دوره آموزشي ASPEN

ASPEN training courses

تهيه كننده : محمد بهزادي Mohammad Behzadi

وبلاگ آموزشي: www.mblastsavior.mihanblog.com
پست الكترونيكي: Lastsavior_b@yahoo.com

تقديم به برادرم سعيد رادپور كه با بخشش علمي بيدريغ خود استاد و قطب نماي علمي در مسير زندگيم بود

تذكر: براي ديدن راهنماي مطالب لازم است تا از آكروبات7 يا بالاتر استفاده شود

Acrobat 7.0 or higher is needed for view commenting!

www.DownloadSoftware.iR

آموزش نرم افزار *ASPEN PLUS*

محمد بهزادی-۱۳۸۶

www.DownloadSoftware.iR

Simulationشبيه سازي

- شبيه يا مدل سازي رياضي در واقع تبديل كيفيت هاي فيزيكي و رابطه متقابل اين كيفيت ها به كميتهاي عددي و روابط رياضي است و نتيجه آن پيش بيني رفتار يک سيستم پيش از اعمال واقعي تغييرات است(جلوگيري از مخارج و مخاطرات)
- اعمال معادلات موازنه جرم و انرژي به همراه شرايط تعادل فازها
- مدل هاي رياضي:
- تئوري
- نيمه تجربي
- تجربي

www.DownloadSoftware.iR

Simulatorsنرم افزارهاي شبيه ساز

- Aspen Plus
- Hysys
- Pro2
- Chemcad

- تفاوتها:
- وسعت اطلاعات كتابخانه ايLibrary
- وسعت معادلات ترموديناميكيProperties
- ضرايب باينريBinary Coeeficients

www.DownloadSoftware.iR

تاریخچه

- دانشجویانMIT در سال ۱۹۷۰
- تاسیس شرکت Aspen Techدر سال ۱۹۸۰
- آخرین ورژن ۱۳,۲
- ASPEN PLUS پایه سایر برنامه هاي ASPEN ENGINEERING SUITE

www.DownloadSoftware.iR

جدول (۱) : بسته های نرم افزاری موجود در Aspen Engineering Suit

بسته نرم افزاری	توضیحات
Aspen Plus	مدل سازی و شبیه سازی فرآیند ها در حالت پایا
Aspen Dynamics	شبیه سازی فرآیند ها در حالت دینامیک
Aspen Batch Plus	شبیه سازی فرآیند های ناپیوسته
Aspen Polymer Plus	شبیه سازی فرآیند های پلیمری
Aspen OLI	طراحی فرآیندهای پایه محیط های آبی الکترولیتی
Aspen Chromatograph	شبیه سازی دقیق فرآیندهای کروماتوگرافی در حالت دینامیک
Aspen Properties	انجام محاسبات و ارزیابی خواص فیزیکی
Aspen B-Jac	طراحی مبدل های حرارتی
Aspen Aerotran	طراحی حرارتی کولر های حرارتی
Aspen Hetran	طراحی حرارتی مبدل های پوسته و لوله
Aspen Teams	طراحی مکانیکی مبدل های پوسته لوله و مخازن تحت فشار
Aspen Pinch	بهینه سازی شبکه مبدل های حرارتی و انرژی مصرفی
Aspen Split	طراحی و تحلیل برج های تقطیر
Aspen ADSIM	مدل سازی فرآیندهای جذب در حالت دینامیک
Aspen Traflow	شبیه سازی دینامیکی خطوط لوله دو فازی نفت و گاز
Aspen Icarus	برآورد اقتصادی و ارزیابی اقتصادی طرح ها
Aspen BPE	ارزیابی فرآیند تجاری
Aspen PEP	مدل های پیش ساخته فرآیند های رایج
Aspen Utilities	نرم افزار مدل سازی
Aspen Custom Modeler	توسعه و ایجاد مدل های دلخواه
Aspen Zyqad	مهندسی فرآیند یکپارچه

