در منو File یا از نوار ابزار انتخاب NewCase، یک Case جدید ایجاد می شود. بعد از این کار پنجره simulationBasisManager (یا SBM) ظاهر می شود.



3- از پنجره SBM در برگه Components باید ابتدا لیست موادی که در شبیه سازی وجود دارند را تعیین کرد. برای انجام این هدف در تصویر های ارائه شده که در ادامه وجود دارند کلید های این برگه و پنجره جدید که پس از زدن کلید Add باز می شود (تا مواد موجود در شبیه سازی را انتخاب کنیم) شرح می دهند

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

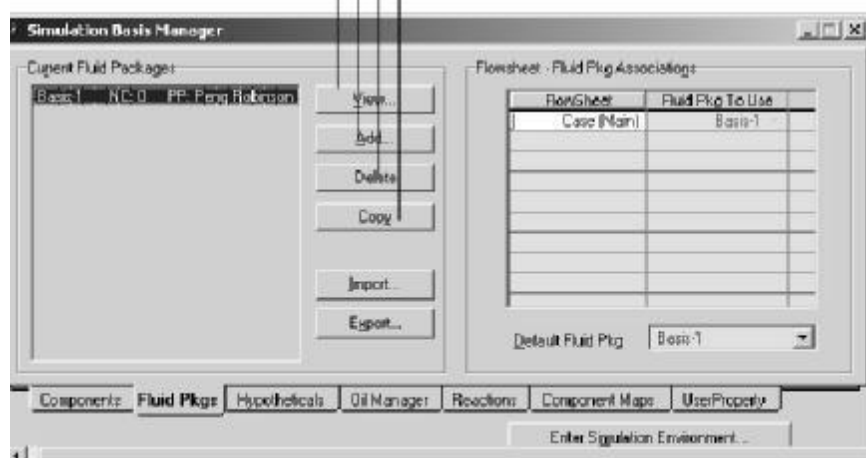


## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

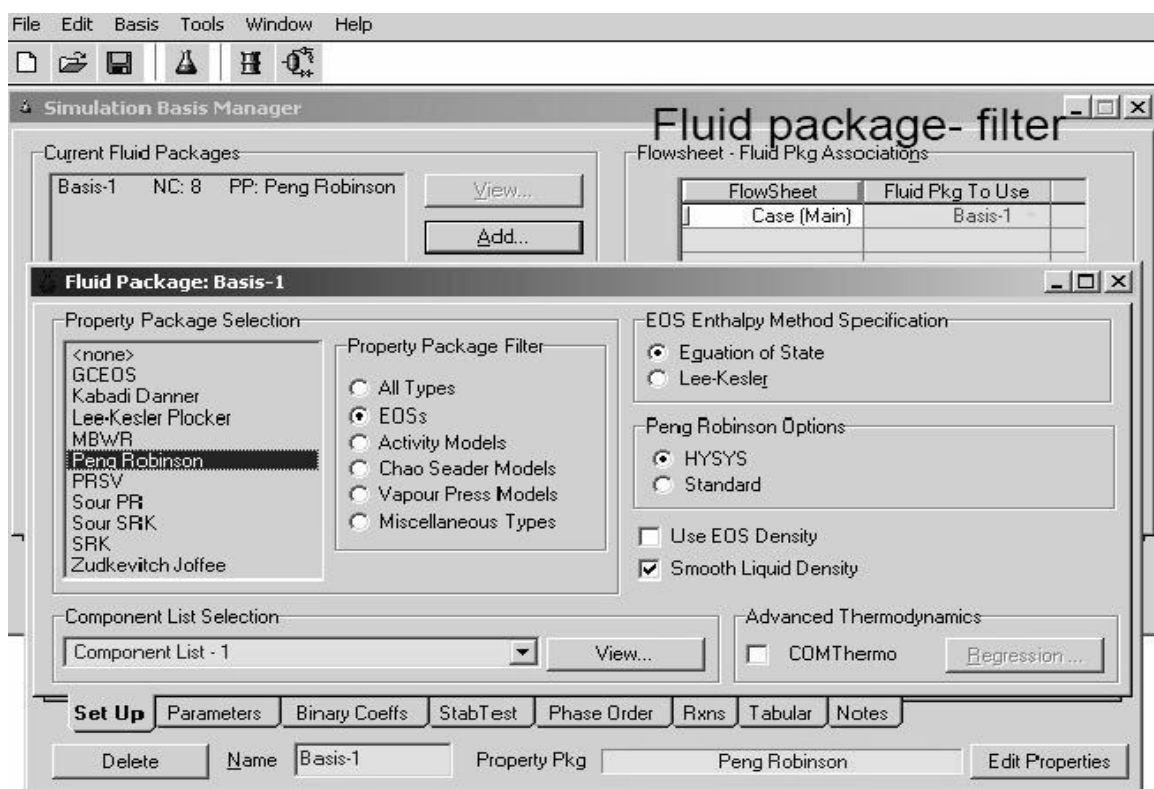


4- پس از انتخاب مواد، باید مدل ترمودینامیکی مناسب را انتخاب نمود تا نرم افزار بر اساس آن محاسبات تعادل فازي یا برخی خصوصیات ترمودینامیکی مخلوط و غیره را محاسبه کند. برای این منظور باید از برگه دوم پنجره SBM که با نام Fluid Pkgs می باشد استفاده کرد. برای انجام این هدف در تصویر های ارائه شده که در ادامه وجود دارند کلید های این برگه و پنجره جدید که پس از زدن کلید Add باز می شود (تا مدل ترمودینامیکی مورد استفاده در محاسبات شبیه سازی را انتخاب کنیم) شرح می دهند

نمایش پنجره و لیست انتخاب Fluid package  
نمایش پنجره و لیست انتخاب Fluid package جهت افزودن  
نمایش پنجره و لیست انتخاب Fluid package جهت افزودن  
کپی نمودن Fluid package

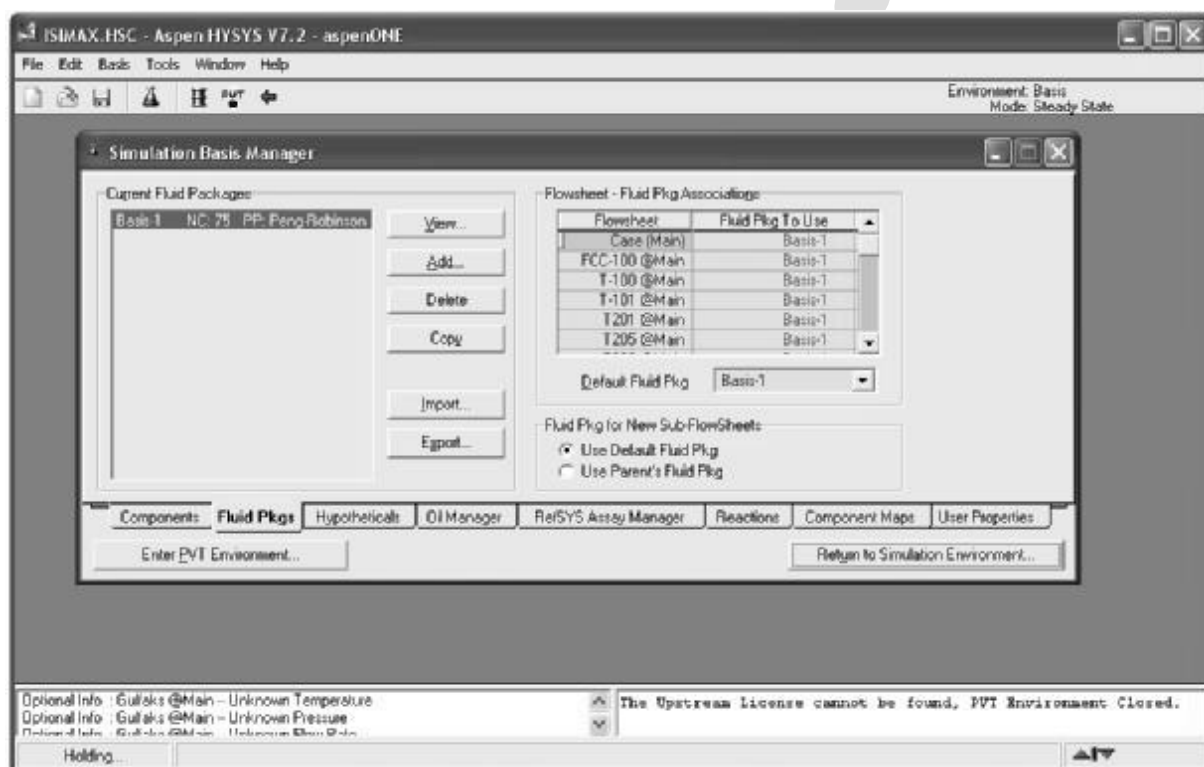


## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره: 1)



## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1: )

5- بعد از انتخاب ترکیبات از برگه Component و انتخاب مدل ترمودینامیکی از برگه Fluid Pkgs در پنجره SBM ، اجازه ورود به محیط شبیه سازی فراهم می شود. این هدف با کلید Inter Simulation Environment محقق می شود. البته در صورتیکه در مراحل بعدی شبیه سازی به این پنجره مراجعه شود برای برگشت به محیط شبیه سازی نام کلید به نام Return to Simulation Environment تغییر می یابد

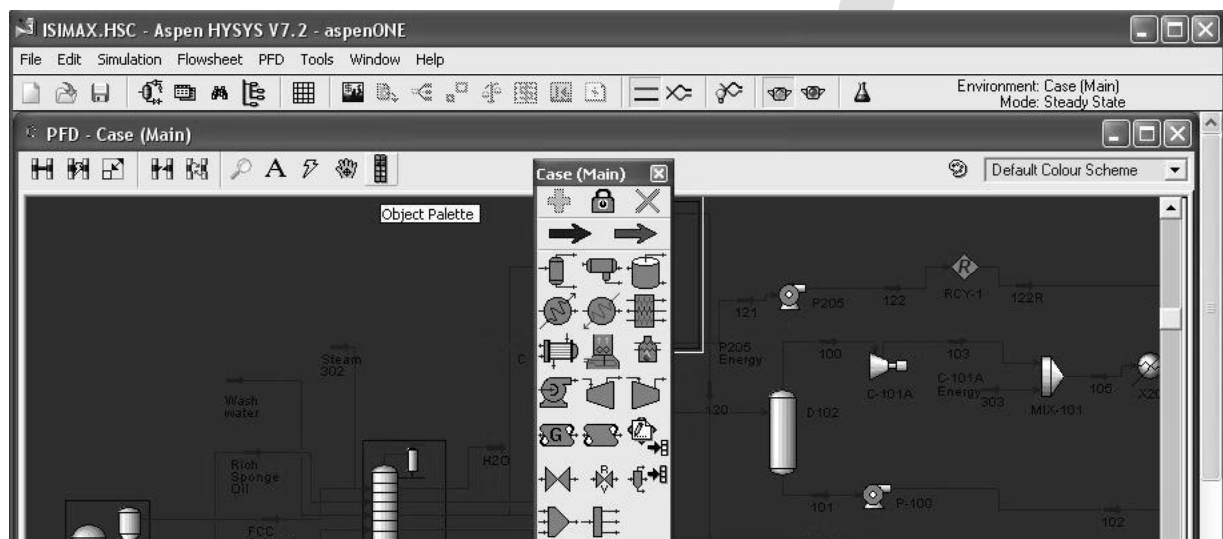


در صورت انتخاب بیش از یک مدل ترمودینامیکی که با اسامی Basis 1 و Basis 2 و ... شناخته می شود باید قبل از وارد شدن به محیط شبیه سازی در قسمت Default Fluid Pkg پنجره فوق، نام مدل ترمودینامیکی مورد نظر را مشخص کنیم

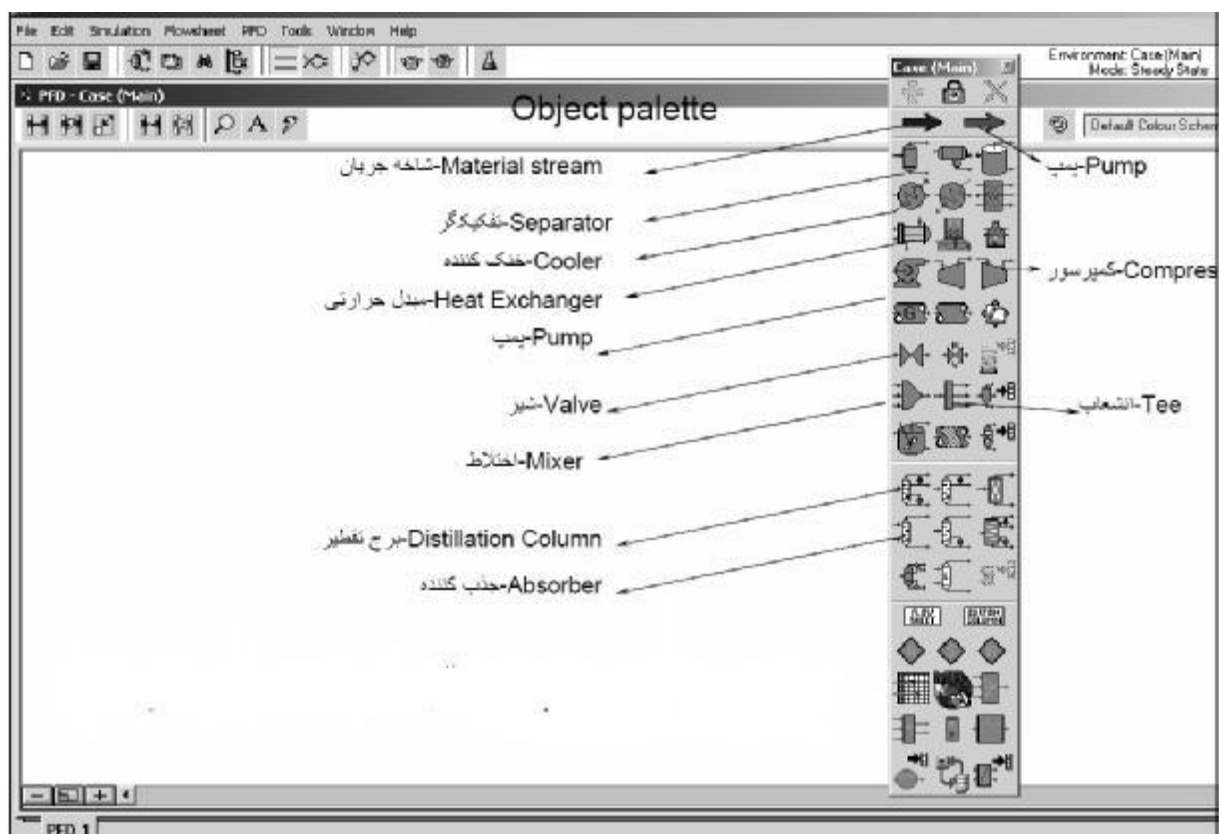
6- پس از وارد شدن به محیط شبیه سازی باید ادوات و جریان یا تجهیزات مورد نیاز را انتخاب کنیم (که در واقع انتخاب مجموعه معادلات مدل حاکم آن تجهیز می باشد) تا پس از وارد کردن اطلاعات ورودی و شرایط فرآیندی و غیره، محاسبات شبیه سازی صورت گیرد. انتخاب مدل جهت شبیه سازی با انتخاب آیکون آن تجهیزات یا جریان و غیره، در محیط شبیه سازی صورت می گیرد

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

که برای این امر از پنجره Palette که با کلید F4 یا به کمک کلید موجود در منو بالای صفحه شبیه سازی نمایان می شود. آیکون های مختلف با نماد استاندارد در نقشه های PFD فرآیندهای شیمیایی در این پنجره بر مبنای معادلات حاکم آنها ارائه شده اند. در ادامه به معرفی برخی از آنها به صورت اجمالی پرداخته شده است. با انتخاب هر کدام از آیکون ها با دوبار چپ کلیک کردن یا به کمک Mouse می توان آنها را به محیط شبیه سازی اضافه کرد

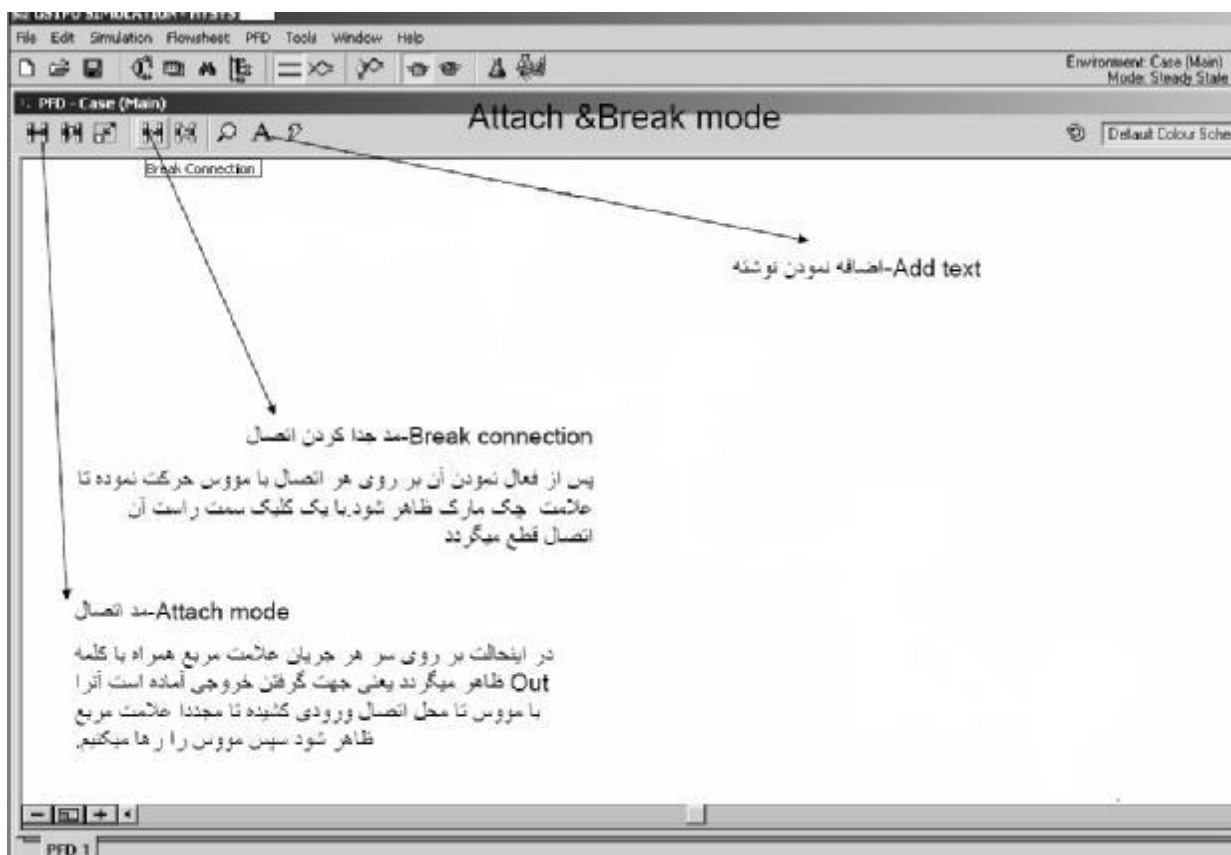


## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)



در اینجا به صورت تصویری به نحوه ایجاد جریان فرآیندی و برخی تجهیزات (بعد از انتخاب اجزاء و مدل ترمودینامیکی) و همچنین معرفی قسمت های مختلف پرداخته می شود.

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)



**Attach mode** : با کلیک روی آن می توان جریان ها را به دستگاه متصل کرد.

**Auto Attach mode** : با انتخاب این حالت با اضافه کردن هر دستگاه به محیط شبیه سازی، حداقل جریان های جرمی و انرژی مورد نیاز هر دستگاه، به آن به طور اتوماتیک متصل می گردد.

**Size Mode** : برای تغییر اندازه یا پاک کردن جریان یا دستگاه این حال را به کار می بریم.

**Break Connection** : برای قطع اتصال جریان ها با دستگاه عملیاتی به کار می رود .

**Swap Connection** : برای جابجا کردن نازل دو جریان متصل به یک دستگاه به کار می رود.

**Drag Zoom** : با انتخاب این مورد می توان قسمت مشخصی از PFD را بزرگ کرد.

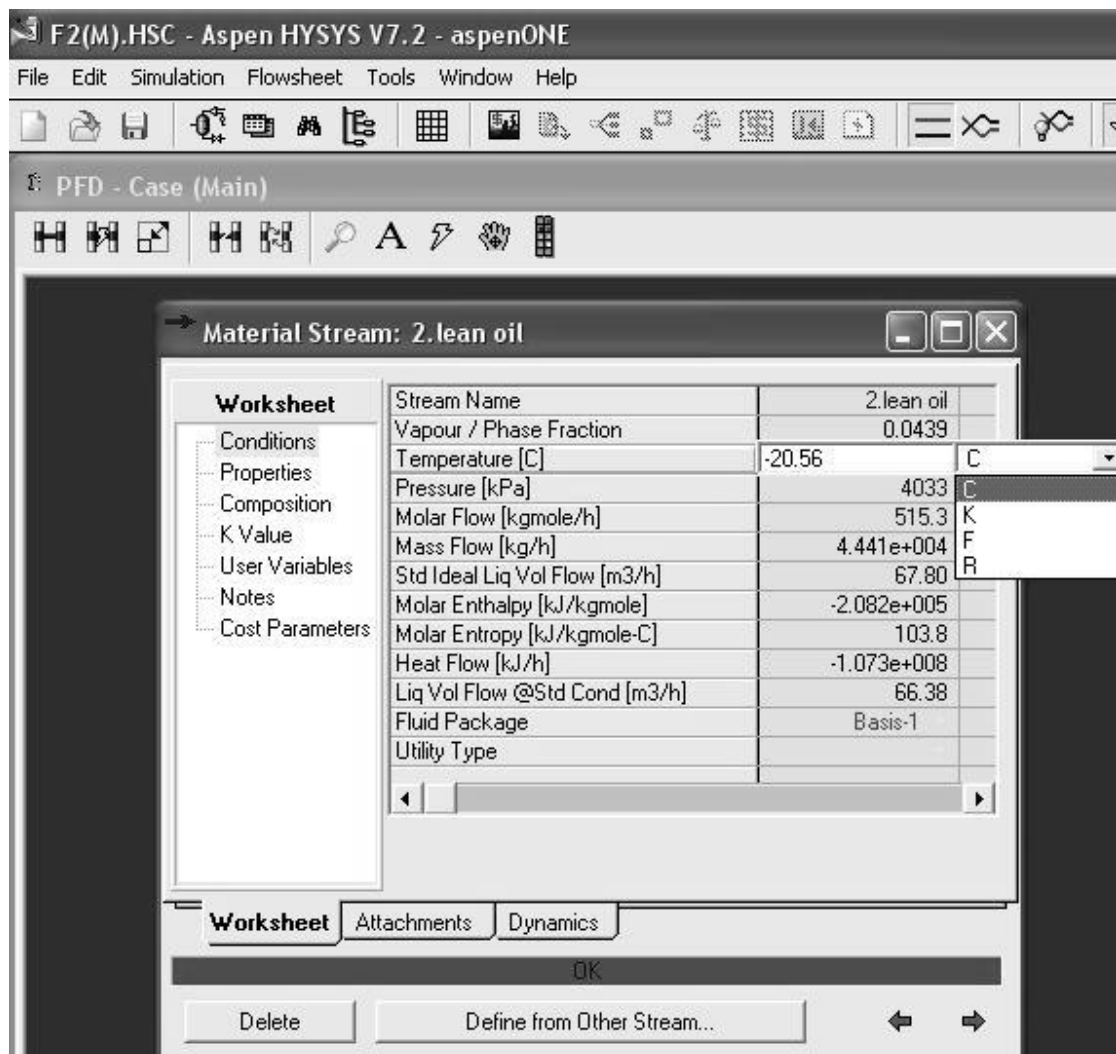
**Quick Route Mode** : برای عبور جریان ها از روی دستگاه ها به کار می رود.

**Palette** ، برای حذف یا اضافه کردن Palette به کار می رود.

جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

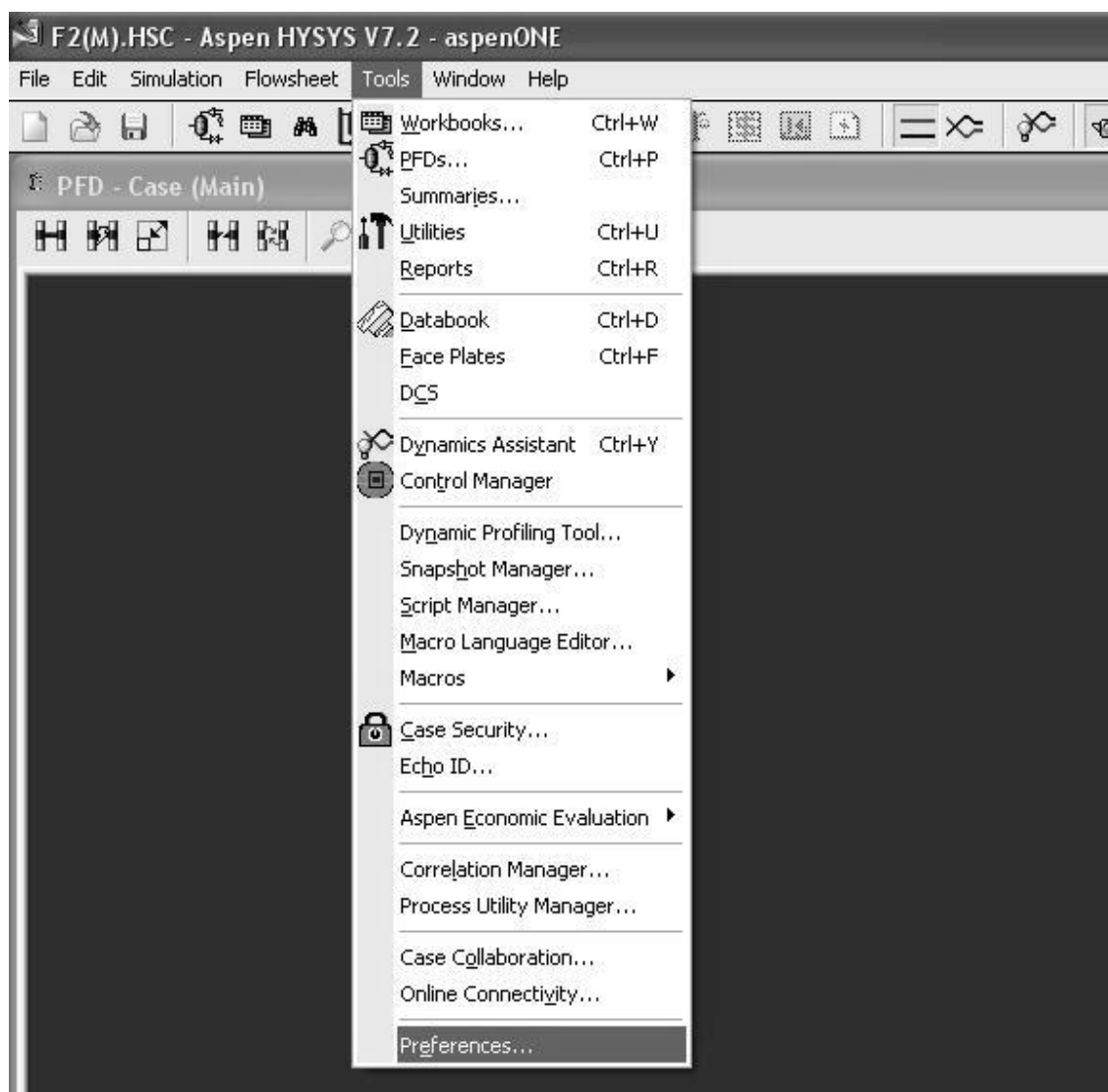
## - تنظیم سیستم آحاد (واحد پارامترها)

جهت تنظیم واحد مقادیر پارامترها، می توان هنگام وارد کردن مقدار پارامتر از کلید ترکیبی باز شده در قسمت واحد پارامتر، واحد مطلوب را تنظیم کرد

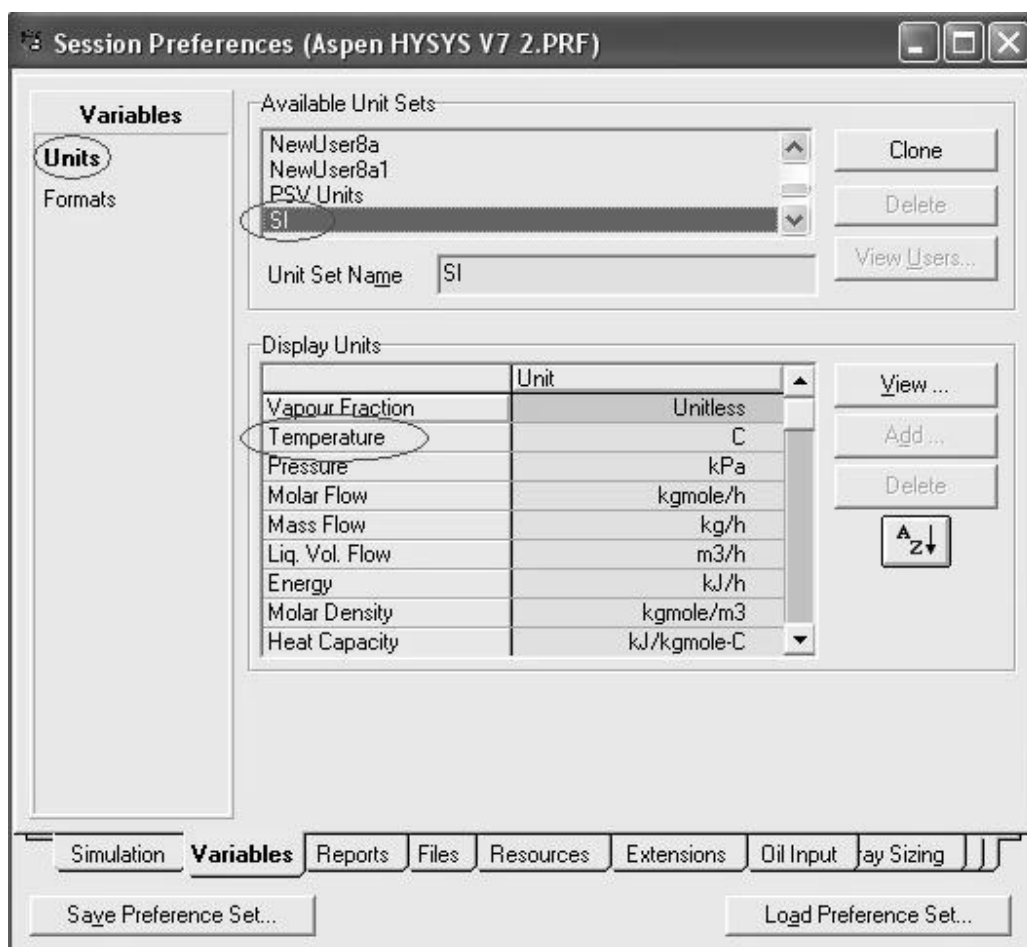


اما در صورت تمایل به تغییر سیستم آحاد جهت تغییر کل واحدها، می توان از مسیر زیر سیستم SI یا مهندسی و... را انتخاب و بدون نیاز به ثبت یا وارد کردن اطلاعات دیگری پنجره را بسته و با ابعاد جدید ادامه می دهیم

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)



جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره: 1)



## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

➡ **Material Stream** (جریان جرمی (مواد)



## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)



## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

Stream-worksheet-Composition

| Component                        | Molar Flow                |
|----------------------------------|---------------------------|
| Ethane                           | 8.5300                    |
| Propane                          | 5.2550                    |
| n-Butane                         | 1.0200                    |
| n-Pentane                        | 3.1200                    |
| n-Hexane                         | 1.4100                    |
| n-Heptane                        | 1.0050                    |
| n-Octane                         | 2.8950                    |
| H <sub>2</sub> S                 | 0.40600                   |
| CO <sub>2</sub>                  | 1.0050                    |
| C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH | 40.230                    |
| <b>Total</b>                     | <b>100.01700 kmole/hr</b> |

Streams: 1

Compositional Basis

- ☐ Mole Fractions
- ☐ Mass Fractions
- ☐ Liquid Volume Fractions
- ☒ Mole Flows
- ☐ Mass Flows
- ☐ Liquid Volume Flows

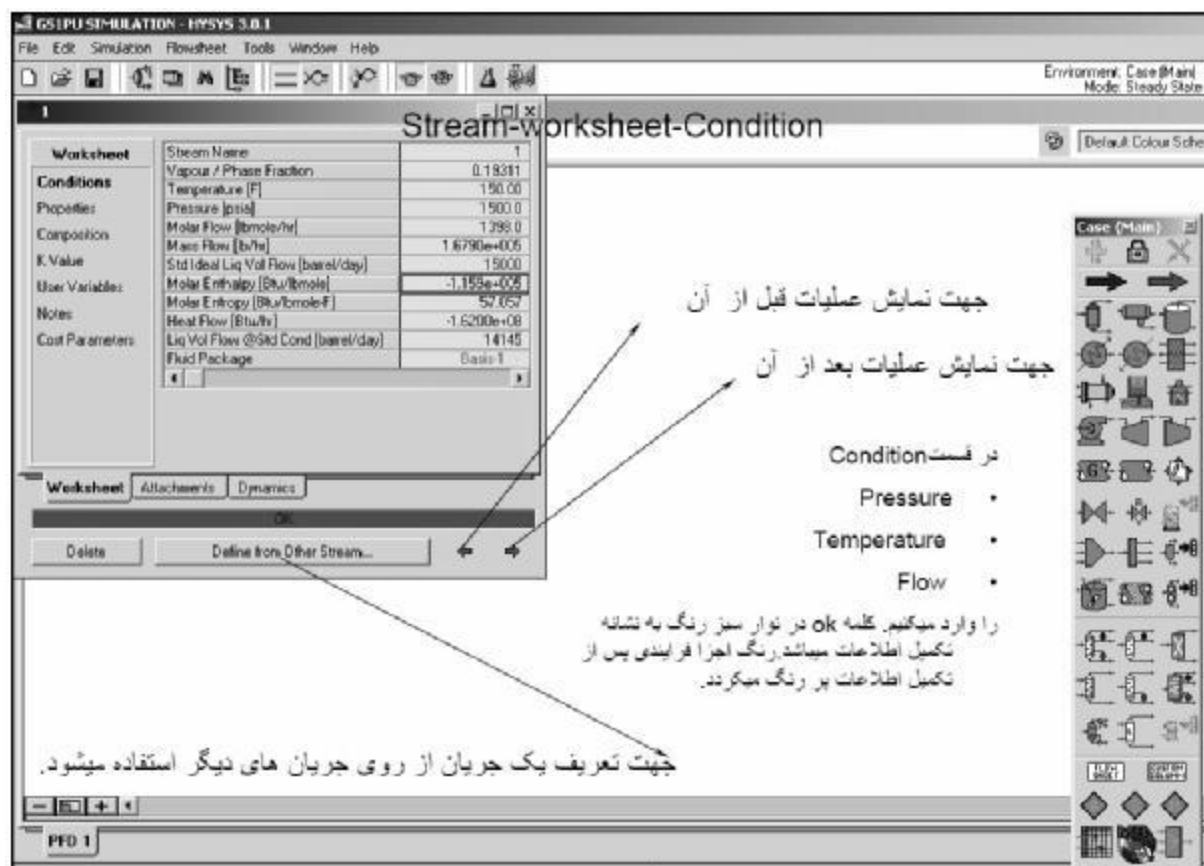
ترکیبات Composition با انتخاب Basis مناسب

- Mole fraction
- Mass fraction
- Volume fraction
- Mole flow
- Mass flow
- Volume flow

مقادیر هر جزء را وارد میکنیم.

PFD 1

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)



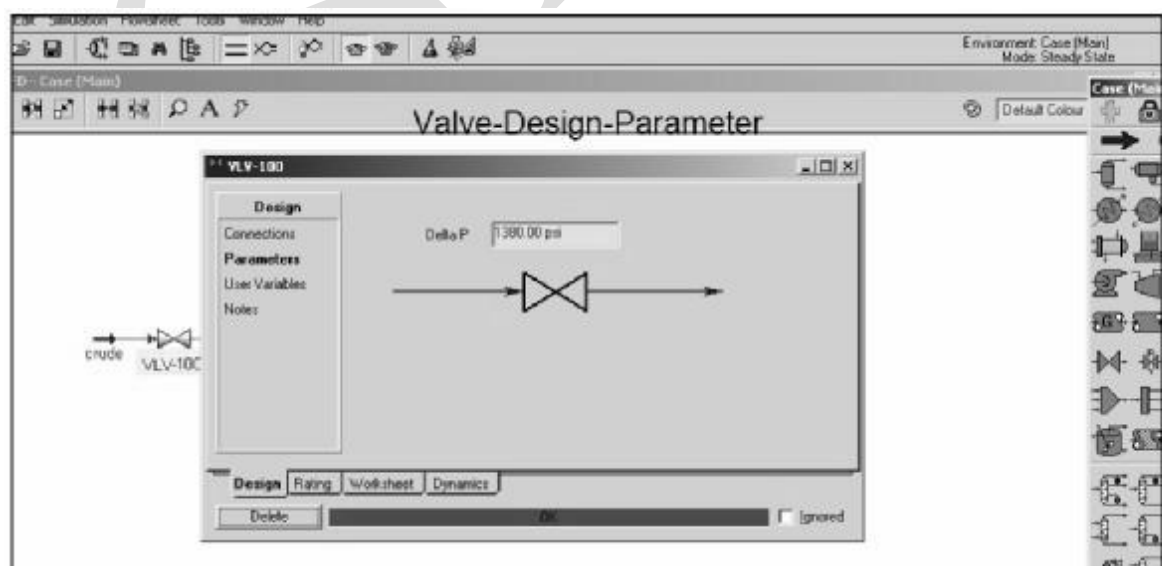
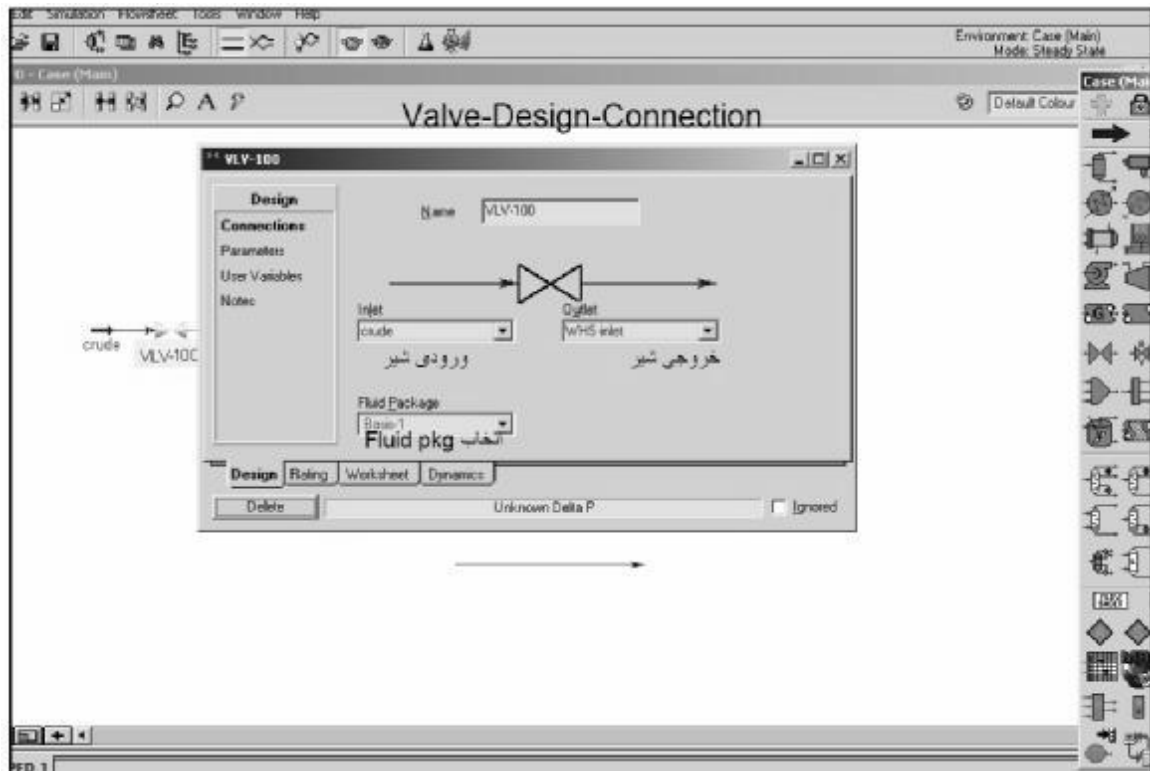
برای متصل کردن جریان های جرمی یا انرژی به دستگاه های عملیاتی، باید در محیط شبیه سازی کلیک راست کنیم و Attach mode را انتخاب کنیم یا روی دستگاه کلیک کنیم و در برگه Design صفحه Connections نام جریان ها را وارد کنیم. همان طور که در قسمت قبل اشاره کردیم برای ایجاد Attach mode می توان از علامت این حالت روی نوار ابزار (Tool bar) استفاده کرد.

در برگه ksheets positionCom صفحه جریان، باید غلظت مواد را به صورت دلخواه وارد کرد. جزء مولی مواد حالت پیش فرض نرم افزار می باشد. برای تغییر آن به دبی مولی یا جرمی از کلید Basis در آن صفحه استفاده می شود

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

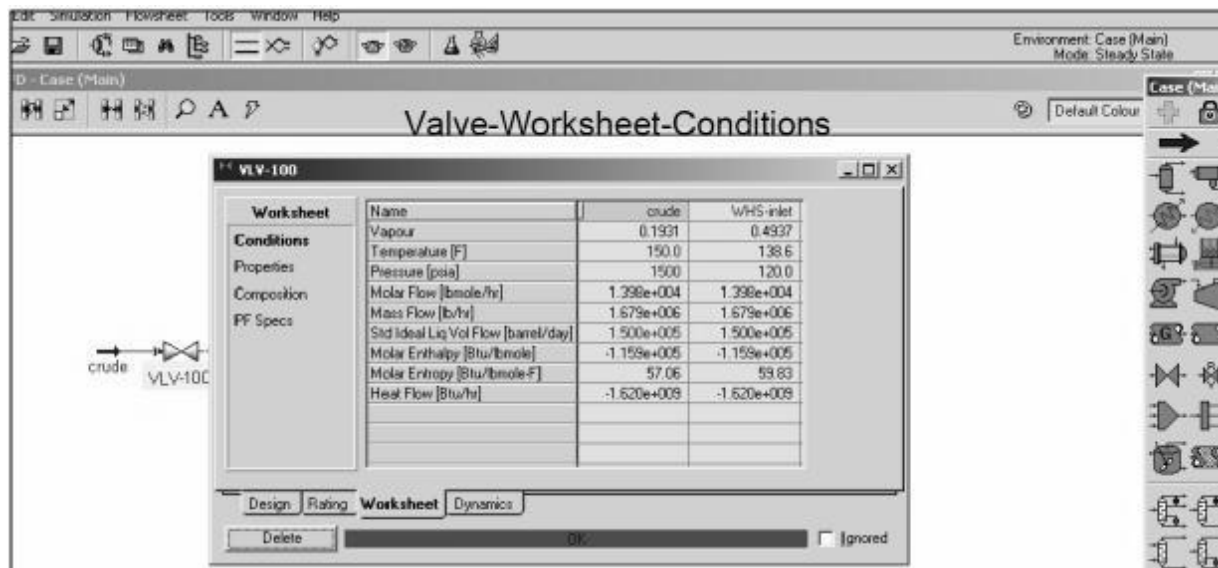
### - شیر Valve

برای لحاظ کردن شیر در شبیه سازی حالت پایا، باید پس از انتخاب و افزودن آن به محیط شبیه سازی باید جریان های ورودی و خروجی در صفحه Connection از برگه Design در پنجره اصلی شیر و همچنین افت فشار در صفحه Parameters این برگه را وارد کرد تا اجرا شود.



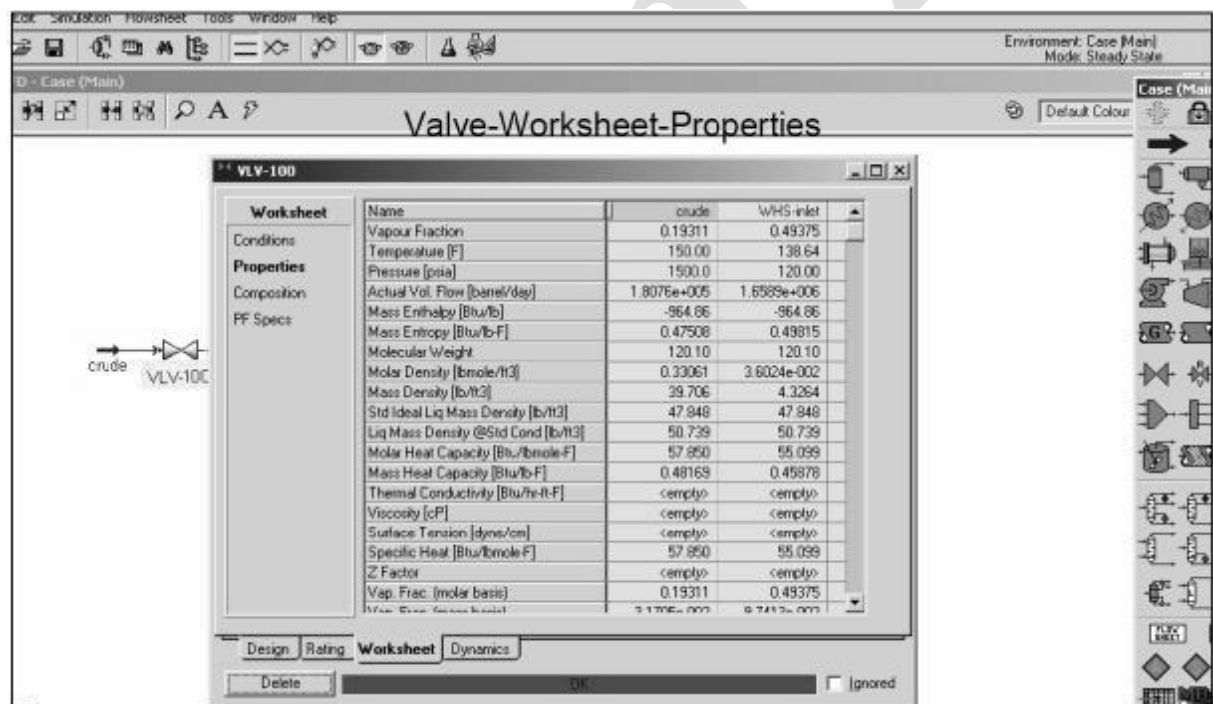
## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

پس از اجرا شدن شیر می توان در پنجره آن در برگه worksheet داده های ورودی و نتایج را برای سیال در جریان ورودی و خروجی مشاهده کرد.



**Valve-Worksheet-Conditions**

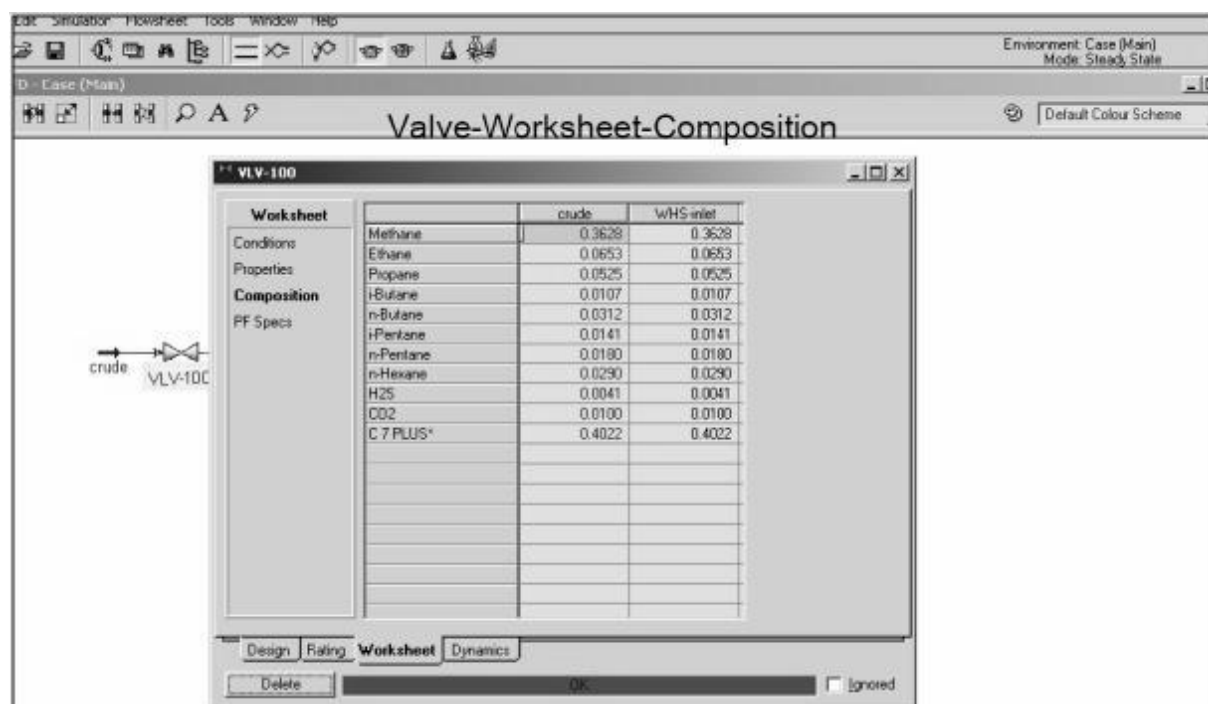
| Name                                | crude       | WHS-inlet   |
|-------------------------------------|-------------|-------------|
| Vapour                              | 0.1931      | 0.4937      |
| Temperature [F]                     | 150.0       | 138.6       |
| Pressure [psia]                     | 1500        | 120.0       |
| Molar Flow [lbmole/hr]              | 1.398e+004  | 1.398e+004  |
| Mass Flow [lb/hr]                   | 1.679e+006  | 1.679e+006  |
| Std Ideal Liq Vol Flow [barrel/day] | 1.500e+005  | 1.500e+005  |
| Molar Enthalpy [Btu/lbmole]         | -1.159e+005 | -1.159e+005 |
| Molar Entropy [Btu/lbmole-F]        | 57.06       | 53.83       |
| Heat Flow [Btu/hr]                  | -1.620e+009 | -1.620e+009 |



**Valve-Worksheet-Properties**

| Name                                | crude       | WHS-inlet   |
|-------------------------------------|-------------|-------------|
| Vapour Fraction                     | 0.19311     | 0.49375     |
| Temperature [F]                     | 150.00      | 138.64      |
| Pressure [psia]                     | 1500.0      | 120.00      |
| Actual Vol. Flow [barrel/day]       | 1.8076e+005 | 1.6589e+006 |
| Mass Enthalpy [Btu/lb]              | -964.86     | -964.86     |
| Mass Entropy [Btu/lb-F]             | 0.47508     | 0.49815     |
| Molecular Weight                    | 120.10      | 120.10      |
| Molar Density [lbmole/ft3]          | 0.33061     | 3.6024e-002 |
| Mass Density [lb/ft3]               | 39.706      | 4.3264      |
| Std Ideal Liq Mass Density [lb/ft3] | 47.848      | 47.848      |
| Liq Mass Density @Std Cond [lb/ft3] | 50.739      | 50.739      |
| Molar Heat Capacity [Btu/lbmole-F]  | 57.850      | 55.099      |
| Mass Heat Capacity [Btu/lb-F]       | 0.48169     | 0.45878     |
| Thermal Conductivity [Btu/hr-ft-F]  | <empty>     | <empty>     |
| Viscosity [cP]                      | <empty>     | <empty>     |
| Surface Tension [dynes/cm]          | <empty>     | <empty>     |
| Specific Heat [Btu/lbmole-F]        | 57.850      | 55.099      |
| Z Factor                            | <empty>     | <empty>     |
| Vap. Frac. (molar basis)            | 0.19311     | 0.49375     |

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره: 1)



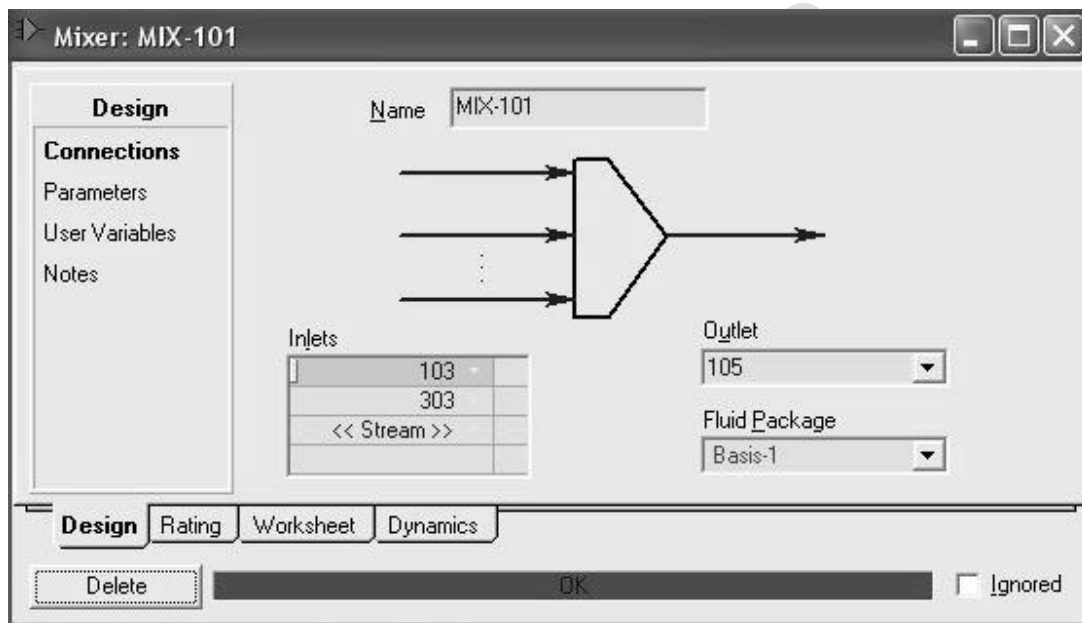
## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)



### - مخلوط کننده جریان Mixer

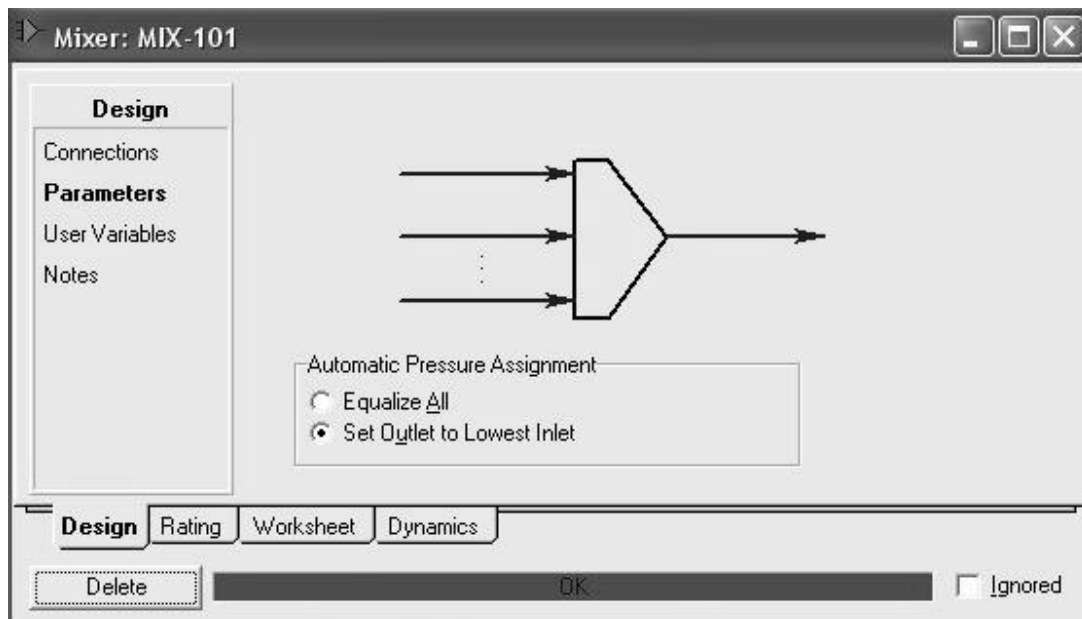
Mixer برای مخلوط کردن چند جریان جرمی و تولید یک جریان خروجی بکار می رود. با کلیک کردن روی این دستگاه عملیاتی، صفحه آن باز می شود که برگه ها و صفحات مختلفی دارد :

در برگه Design صفحه Connections نام جریان های ورودی و خروجی دیده می شود



## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

در برگه Design صفحه Parameters وضعیت فشار جریان ها را مشخص می کند.



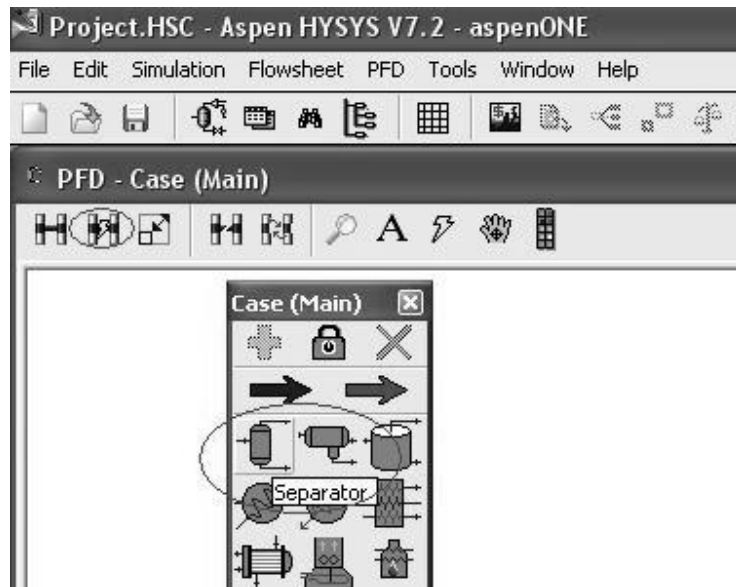
کلید رادیویی اگر در حالت **Equalize All** باشد و فشار یکی از جریان های ورودی با بقیه اختلاف داشته باشد، نرم افزار پیغام نقض شدن اصل بقا را می دهد که در این حالت باید فشار را اصلاح یا پاک کرد تا نرم افزار آن را محاسبه کند. ولی در حالت **Set Outlet to lowest inlet**، نرم افزار فشار جریان خروجی را با پایین ترین فشار جریان ورودی برابر قرار می دهد و در این حالت می توان چند جریان با فشار های مختلف را به **Mixer** متصل کرد.

نرم افزار به طور پیش فرض روی **Equalize All** فعال می باشد و به همین دلیل پس از اتصال جریان های ورودی و خروجی محاسبات را انجام می دهد و نیاز به وارد کردن اطلاعات اضافی نیست.

جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)



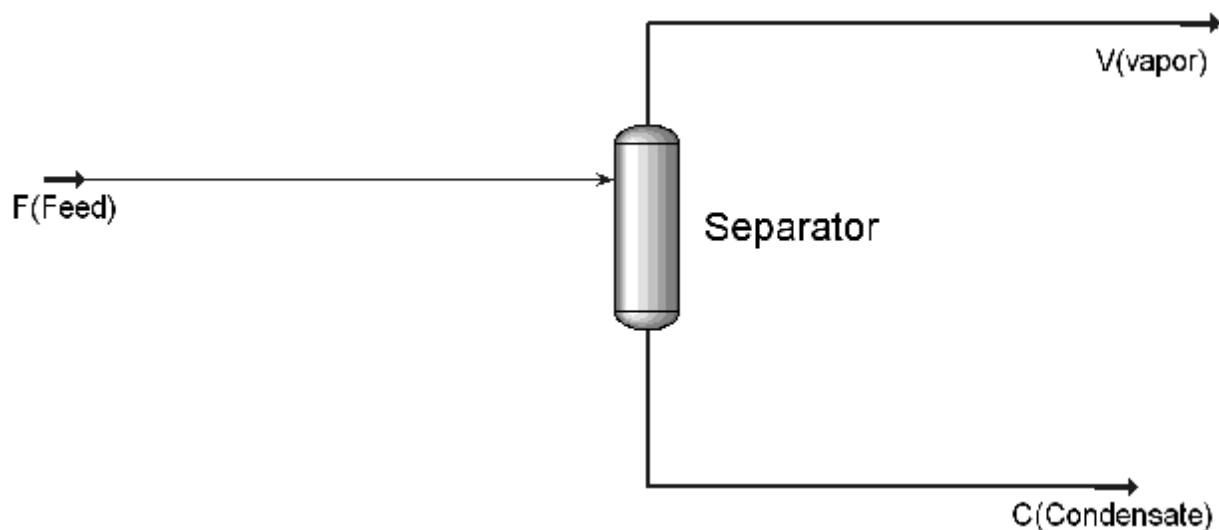
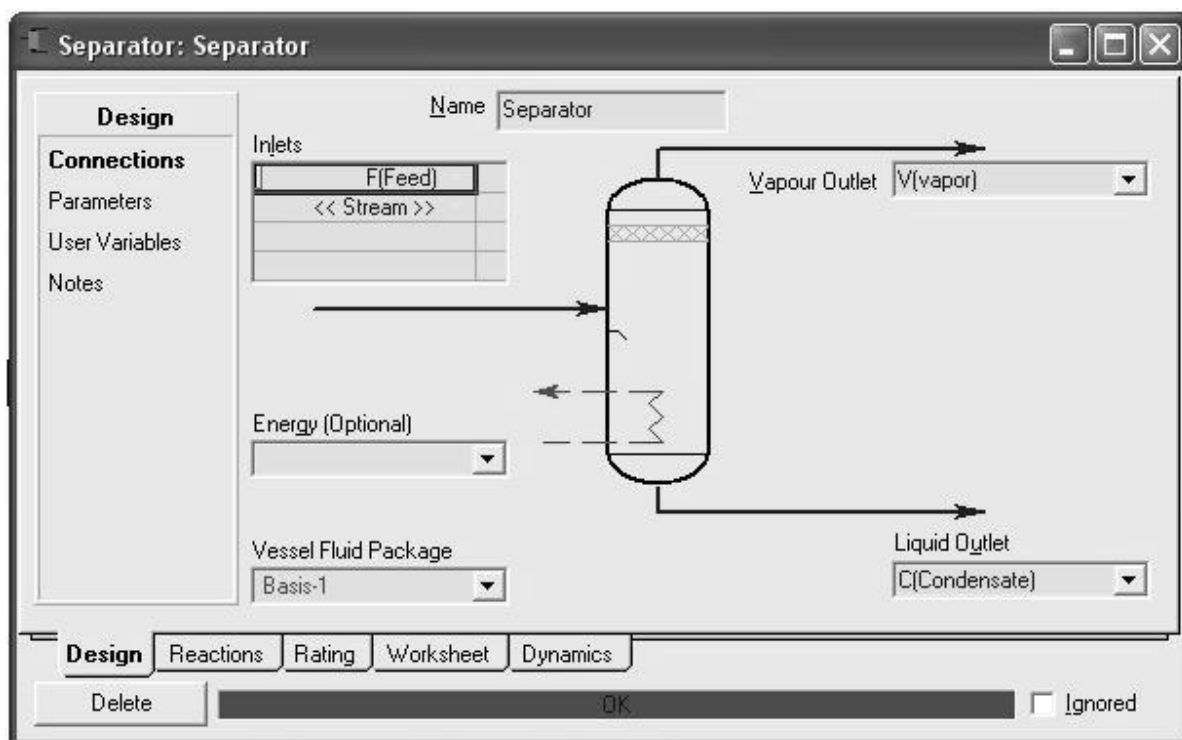
- جدا کننده Separator



همان طور که قبلا اشاره کردیم برای شبیه سازی باید مشخصات ورودی و دستگاه عملیاتی داده شود تا مشخصات جریان خروجی توسط نرم افزار محاسبه شود. علاوه بر تعیین جریان های ورودی و خروجی دستگاه که در برگه Design و صفحه Connection وارد می شود معمولا مشخصات دستگاه ها در برگه Design و صفحه Parameters وارد می شود.

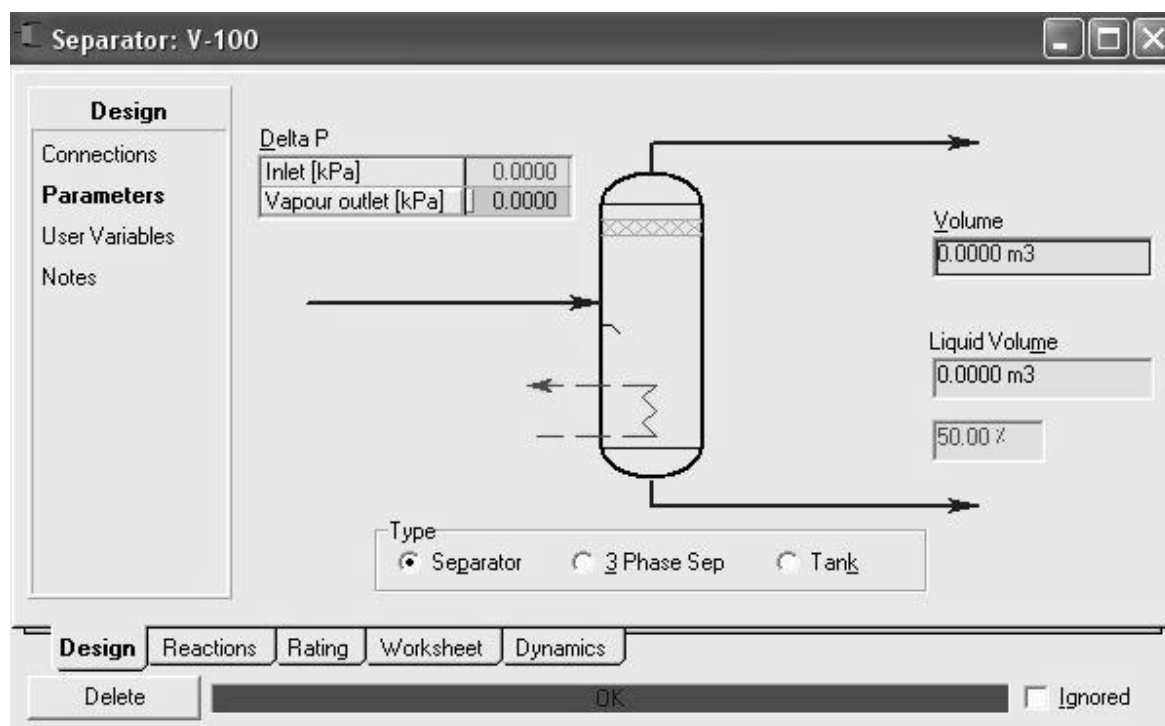
بنا بر این برای شبیه سازی این دستگاه نیز (که توضیحات تئوری کاربرد و نحوه عملکرد آن در مباحث مطرح شده در کلاس به طور مفصل ارائه شده است) باید مراحل زیر طی شود.

جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره: 1)



## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

اشاره شد که برای وارد کردن مشخصات دستگاه ها در برگه Design و صفحه Parameters وارد می شود.



در قسمت افت فشار (Delta P) دو عدد وارد می کنیم

- افت فشار دو فاز مایع و بخار به دلیل ورود به جدا کننده (Inlet)
- افت فشار فاز بخار به دلیل عبور از توری سیمی در قسمت بالای جدا کننده و خط لوله خروجی (Vapour outlet)

در حقیقت مجموع افت فشارهای مذکور، افت فشار فاز بخار را نشان می دهد ولی برای فاز مایع فقط افت فشار اول لحاظ می شود. مایع نیز مشابه بخار به دلیل خروج از جدا کننده و ورود به خط لوله افت فشار دارد اما به دلیل هد استاتیکی (ارتفاع مایع در کف ظرف) فاز مایع مقداری افزایش فشار نیز دارد که نرم افزار افزایش فشار اخیر با افت فشار به دلیل خروج از جدا کننده را برابر در نظر می گیرد و نیازی به وارد کردن افت فشار برای مایع در قسمت دوم نیست. در حالت پیش فرض نرم افزار افت فشار را صفر در نظر می گیرد و در صورتی که افت فشار وارد نشود مقدار آن را صفر در نظر گرفته و محاسبات را بر آن مبنا انجام می دهد و در نهایت شبیه سازی انجام می شود. پس از اجرا شدن شبیه سازی جدا کننده، می توان در پنجره آن در برگه worksheet داده های ورودی و نتایج را برای سیال در جریان ورودی و خروجی مشاهده کرد.

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

**Separator: V-100**

|           | feed   | liquid | vapour |
|-----------|--------|--------|--------|
| i-Pentane | 0.0693 | 0.1249 | 0.0201 |
| n-Butane  | 0.0792 | 0.1190 | 0.0440 |
| i-Butane  | 0.0693 | 0.0951 | 0.0464 |
| Propane   | 0.0990 | 0.0955 | 0.1021 |
| n-Hexane  | 0.0495 | 0.1007 | 0.0042 |
| Ethane    | 0.1485 | 0.0489 | 0.2366 |
| H2O       | 0.0594 | 0.1256 | 0.0008 |
| H2S       | 0.0198 | 0.0082 | 0.0300 |
| CO2       | 0.0198 | 0.0040 | 0.0338 |
| n-Heptane | 0.0594 | 0.1247 | 0.0016 |
| n-Pentane | 0.0693 | 0.1308 | 0.0149 |
| Nitrogen  | 0.0099 | 0.0004 | 0.0183 |
| Methane   | 0.2475 | 0.0222 | 0.4470 |
|           |        |        |        |
|           |        |        |        |
|           |        |        |        |

Design Reactions Rating **Worksheet** Dynamics

Delete OK Ignored

در صورت نیاز می توان عمودی یا افقی بودن جدا کننده و یا دوفازی یا سه فازی بودن آن را تعیین کرد. در مباحث تخصصی تر سائز جدا کننده شبیه سازی شده را نیز می توان بر اساس استاندارد های طراحی به کمک نرم افزار محاسبه کرد. همچنین در شبیه سازی دینامیک سائز جدا کننده نیز باید وارد شود که می توان در برگه **Rating** آن را وارد کرد اما با توجه به اینکه از حوزه بحث خارج است به آن نمی پردازیم

File Edit Simulation Flowsheet Tools Window Help

Environment: Case (Main)  
Mode: Steady State

**Vessel-rating**

Rating

Sizing  
Heat Loss

Geometry

Orientation: ☒ Vertical ☐ Horizontal

☒ Cylinder ☐ Sphere

|              |       |
|--------------|-------|
| Volume [m3]  | 6039  |
| Diameter [m] | 13.00 |
| Height [m]   | 45.50 |

☐ This separator has a foot

Quick Size  
We...

Design Reactions **Rating** Worksheet Dynamics

Delete OK Ignored

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره: 1)

بنا بر این پس از اتصال جریان های ورودی و خروجی، با توجه به اینکه افت فشار ها را نرم افزار به صورت پیش فرض صفر در نظر می گیرد در صورتی که اطلاعات جریان ورودی وارد شده و جریان محاسبات شبیه سازی آن اجرا شده باشد (در این نرم افزار بعد از اجرا شدن یا اصطلاحاً Run شدن تجهیزات در محیط شبیه سازی، رنگ ظاهری آن ها تغییر می کند) محاسبات شبیه سازی جدا کننده نیز بر مبنای افت فشار صفر، صورت گرفته و شبیه سازی اجرا می شود و نیازی به وارد کردن اطلاعات اضافی نیست.

لازم به ذکر است که در صورت وارد کردن جریان انرژی به این دستگاه، در واقع آن را به عنوان تبخیر کننده در شبیه سازی می توان استفاده کرد

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)



### - برج جذب Absorber tower

در این قسمت به نحوه شبیه سازی برج جذب در این نرم افزار می پردازیم. ابتدا در قالب مطالب صنعتی، ضمن آشنایی با برخی اصطلاحات و فرآیندهای صنعتی، به برخی مفاهیم اولیه این بحث می پردازیم. در فرآیند جذب گاز یک یا چند جزء از فاز گاز به فاز مایع منتقل می شود و این عمل توسط تماس با یک فاز مایع و انتقال جرم از گاز به مایع صورت می گیرد و در صنعت این تماس بین فازها جهت انتقال جرم درون برج های تماس دهنده پر شده یا سینی دار و غیره صورت می گیرد. برج تماس دهنده دو فاز را برای جذب گاز، برج جذب می نامند. در فرآیند جذب گاز، به حلال خروجی از انتهای برج جذب که غنی از جزء حل شونده است، **Rich Solvent** می گویند. همچنین پس از فرآیند جذب معمولاً برای بازیابی حلال از برج دیگری که عملیات عکس برج جذب را انجام می دهد و اصطلاحاً آن را برج دفع یا برج احیاء می نامند نیز استفاده می شود. حلال خروجی از انتهای برج احیاء که برای استفاده مجدد به سمت برج برج جذب هدایت می شود، **Lean Solvent** می گویند. جریان حلال و گاز باید وارد برج جذب شوند. لازم به ذکر است معمولاً فرآیند جذب در دمای پایین و فرآیند دفع در دمای بالا انجام می شود.

در این نرم افزار سه نوع برج جذب وجود دارد:

- برج جذب معمولی و متداول

- برج جذب با جریان برگشتی

- برج جذب با ریپویلر

پس از انتخاب برج جذب، از **Palette**، علامت صلیب سبز رنگ را می زنیم تا برج جذب به صفحه شبیه سازی اضافه شود. باید جریان **Solvent** را به بالاترین نقطه که در واقع محل مایع ورودی از بالای برج است و جریان گاز ورودی را نیز به پایین ترین نقطه برج جذب منتقل شود. به توضیحات **Tool Tips** (توضیحات زیر موس که در صورت نگه داشتن موس روی قسمت های مختلف، مختصر توضیحی ارائه می شود) دقت کنید. محل اتصال جریان گاز ورودی در پائین و **Rich Solvent** خروجی نیز مشخص شده است.

جهت شبیه سازی برج جذب باید داده های جریان های ورودی تکمیل شده و شبیه سازی آن اجرا شود و همچنین باید داده های مکانیکی و فرآیندی برج را وارد نمود.

این داده ها پس از کلیک کردن روی آیکون برج در محیط شبیه سازی و باز شدن پنجره اصلی برج، در صفحه مختلف و قسمت مختلف هر صفحه وارد می شود. بنا بر این برای وارد کردن داده های برج روی آن کلیک کنید تا صفحه آن باز

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

شود. اشاره شد که داده های مورد نیاز برای برج های جذب را می توان در صفحات مختلف وارد نمود که برای انتخاب به صفحه بعد باید کلید Next را بزنیم . در صورت کامل نبودن داده های هر صفحه ، کلید Next آن صفحه فعال نمی شود.

**Absorber Column Input Expert**

Column Name:

Top Stage Inlet:

Optional Inlet Streams

| Stream       | Inlet Stage |
|--------------|-------------|
| << Stream >> |             |

Bottom Stage Inlet:

Stage Numbering: ☒ Top Down ☐ Bottom Up

Optional Side Draws

| Stream       | Type | Draw Stage |
|--------------|------|------------|
| << Stream >> |      |            |

Top Stg. Reflux: ☒ Liquid inlet ☐ Pump-around

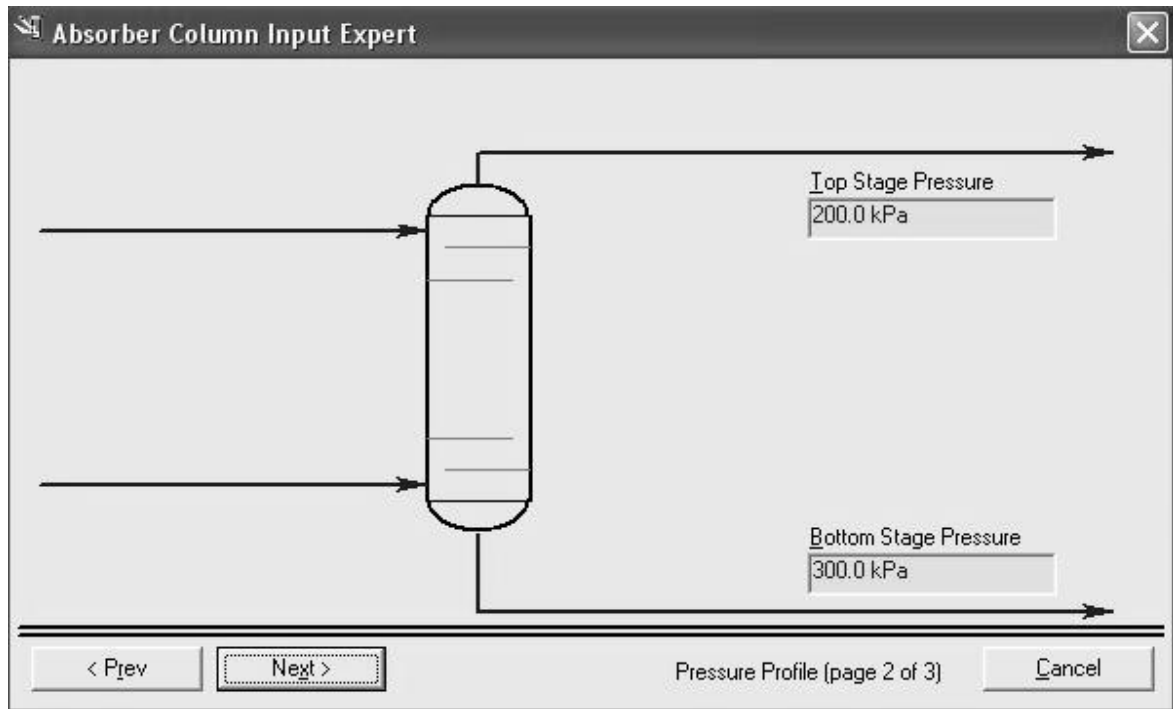
Bottoms Liquid Outlet:

Connections (page 1 of 3)

< Prev Next > Cancel

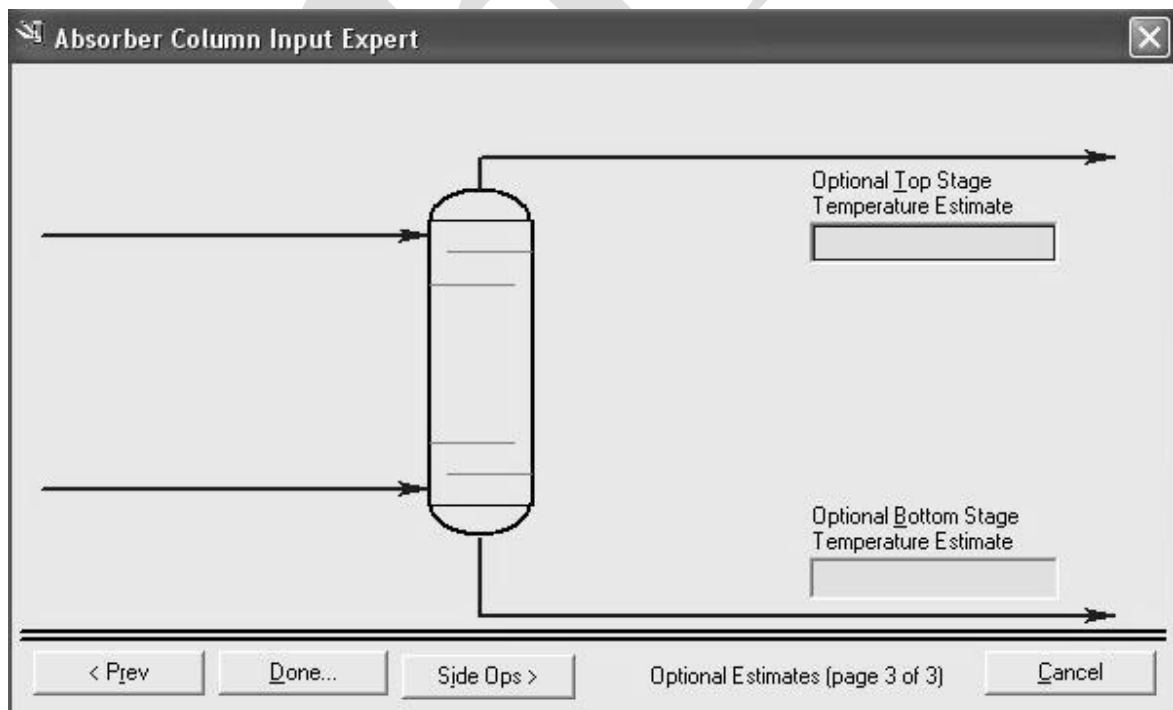
در صفحه اول نام برج، نام جریان های ورودی و خروجی و تعداد سینی (و یا در مواردی نام جریانی که pump-around می شود یعنی از یک قسمت برج خارج و پس از گرم یا سرد کردن مجددا وارد برج می شود و یا اگر جریان جانبی وجود دارد) را تعیین کرده و پس از زدن کلید Next وارد صفحه دوم می شویم

جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)



The screenshot shows the 'Absorber Column Input Expert' dialog box, specifically the 'Pressure Profile' page (page 2 of 3). The dialog features a schematic of an absorber column with two input streams on the left and two output streams on the right. The top output stream is labeled 'Top Stage Pressure' with a value of '200.0 kPa'. The bottom output stream is labeled 'Bottom Stage Pressure' with a value of '300.0 kPa'. At the bottom of the dialog, there are navigation buttons: '< Prev', 'Next >', 'Pressure Profile (page 2 of 3)', and 'Cancel'.

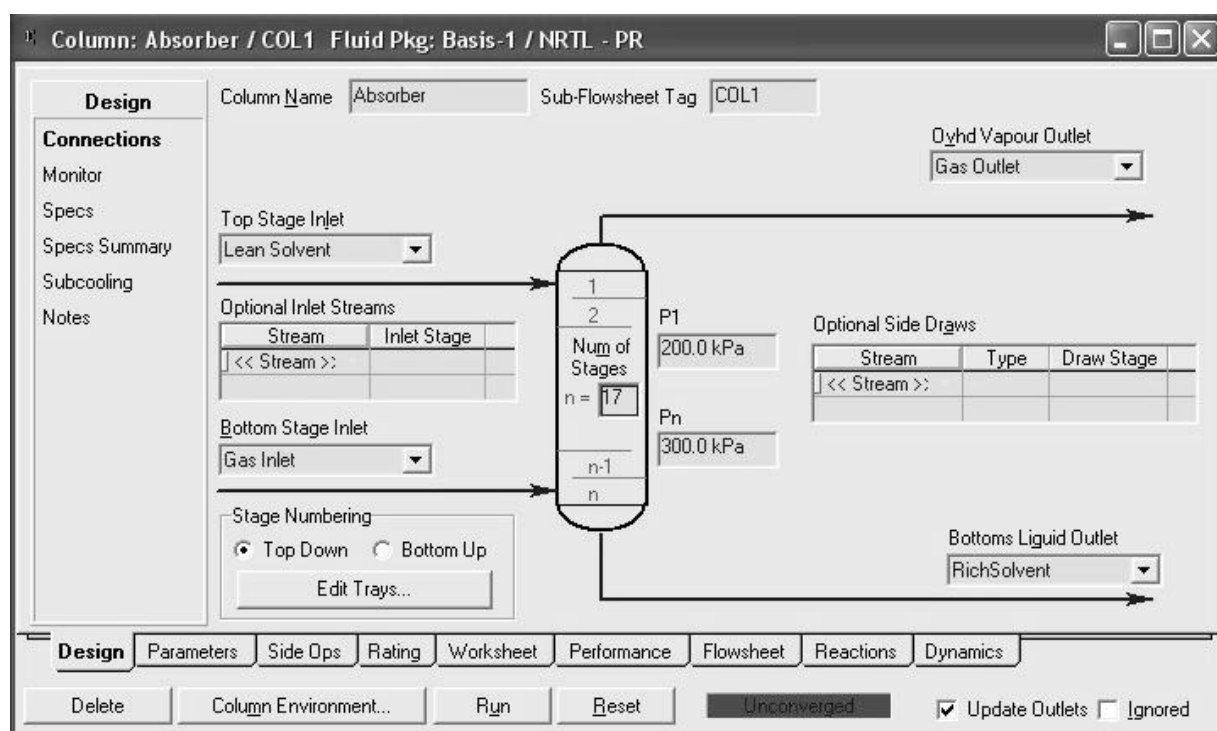
در صفحه دوم فشار بالا و پائین برج را مشخص و پس از زدن کلید Next وارد صفحه سوم می شود که باید دمای بالا و پایین برج را بصورت Optional (دلخواه) وارد کنیم .



The screenshot shows the 'Absorber Column Input Expert' dialog box, specifically the 'Optional Estimates' page (page 3 of 3). The dialog features the same schematic of an absorber column. The top output stream is labeled 'Optional Top Stage Temperature Estimate' with an empty input field. The bottom output stream is labeled 'Optional Bottom Stage Temperature Estimate' with an empty input field. At the bottom of the dialog, there are navigation buttons: '< Prev', 'Done...', 'Side Ops >', 'Optional Estimates (page 3 of 3)', and 'Cancel'.

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

برای برج های جذب، تقطیر و غیره پیشنهاد می شود این صفحه را خالی بگذارید و عددی وارد نکنید تا دمای بالا و پایین برج با استفاده از ترکیب درصدی بدست آمده در فشار تعیین شده، محاسبات نقطه حباب و شبنم جریان ها توسط نرم افزار محاسبه شود و در واقع به این شکل دمای بالا و پائین برج توسط نرم افزار محاسبه و تعیین شود. بنا بر این در این صفحه کلید Done را بزنید تا تمام اطلاعات وارد شده، در صفحه نهایی برج دیده شود.



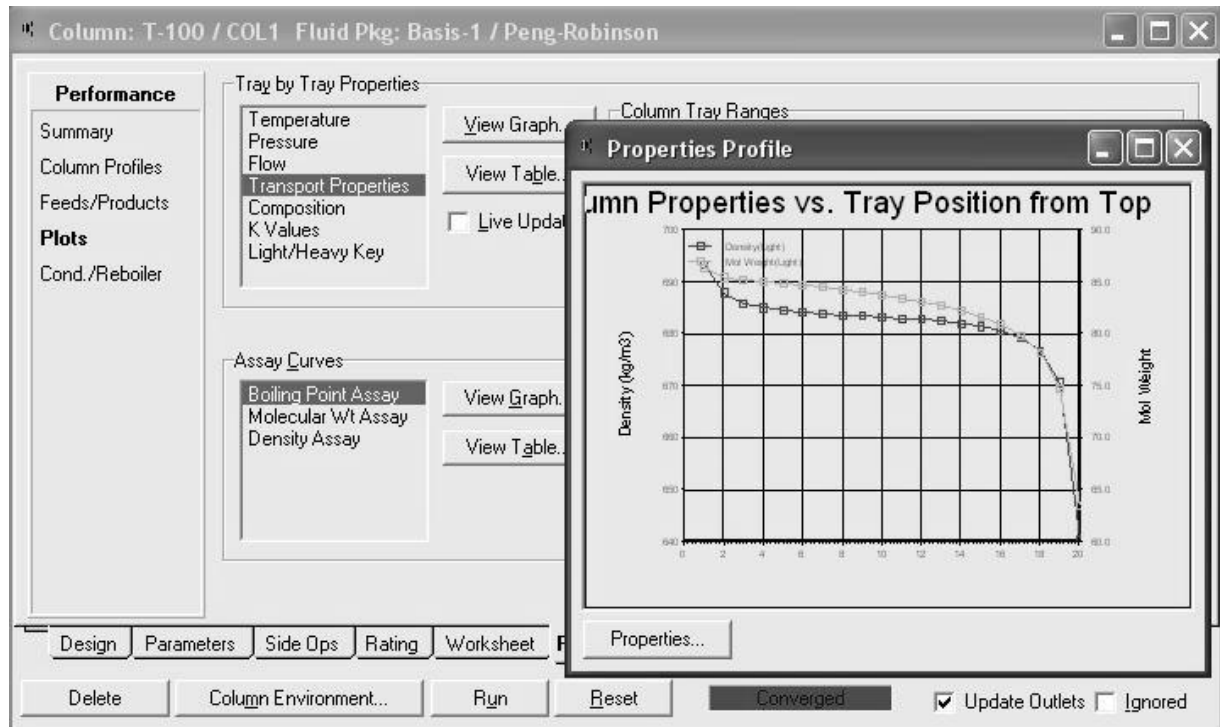
البته اگر بخواهید از ابتدا همین صفحه (که تمام اطلاعات در یک صفحه باشد) باز شود و احتیاجی به زدن Next نباشد، در Tools/preferences صفحه Option در برگه Simulation تیک قسمت Use Input Experts را بردارید.

در نهایت پس از وارد کردن اطلاعات در صفحه آخر، با زدن کلید Run برج اجرا می شود و کلمه Converged در نوار سبز رنگی دیده خواهد شد.

به خاطر بسپارید که فشار بالای برج و فشار پایین از فشار جریان های ورودی (جریان حلال و جریان گاز) کمتر می باشد تا جریان بتواند وارد برج شود.

پس از اجرا (Run) و همگرا (Converged) شدن محاسبات شبیه سازی برج، می توان برای بررسی نتایج شبیه سازی و یا جزئیات دیگر از برگه های Worksheet و همچنین Performance مقادیر حاصل را مشاهده کرد.

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره: 1)



در این برگه در صفحه های مختلف توزیع پارامترها و دیگر جزئیات از برج ارائه شده است. در صفحه Plots از همین برگه، می توان پارامترهای فیزیکی و ترمودینامیکی حاصل از شبیه سازی برج و پیش بینی رفتار برج است را به صورت جدول و نمودار نمایش داد .

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

### مثال:

در فرآیند شیرین سازی نفت و جدا کردن گازهای حل شده و آب را از هیدروکربن های سنگین، گاز خروجی از جداکننده خوراک واحد های پتروشیمی می باشد که به دلیل وجود گازهای اسیدی در آن، باید با استفاده از محلول آبی آمین در فرآیند جذب، شیرین شود که این فرآیند در مثال دیگر شبیه سازی خواهد شد. هیدروکربن های موجود در گاز شیرین خروجی از بالای برج جذب باید از یکدیگر جدا شود تا هر کدام به صورت بهینه مصرف شوند. مخلوط  $C_1-C_2$  را OffGas می نامند و از آن می توان برای تولید گاز سنتز (به مخلوط  $CO-CO_2-H_2$  گاز سنتز گویند) و در نهایت تولید متانول یا آمونیاک استفاده کرد. پروپان و مخلوط  $i-C_4$  and  $n-C_4$  را به عنوان LPG و یا به طور جداگانه و تا قیمت مناسبی در بازار های جهانی عرضه کرد. جداسازی هیدروکربن ها در دماها زیر صفر انجام می شود و به همین دلیل باید ابتدا بخار آب موجود در جریان فرآیندی را از هیدروکربن ها جدا کرد که شبیه سازی این فرآیند در اینجا به آن نمی پردازیم. پس از آگیری از گاز، باید هیدروکربن ها را از یکدیگر جدا نمود. علی رغم وجود اختلاف نقطه جوش بین هیدروکربن ها، به علت وجود  $C_1$  و  $C_2$  و مشکل بودن تبدیل آنها به مایع (به دلیل فراریت زیاد یا اصطلاحاً سبک بودن آنها)، فرآیند جذب به منظور خارج کردن آنها از مخلوط هیدروکربنی پیشنهاد می شود.

در بیشتر فرآیند های جذب، مانند جذب گازهای اسیدی با محلول آبی آمین ها و فرآیند جذب آب با حلال TEG، مواد مورد نظر توسط حلال جذب می شوند ولی در فرآیند جذب هیدروکربن ها، از برش سنگین هیدروکربنی به عنوان حلال استفاده می شود تا پروپان و هیدروکربن های سنگین تر جذب شود و متان و اتان از بالای برج خارج شوند تا از آنها بتوان در مشعل کوره ها، توربین های گازی یا واحد های آمونیاک و متانول استفاده کرد.

همان طور که توضیح داده شد در فرآیند جذب گاز، به حلال خروجی از انتهای برج جذب که غنی از جزء حل شونده است، Rich Solvent می گویند که در این فرآیند به آن Rich Oil می گویند. حلال خروجی از انتهای برج احیاء حلال که برای استفاده مجدد به سمت برج برج جذب هدایت می شود Lean Solvent می گویند که در این فرآیند به آن Lean Oil می گویند. با توجه به اینکه فرآیند جذب در دمای پایین انجام می شود بنابراین Rich Oil که خروجی از برج جذب است دمای پایینی دارد و از طرفی نظر به اینکه فرآیند دفع در دمای بالا صورت می گیرد و خوراک برج دفع می باشد بنابر این برای ورود به برج دفع جهت احیا شدن باید گرم شود و در نتیجه Lean Oil یا حلال احیا شده که خروجی برج دفع است دمای بالای دارد و برای جذب باید خنک شود چون در این فرآیند حلال و جزء حل شونده هیدروکربن می باشند، مقداری از متان و اتان نیز در حلال جذب می شوند. به منظور جلوگیری از انحلال متان و اتان در حلال، مقداری از این گازها را در فشاری بیشتر از فشار برج در حلال حل می کنند تا حلال پس از ورود به برج، به جای جذب متان و اتان آنها را آزاد می کند که فرآیند آزاد شدن این گازها گرماگیر است و گرمای مورد نیاز از داخل برج تامین می شود که در نهایت باعث کاهش دمای برج می شود. یکی دیگر از مسایل این فرآیند، مقدار پروپان موجود در جریان گازی خروجی از

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

بالای برج است. با تغییر شرایط عملیاتی می توان مقدار پروپان در جریان گازی خروجی از بالای برج را کاهش داد. افزایش مقدار پروپان در جریان مذکور نشان دهنده پایین بودن بازده جداسازی است که خوب احیا نشدن حلال در برج احیا حلال یکی از مهم ترین عوامل می باشد. برای رفع این مشکل باید بار حرارتی ریویلر برج احیاء حلال را افزایش داد.

در این قسمت فرآیند جذب هیدروکربن ها شبیه سازی می شود. مقادیر دو ستون آخر داده های صنعتی هستند

| نام جریان                 | <i>Off Gas</i> | <i>Lean Oil</i> | <i>Feed Gas</i> | <i>Over head</i> | <i>Rich Oil</i> |
|---------------------------|----------------|-----------------|-----------------|------------------|-----------------|
| $CO_2$ (bmol/h)           | 0.01           | 0.07            | 1.74            |                  |                 |
| $H_2S$ (bmol/h)           | -              | -               | 0.04            |                  |                 |
| $C_1$ (bmol/h)            | 25.29          | 317.63          | 6880.12         |                  |                 |
| $C_2$ (bmol/h)            | 0.33           | 30.04           | 953.42          |                  |                 |
| $C_3$ (bmol/h)            | -              | 1.52            | 400.56          |                  |                 |
| <i>i</i> - $C_4$ (bmol/h) | -              | 0.48            | 54.82           |                  |                 |
| <i>n</i> - $C_4$ (bmol/h) | -              | 4.71            | 106.2           |                  |                 |
| <i>i</i> - $C_5$ (bmol/h) | -              | 14.82           | 24.84           |                  |                 |
| <i>n</i> - $C_5$ (bmol/h) | -              | 23.96           | 29.12           |                  |                 |
| $C_6$ (bmol/h)            | -              | 43.29           | 4.29            |                  |                 |
| $C_7$ (bmol/h)            | -              | 72.38           | 1.71            |                  |                 |
| $C_8$ (bmol/h)            | -              | 245.32          | 0.85            |                  |                 |
| $C_9$ (bmol/h)            | -              | 326.13          | -               |                  |                 |
| $C_{10}$ (bmol/h)         | -              | 55.59           | -               |                  |                 |
| <b>Total</b><br>(bmol/h)  | 25.63          | 1135.94         | 8457.79         | 7402.65          | 2216.71         |
| <b>Temperature</b><br>(F) | -5             | -5              | -5              | 20               | 11              |
| <b>Pressure</b><br>(Psia) | 585            | 585             | 535             |                  |                 |

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

الف: فرآیند مذکور را باتوجه به توضیحات بالا و اطلاعات جریان های ورودی شبیه سازی کنید

ب: با توجه به مقدار پروپان در جریان گازی خروجی از بالای برج، پیشنهاد فرآیندی را برای افزایش بازده فرآیند ارائه دهید.

1- بر اساس روشی که در قسمت های قبل آموختیم، نرم افزار را باز کرده و اطلاعات جدول بالا را در نرم افزار تعریف کنید

2- برای انتخاب مدل ترمودینامیکی، توجه داشته باشید در این فرایند دو فاز مایع و گاز وجود دارند و تمام مواد از یک

خانواده هستند (هیدروکربن). بنابراین می توان از هر دو روش کلی  $\Phi-\Phi$  یا  $\Phi-\Psi$  استفاده کرد

3- پس از انتخاب مواد و مدل ترمودینامیکی، با یکی از دو روش زیر وارد محیط شبیه سازی می شویم

4- واحدهای این مسئله در سیستم مهندسی هستند، بنابراین واحدها را تنظیم می کنیم.

توجه داشته باشیم جریان حلال قبل از ورود به برج باید با جریان گازی مخلوط شود. بنابراین باید دو جریان در محیط شبیه سازی ایجاد و مخلوط شوند. برای ایجاد جریان در محیط شبیه سازی می توان F4 را بزیم یا تا Palette باز شود یا در نوار ابزار کلید آن را می زیم بر روی فلش آبی رنگ کلیک کنیم تا انتخاب شود و با کلیک روی علامت صلیب سبز رنگ، جریان جرمی در محیط شبیه سازی اضافه شود یا پس از انتخاب جریان جرمی، کلید چپ موس را نگه داشته و موس را داخل محیط شبیه سازی می کشیم. (F11 جریان جرمی اضافه می کند).

5- دو جریان جرمی را در محیط شبیه سازی ایجاد کنید و مشخصات فرآیندی آنها را براساس داده های جدول وارد کنید.

نکته: دقت کنید در صورتی که علاوه بر دبی مولی، دبی جرمی جریان نیز داده شده باشد نباید هر دو را وارد کنیم زیرا در این صورت Solver غیر فعال خواهد شد و خطای نقض شدن یکی از اصول بقا را می دهد.

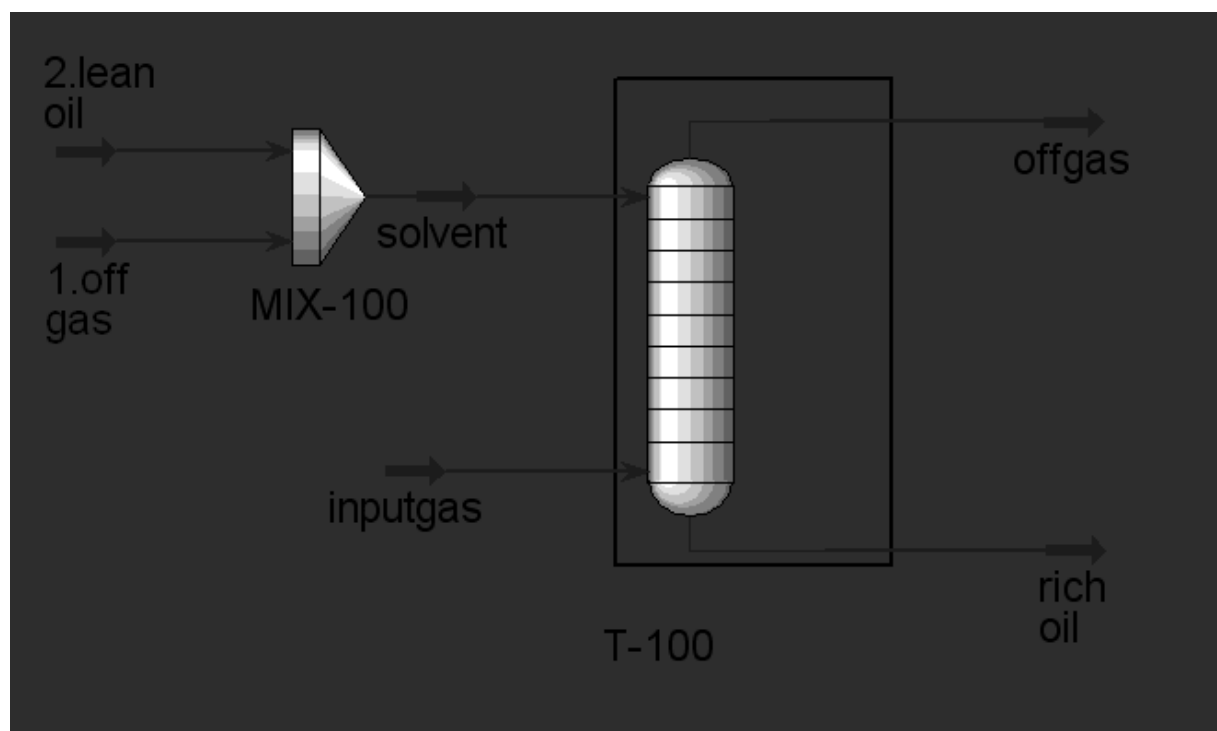
نکته: در این مثال دبی مولی مواد (به جای کسر مولی) داده شده است. بنابراین حتی احتیاجی به وارد کردن کل دبی مولی جریان نیز نمی باشد. زیرا جمع دبی مولی اجزاء همان مقدار دبی مولی کل می شود.

6- مقدار مواد در این دو جریان را وارد می کنیم.

7- برای مخلوط کردن این دو جریان باید Mixer را به محیط شبیه سازی اضافه کرد

از منوی PFD یا همان قسمت بالای محیط شبیه سازی، پس از قرار دادن در حالت Attach، 2، جریان را به عنوان جریان های ورودی به Mixer متصل می کنیم و یک جریان را نیز به عنوان جریان خروجی از Mixer رسم می کنیم.

شکل فرآیند به صورت زیر می باشد



شبیه سازی فرآیند تمام شده است . برج تجزیه و تحلیل فرآیند، دمای جریان های بالا و پایین برج را با مقادیر صنعتی مقایسه کنید. مقدار مواد در جریان های خروجی، در برگه Worksheet صفحه Composition ارائه شده است. ولی در این صفحه فقط جزء مولی مواد دیده می شود در صورتی که برای مقایسه مقادیر محاسبه شده با صنعتی، باید دبی مولی هر ماده را دید.

جهت بررسی و تحلیل و ارزیابی دقت شبیه سازی، با مقایسه داده های بدست آمده و مقادیر صنعتی، امکان پذیر می شود.

دمای گاز و حلال خروجی باید به خوبی و نزدیک مقادیر صنعتی پیش بینی شده باشد. همچنین دبی مولی اجزا

به این منظور با زدن Ctrl + W می توان Workbook را باز کرد و دبی مولی را نشان داد

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)



### - برج تقطیر Distillation tower

بطور کلی فرایندهای هر واحد را می توان به دو قسمت فرایندهای فیزیکی و شیمیایی تقسیم نمود. البته در بعضی از حالات، مرز مشخصی بین فرایندهای فیزیکی و شیمیایی وجود ندارد. به عنوان مثال در فرایند شیرین کردن گاز، حلال DEA گازهای  $H_2S$  و  $CO_2$  را از گازهای هیدروکربنی جدا می کند. این فرایند در ظاهر فیزیکی به نظر می رسد ولی در حقیقت فرایندی فیزیکی- شیمیایی است. زیرا حلال DEA ( $C_4H_{11}O_2N$ ) به علت داشتن جفت الکترون غیر پیوندی روی N، بصورت باز عمل می کند و قابلیت واکنش با اسید و تولید نمک را دارد. مشابه این فرایند در برج جذب واحد اسیدنیتریک پتروشیمی شیراز انجام می گیرد. آب DM از بالای برج و مخلوط اکسیدهای نیتروژن از پایین وارد برج می شوند، روی هر سینی واکنش ناهمگن بین آب و  $N_2O_4$  صورت می گیرد و اسید نیتریک تولید می شود. بین سینی ها نیز واکنش تعادلی بین اکسیدهای نیتروژن و تولید  $N_2O_4$  انجام می گیرد. بنابراین فاصله بین سینی ها، راکتور همگن می باشد به همین دلیل فاصله سینی ها در این برج متفاوت می باشد. اما در بسیاری از واحدها می توان فرایندهای فیزیکی و شیمیایی را از یکدیگرتفکیک نمود.

فرایندهای جداسازی جزء مهم ترین فرایندهای فیزیکی می باشند. بطور کلی فرایندهای جداسازی را می توانم به دو دسته ی مستقیم و غیر مستقیم تقسیم نمود.

فرایندهای جداسازی مستقیم، مانند تقطیر و تبخیر فرایندهایی هستند که جداسازی و خالص سازی به طور همزمان انجام می گیرند.

فرایندهای جداسازی غیر مستقیم، مانند فرایندهای استخراج و جذب فرایندهایی هستند که فقط جداسازی در آنها انجام می گیرد ولی خالص سازی صورت نمی گیرد.

در تمام روش های جداسازی، باید ماده یا پارامتری را به سیستم اضافه نمود (مانند حلال در فرایندهای جذب، استخراج و همچنین حرارت در فرایند تقطیر) تا عمل جداسازی انجام گیرد و همچنین وجود اختلاف در خاصیتی (مانند اختلاف طبیعت شیمیایی مواد در فرایندهای جذب، استخراج و اختلاف نقطه جوش در فرایند تقطیر) باعث جداسازی می شود.

همان طوری که اشاره شد، تقطیر فرایند جداسازی مستقیم است. بنابراین کاربرد زیادی در صنایع پتروشیمی و نفت دارد که پایه و اساس آن، اختلاف نقطه جوش می باشد. اگر نقطه جوش مواد، اختلاف کمی داشته باشند یا مواد با یکدیگر نقطه هم جوشی تشکیل دهند، که در این صورت جداسازی مواد با استفاده از فرایند تقطیر به دشواری و در برج هایی با سینی های زیاد صورت می گیرد.

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

برای محاسبات برج های تقطیر دو روش زیر وجود دارد

1) روش سینی به سینی (Tray by Tray)

2) روش میان بر (Short Cut)

در روش اول تمام سینی ها به عنوان سیستم در نظر گرفته می شوند و حول آنها موازنه های جرم و انرژی نوشته می شود که در نتیجه تابع توزیع دما، فشار و غلظت مواد در دو فاز مایع و بخار به دست می آید.

اما می توان با در نظر گرفتن برخی از فرضیات ساده شونده منطقی حجم محاسبات را کاهش داد. به عنوان مثال می توان فرض کرد که مواد سبک موجود در خوراک فقط در بالای برج و مواد سنگین فقط در پایین برج وجود دارند. این فرضیات پایه و اساس روش دوم (Short cut) می باشند. در این حالت قسمت اعظم یکی از مواد میانی خوراک در بالا و مقدار کمی از آن در پایین برج وجود دارد که به آن ماده سبک (Light Key) می گویند. این حالت برای یکی دیگر از مواد نیز وجود دارد با این تفاوت که قسمت اعظم آن در پایین و مقدار کمی از آن در بالای برج وجود دارد که به آن ماده سنگین (Heavy Key) می گویند. براساس روش Short Cut تمام مواد سبک تر از LK در بالای برج و تمام مواد سنگین تر از HK در پایین برج وجود دارند. این روش تقریبی است و از آن برای تخمین کمترین نسبت جریان برگشتی با روش (Underwood) و کمترین تعداد سینی ها در هنگام (Total Reflux) با روش Fenskey و تعداد سینی های مورد نیاز (با روش Gilliland) استفاده می شود. در بعضی از مراجع به روش میان بر، روش Fenskey-Underwood-Gilliland یا FUG نیز می گویند. نرم افزار Aspen HYSYS از این روش استفاده می کند. توضیحات بیشتر در مورد این روش را می توانید در کتاب انتقال جرم Treybal انتهای فصل 9 مطالعه کنید.

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره: 1)

برای قرار دادن برج تقطیر در محیط شبیه سازی می توان از Palette یا Unit Operation (F12) استفاده کرد. پس از قرار دادن آن در محیط شبیه سازی روی آن کلیک می کنیم تا صفحه اصلی آن باز شود و قسمت های مختلف آن را در قالب مثال های مختلف می آموزیم.

فرآیند جداسازی پروپان از هیدروکربن های سنگین تر در برج تقطیر انجام می شود که به آن، برج پروپان زدایی یا دی پروپانایزر ( $DeC_3$ ) گفته می شود. جریان بالای این برج، غنی از پروپان است و وجود هیدروکربن های سنگین باعث کاهش خلوص محصول می شود.  $C_4$  و هیدروکربن های سنگین تر از جریان پایین برج خارج می شود که خوراک برج بوتان زدایی (دی بوتانایزر  $DeC_4$ ) می گویند. همانطور که گفته شد، در این قسمت از واحد عملیاتی، پروپان و بوتان همراه گازهای هیدروکربنی خروجی از واحدهای خشک سازی گاز و جذب Lean Oil و به عنوان محصولات پتروشیمی به بازار عرضه می شود. بنابراین در برج اول هدف فرآیند، جداسازی و خالص سازی پروپان در برج دوم تهیه محصول بوتان می باشد. در صورت لزوم با تغییر شرایط فرآیندی، می توان خلوص پروپان در برج اول و بوتان در برج دوم را افزایش داد. با توجه به شرایط فرآیندی، باید به پدیده های Weeping و Flooding نیز توجه داشت

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

### مثال

جریان هایی با نام 103 و 104 با یکدیگر مخلوط می شوند و خوراک برج را تشکیل می دهند.

این برج 41 سینی دارد و سرد کننده آن از نوع کلی، فشار بالا 295 Psia ، فشار پایین برج 305 Psia و نسبت جریان برگشتی 2.32 می باشد. در این فرآیند براساس نیاز بازار، باید خلوص پروپان در جریان بالای برج 98.04% ، مجموع جزء مولی اتان، ایزو و نرمال بوتان در همان جریان مقدار 1.96% باشد. (سینی خوراک = سینی شماره 20 ) براساس مدارک واحد عملیاتی ، دبی مولی جریان بالای برج ( lbmol/ ) 1104.48 می باشد. مقدار نسبت جریان برگشتی و دبی مولی جریان بالای برج را به عنوان حدس های اولیه استفاده کنید و این فرآیند را شبیه سازی کنید و خلوص پروپان و مجموع جزء مولی اتان ، ایزو و نرمال بوتان را در جریان بالای برج با مقادیر مورد انتظار مقایسه کنید و در صورت اختلاف بین آنها، با تغییر شرایط فرآیندی (نسبت جریان برگشتی و دبی جریان بالای برج ) مقادیر مورد انتظار بازار را برای محصول بالای برج تامین کنید.

مشخصات جریان خوراک دی پروپانایزر

| جریان              | 103(bmol/h) | 104(bmol/h) |
|--------------------|-------------|-------------|
| $C_2H_6$           | 12.9        | 5.11        |
| $C_3H_8$           | 538.24      | 555.54      |
| $i - C_4$          | 54.84       | 113.58      |
| $n - C_4$          | 81.62       | 219.62      |
| $i - C_5$          | 9.43        | 52.13       |
| $n - C_5$          | 9.43        | 63.75       |
| $C_6$              | 1.28        | 15.07       |
| $C_7$              | 0.12        | 6.28        |
| $C_8$              | 0.02        | 3.2         |
| $Total_{(bmol/h)}$ | 707.89      | 1034.28     |
| $T_{(F)}$          | 182         | 125         |
| $P_{(Psia)}$       | 306         | 306         |

مشخصات برج دی پروپانایزر

| برج دی پروپانایزر      |      |
|------------------------|------|
| تعداد سینی             | 41   |
| سینی خوراک             | 20   |
| نسبت برگشتی            | 2.32 |
| فشار جریان بالا (kpa)  | 295  |
| فشار جریان پایین (kpa) | 305  |
| سردکننده               | کامل |
| جوش آور                | جزیی |

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

- نرم افزار را باز کرده و مواد را در پنجره SBM را انتخاب می کنیم.
  - همچنین از همان پنجره، مدل ترمودینامیکی PR را انتخاب می کنیم.
- در جریان های فرآیندی این قسمت از واحد عملیاتی فقط هیدروکربن ها وجود دارند. بنابراین با انتخاب معادله حالت PR به عنوان مدل ترمودینامیکی مساله را با روش  $\phi$ - $\phi$  حل می کنیم.
- حال می توان وارد محیط شبیه سازی شد.
  - ابتدا باید دو جریان جرمی خوراک (جریان های 103 و 104) را در محیط شبیه سازی ایجاد و مشخصات آنها را وارد می کنیم
  - مقدار مواد در این دو جریان بصورت دبی مولی است در صورتیکه پیش فرض این نرم افزار جزء مولی است برای بیان مقدار مواد بصورت دبی مولی، در برگه Worksheet صفحه Composition کلید Basis را بزنید.
  - این دو جریان در Mixer با یکدیگر مخلوط می شوند و خوراک برج پروپان زدایی را تامین می کنند. برای قرار دادن مخلوط کننده از Palette یا پنجره Unit Operation استفاده می کنیم.
  - از مخلوط شدن جریان های 103 و 104، جریان (C3- Feed) خوراک برج DeC3 بدست می آید
  - با توجه به واحد اعداد این مساله، سیستم Field یا همان مهندسی را در Tools/Preferences/Variable/Unit انتخاب کنید.
  - با استفاده از روش هایی که آموختیم، برج تقطیر را در محیط شبیه سازی قرار می دهیم و روی آن کلیک می کنیم تا صفحه مشخصات آن باز شود
- همان طوری که در شکل بالا دیده می شود، صفحه مشخصات برج تقطیر مانند صفحه مشخصات برج جذب است و تمام اطلاعات مورد نیاز را باید در صفحه 5 وارد کرد و تا زمانی که داده های هر صفحه کامل نشود، کلید Next آن صفحه نیز فعال نخواهد شد.

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره: 1)

در این نرم افزار 3 نوع سرد کننده برای برج تقطیر وجود دارد

**Total**: سرد کننده ای است که تمام بخار خروجی از بالای برج تقطیر و ورودی به سرد کننده را به مایع تبدیل می کند که قسمتی از مایع به عنوان جریان برگشتی به برج باز می گردد و مابقی مایع، محصول الای برج است.

**Partial**: سرد کننده ای است که قسمتی از بخار را به مایع تبدیل می کند و باقی مانده بخار به عنوان یکی از محصولات بالای برج، از فرآیند خارج می شود. قسمتی از مایع تشل شده به عنوان جریان برگشتی به برج باز می گردد و باقی مانده مایع نیز یکی دیگر از محصولات بالای برج را تشکیل می دهد. بنابراین محصول بالای برج دو جریان مایع و بخار است.

**Full Reflux**: سرد کننده جزئی (Partial) است که تمام مایع تشکیل شده به برج باز می گردد. به همین دلیل به این نوع سرد کننده Full Reflux می گویند و بخار باقی مانده نیز محصول بالای برج را تشکیل می دهد. برای سرد کننده های جزئی و کلی (Partial and Total) که تمام یا قسمتی از بخار به مایع تبدیل می شود و فاز مایع یکی از جریان های محصول را تشکیل می دهد، امکان تشکیل فاز آبی به همراه فاز آلی وجود دارد که در این فرآیندها باید قسمت Water Draw تیک زده شود و نرم افزار آن جریان را نیز نشان می دهد.

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

- در اولین صفحه مشخصات برج (page 1 of 5)، باید علاوه بر نوع سرد کننده، تعداد سینی ها را نیز وارد کنیم. دقت کنید در نرم افزار AspenHYSYS سرد کننده و جوش آور را نباید جزء سینی ها لحاظ کرد. در این نرم افزار می توان شمارش سینی ها را از بالا به پایین یا از پایین به بالا تعریف کرد. پس از متصل نمودن جریان های گرمی و انرژی مورد نیاز، کلید Next فعال می شود

**Distillation Column Input Expert**

Condenser Energy Stream: G8-601

Column Name: DeC3

Condenser: ☒ Total ☐ Partial ☐ Full Refl

Overhead Liquid Outlet: TopProduct

☐ Water Draw

**Inlet Streams**

| Stream       | Inlet Stage | Ma |
|--------------|-------------|----|
| DeC3 Feed    | 20          | Ma |
| << Stream >> |             |    |

# Stages: n = 41

Reboiler Energy Stream: G8-602

Bottoms Liquid Outlet: Bottom

Stage Numbering: ☒ Top Down ☐ Bottom Up

**Optional Side Draws**

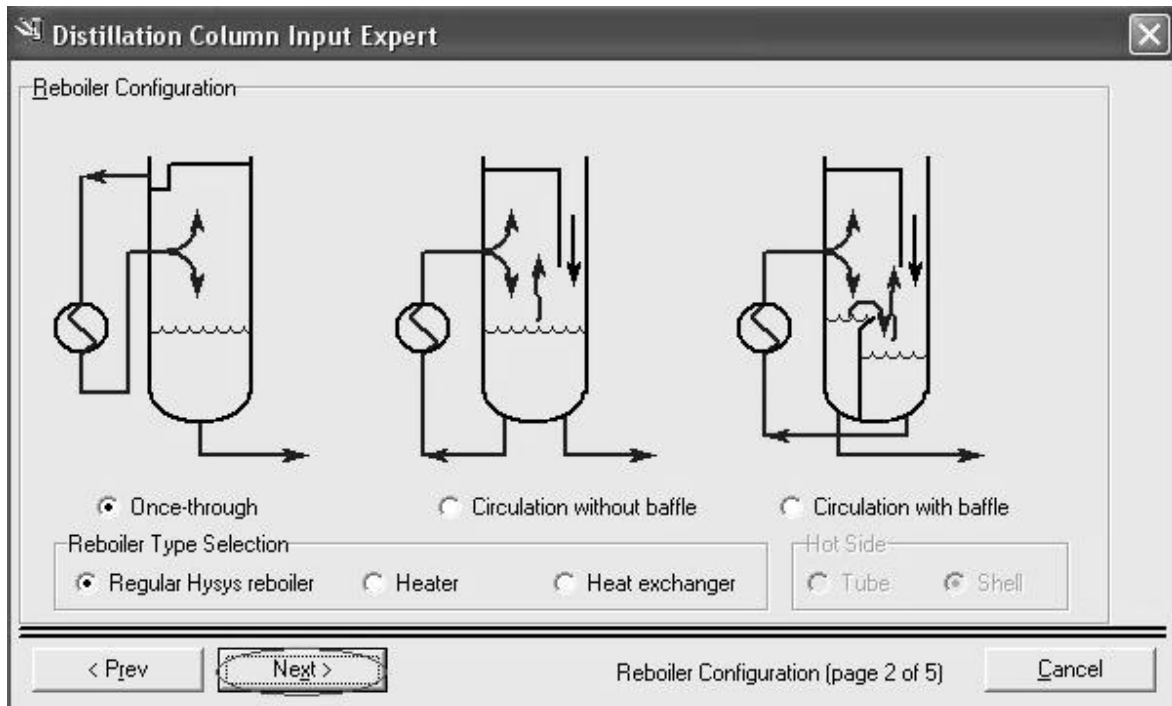
| Stream       | Type | Draw Stage |
|--------------|------|------------|
| << Stream >> |      |            |

< Prev Next >

Connections (page 1 of 5) Cancel

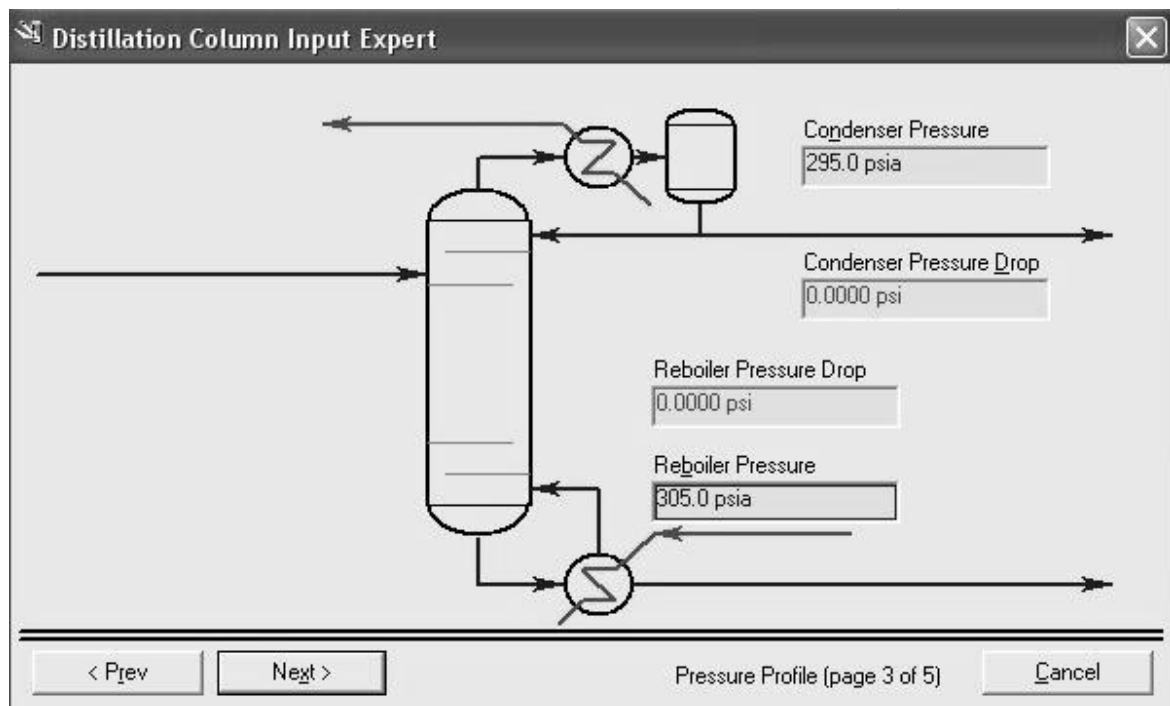
## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره: 1)

- پس از کلیک آن، وارد صفحه بعد (page 2 of 5) می شویم که مربوط به مدل و ترکیب و نوع ریبویلر است . در این صفحه در صورت عدم اهمیت مدل خاصی از ریبویلر می توان پیش فرض نرم افزار را پذیرفت و کلید Next را زد تا وارد مرحله بعد شود



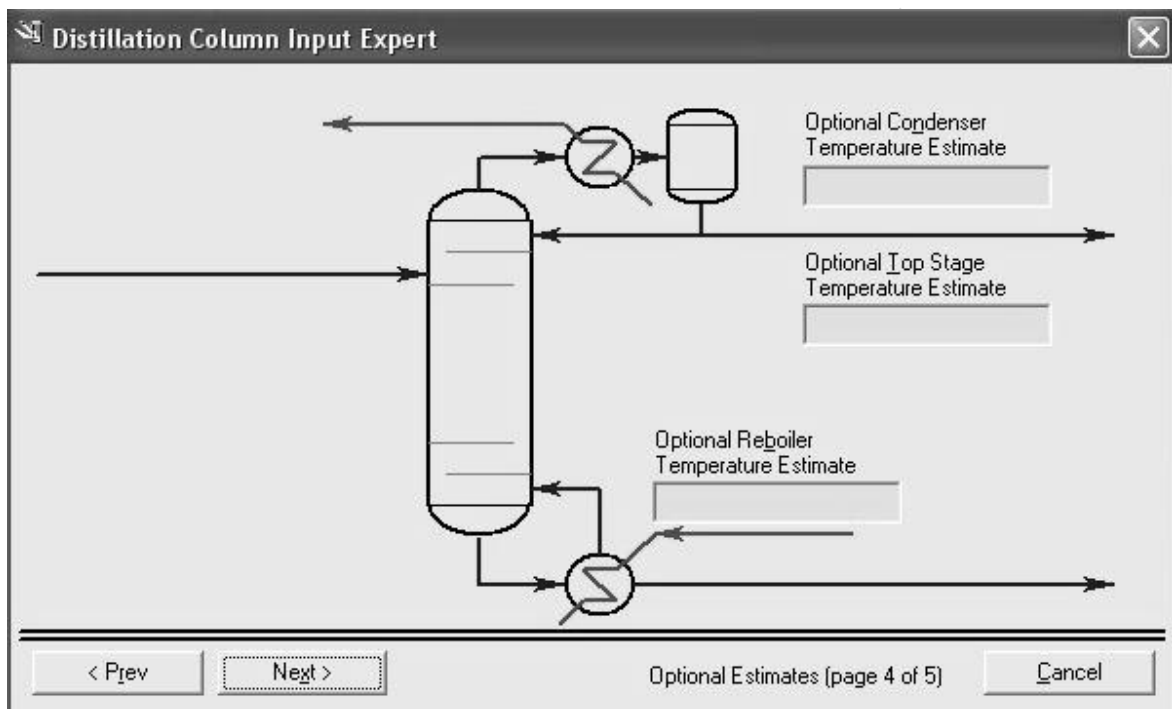
## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

- پس از کلیک آن، وارد صفحه بعد (page 3 of 5) می شویم. در این صفحه باید فشار های بالا و پایین برج و افت فشار کندانسور را وارد کرد. فشار بالا ، 295 psia و فشار پایین برج 305 psia و افت فشار سرد کننده 0 psi می باشد. تا قبل از وارد کردن این داده ها، کلید Next فعال نیست و پس از وارد کردن این داده ها، فعال می شود. این امر نشان دهنده لازم و ضروری بودن داده های آن صفحه است و نرم افزار بدون آن داده ها توانایی شبیه سازی برج یا هر دستگاه دیگر را ندارد.



## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

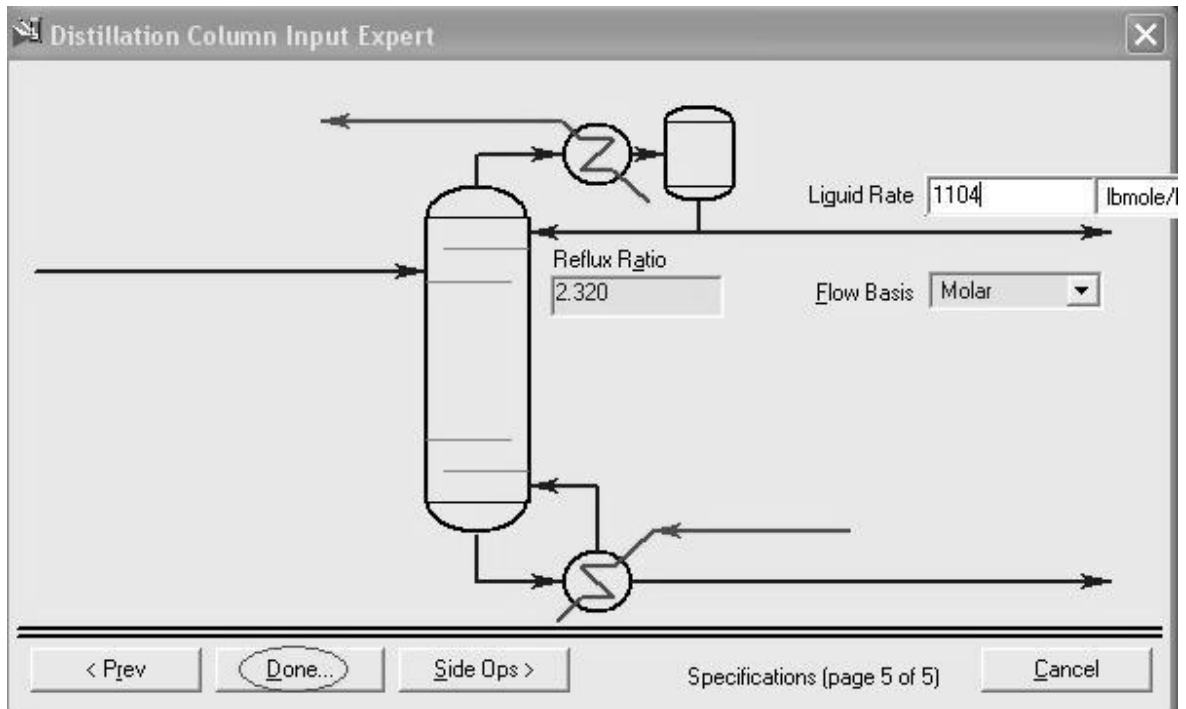
- کلید Next را بزنید. پس از کلیک آن، وارد صفحه بعد (page 4 of 5) می شویم. در این صفحه باید تخمین دماهای سرد کننده، اولین سینی و جوش آور را وارد کرد. در این صفحه کلید Next فعال است که نشان دهنده اختیاری بودن این داده ها برای نرم افزار است و بدون آنها نیز برج شبیه سازی می شود. نرم افزار این مورد را با کلمه Optional برای هر سه دما نشان می دهد. توصیه می شود در این صفحه داده ای وارد نشود تا نرم افزار دما ها را محاسبه کند



## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

- پس از کلیک آن، وارد صفحه بعد (page 5 of 5) می شویم. در این صفحه باید نسبت جریان برگشتی و دبی مولی جریان بالای برج را وارد کنیم. به عبارت دیگر برای محاسبات سینی به سینی باید با توجه به معادلات حاکم بر مساله (موازنه های انرژی و جرم کل برج، موازنه های انرژی و جرم روی هر سینی) و مجهولات مساله (توابع توزیع فشار، دما، دبی کامل مایع و بخار، دبی تمام مواد در فاز های مایع و بخار، بار های حرارتی سرد کننده و جوش آور، مقدار مواد در جریان های خروجی از بالا و پایین برج و غیره) امکان حل مساله برای نرم افزار یا حتی به صورت دستی نیز وجود ندارد. زیرا تعداد مجهولات از معادلات بیشتر است. می دانیم به تفاضل تعداد مجهولات و معادلات درجه آزادی (Degree of Freedom) می گویند. یک مساله زمانی قابل حل است که درجه آزادی صفر باشد. همان طوری که در قسمت برج جذب دیدیم برای برج های جذب بدون جوش آور و جریان برگشتی، درجه آزادی صفر است و مساله به سادگی حل می شود و تمام مشخصات جریان های خروجی را نرم افزار تعیین می کند. ولی در برج های تقطیر درجه آزادی 2 است. به عبارت دیگر برای حل و شبیه سازی این فرآیند باید مقدار عددی دو مجهول از مجموع مجهولات فرآیند برای AspenHYSYS تعریف گردد که به آنها Spec می گویند. بنابراین در این صفحه باید مقدار عددی 2 تا از Spec را وارد کرد. نرم افزار نسبت جریان برگشتی و دبی مولی جریان بالای برج را به طور پیش فرض به عنوان Spec در نظر می گیرد. اما در برگه Design صفحه Spec لیستی از آنها را در اختیار کاربر قرار داده است که کاربر می تواند 2 تا Spec را از بین آنها انتخاب کند در ادامه این مثال روش تعریف و فعال کردن Spec ها را می آموزیم. با توجه به داده های صورت مثال، نسبت جریان برگشتی را 2.32 برابر مولی و دبی مولی جریان بالای برج را 1104.48 lbmol/h وارد کنید و کلید Done را بزنید.

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)



همانطوری که دیده می شود، این صفحه آخرین مرحله تعریف و وارد کردن داده های برج است. با زدن کلید Done ، صفحه نهایی برج باز می شود که تمام داده های ورودی در آن دیده می شود. در نوار قرمز پایین صفحه Unconverged دیده می شود که برای Converge و همگرا شدن برج، کلید Run را می زنیم.

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)

Column: DeC3 / COL1 Fluid Pkg: Basis-1 / Peng-Robinson

**Design**

Column Name: DeC3 Sub-Flowsheet Tag: COL1

Condenser: ☒ Total ☐ Partial ☐ Full Reflux

Condenser Energy Stream: G8-601

Delta P: 0.0000 psi

Dryhd Liquid Outlet: TopProduct

Inlet Streams:

| Stream       | Inlet Stage |
|--------------|-------------|
| DeC3 Feed    | 20_Ma       |
| << Stream >> |             |

Stage Numbering: ☒ Top Down ☐ Bottom Up

Edit Trays...

Optional Side Draws:

| Stream       | Type | Draw Stage |
|--------------|------|------------|
| << Stream >> |      |            |

Reboiler Energy Stream: G8-602

Bottoms Liquid Outlet: Bottom

Delta P: 0.0000 psi

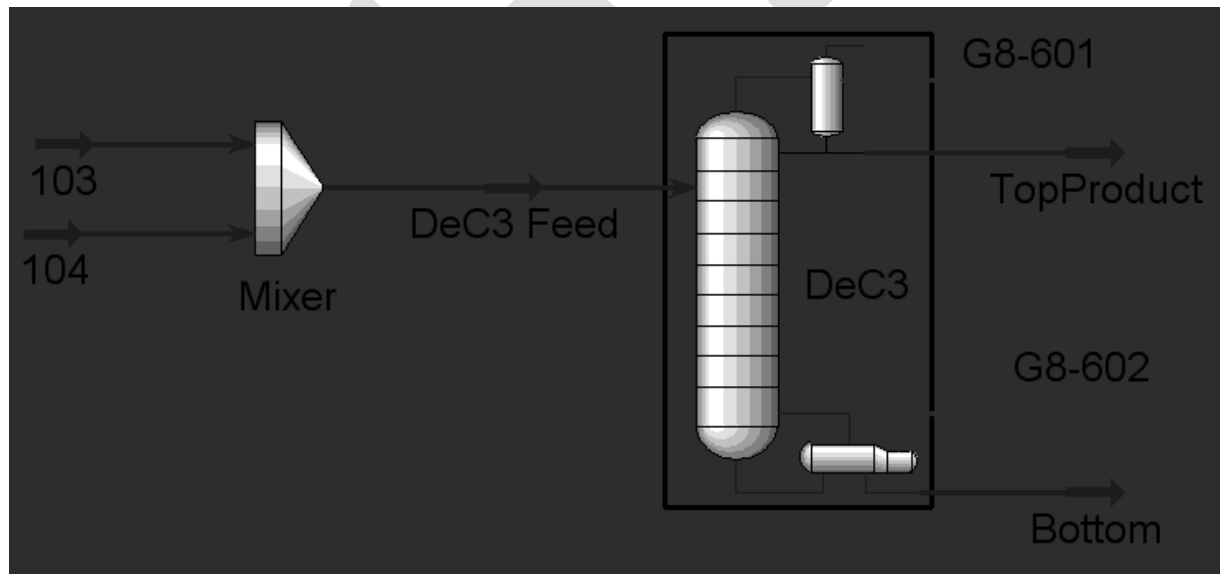
Num of Stages: n = 41

P cond: 295.0 psia

P reb: 305.0 psia

Design Parameters: Parameters Side Ops Rating Worksheet Performance Flowsheet Reactions Dynamics

Buttons: Delete Column Environment... Run Reset Converged Update Outlets Ignored

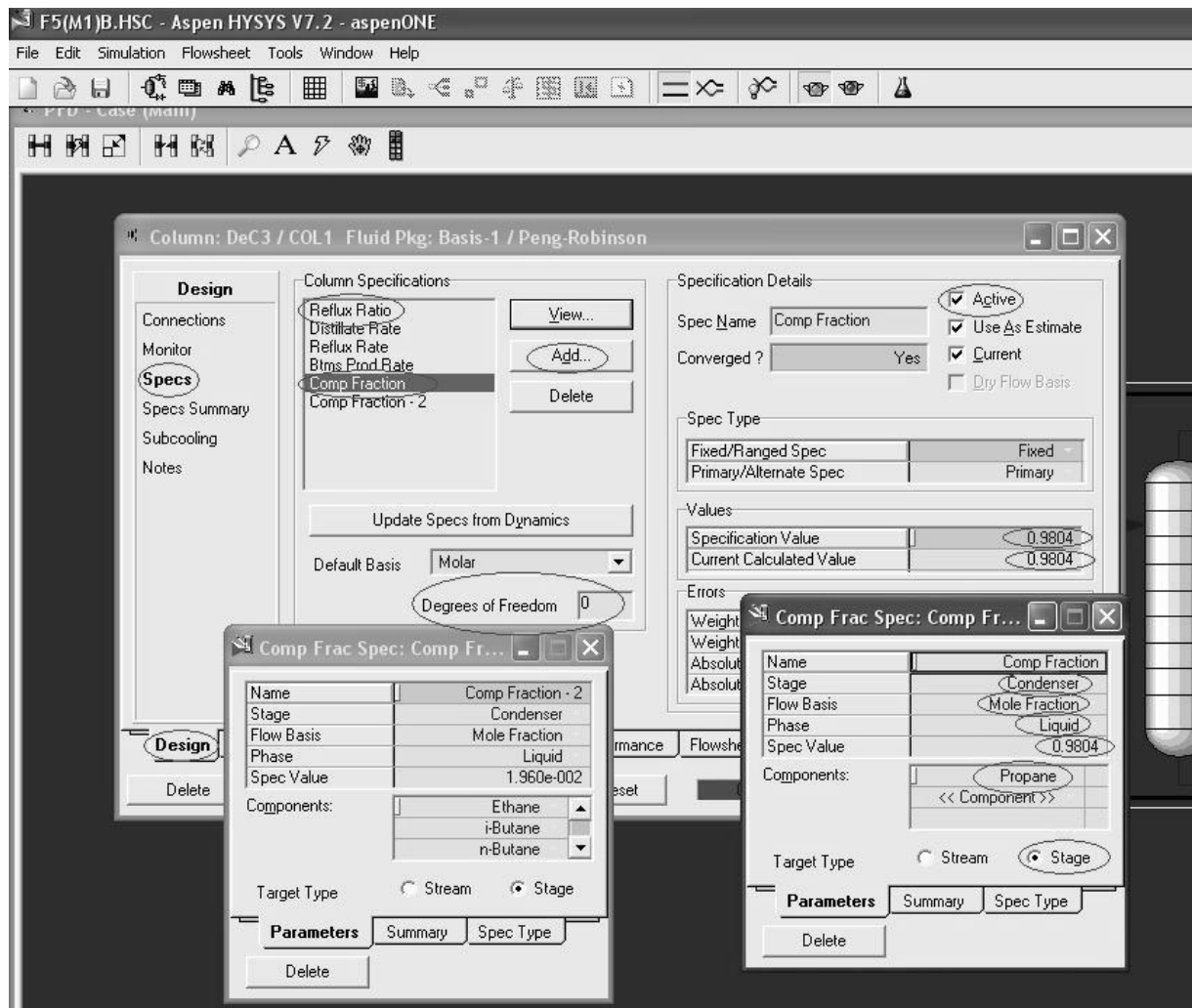


## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره: 1)

برای بررسی دقت شبیه سازی، با یکی از روش هایی که در فصل های قبلی آموختیم، (زدن برگه WorkSheet) جزء مولی مواد در جریان های بالا و پایین برج را می بینیم. نرم افزار دماهای بالا و پایین برج را به ترتیب (F) 124 و 253 محاسبه کرده است که اسناد و اطلاعات واحد عملیاتی (PFD) آنها را به ترتیب (F) 124 و 252 نشان می دهد. بنابراین شبیه سازی برج مذکور دقت مناسب و خوبی دارد. جزء مولی پروپان و بقیه مواد در جریان بالای برج نیز با مقادیر مورد نظر بازار، تقریباً مطابقت دارند. اما در این مثال به منظور آموختن روش تغییر Spec های برج، باید با تغییر دبی مولی بالای برج و نسبت جریان برگشتی، به مقادیر مورد نظر رسید.

به این منظور (تغییر Spec) روی برج کلیک کنید تا صفحه مشخصات آن باز شود. در برگه Design صفحه Specs را باز کنید. در گروه Column Specification تعداد محدودی از Spec ها را می توان دید که فقط 2 تا Spec فعال هستند. (در سمت راست این صفحه، قسمت Active تیک خورده است.) برای دیدن جزئیات هر کدام از Spec ها کلید View و برای پاک کردن آنها کلید Delete را بزنید. در زیر این گروه درجه آزادی مساله دیده می شود. زمانی می توان مساله را حل کرد که مقدار آن صفر باشد. مقدار عددی Spec که کاربر وارد کرده و مقدار محاسبه شده آن در سمت راست، گروه Values دیده می شود.

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 1)



- جهت اضافه کردن Spec کلید Add را بزنید تا لیستی از Spec ها دیده شود که باید از بین آنها Spec های مورد نظر را انتخاب کرد.

به عنوان مثال، در این فرآیند می خواهیم جزء مولی پروپان در جریان بالای برج 98.04% باشد. بنابراین ColumnComponentFraction را انتخاب کرده و کلید Add Spec (s).. را می زنیم تا صفحه جزئیات این Spec باز شود. در این صفحه اطلاعات مورد نظر (نام ماده، مقدار عددی و نام جریان) را وارد می کنیم

در قسمت Stage باید مرحله (سینی) مورد نظر را وارد کنیم

در قسمت Flow Basis باید روش را بیان مقدار آن ماده را وارد کنیم

در این مثال جزء مولی را وارد می کنیم

## جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره: 1)

با توجه به Total بودن سرد کننده ، فاز جریان مورد نظر را مایع انتخاب می کنیم

بنا بر این مقدار جزء مولی را 0.9804 و ماده را پروپان انتخاب می کنیم.

با بستن پنجره این Spec ، نرم افزار آن را در لیست Spec های این برج اضافه می کند اما فعال نمی کند. لذا باید کاربر با تیک زدن کلید رادیویی Active آن را فعال نماید. با این کار درجه آزادی سیستم 1- می شود. زیرا Spec های قبلی هنوز فعال هستند. برای صفر کردن درجه آزادی، در همین گروه Active ها، تیک Spec قبلی یا همان نسبت برگشتی را برداشته و کلید Run را می زنیم تا نرم افزار اجرا و محاسبات شبیه سازی برج همگرا شود

همین مراحل را برای مواد بعدی یعنی اتان و ایزو و نورمال بوتان به عنوان Spec دیگر تکرار می کنیم