www.DownloadSoftware.iR

Internet

Web site: www.hyprotech.com

Information and Sales: info@hyprotech.com

Technical Support: support@hyprotech.com

Online Support: support.aspentech.com

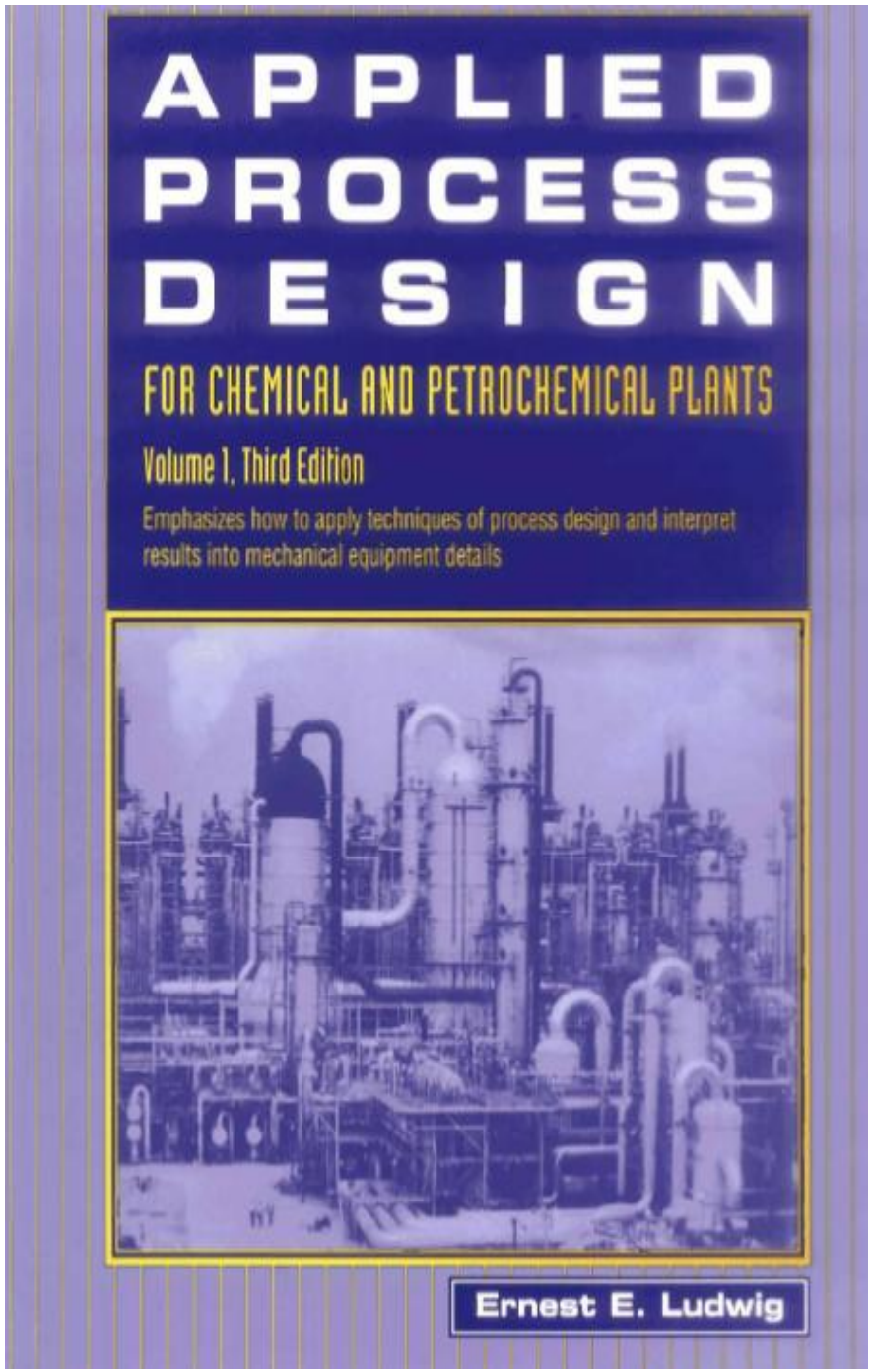
Training: training.registration@aspentech.com

Documentation: CGYDocumentation@hyprotech.com

www.DownloadSoftware.iR

منابع مطالعاتي

www.DownloadSoftware.iR



Volume 1:

1. Process Planning, Scheduling, Flowsheet Design
2. Fluid Flow
3. Pumping of Liquids
4. Mechanical Separations
5. Mixing of Liquids
6. Ejectors
7. Process Safety and Pressure-Relieving Devices

Appendix of Conversion Factors

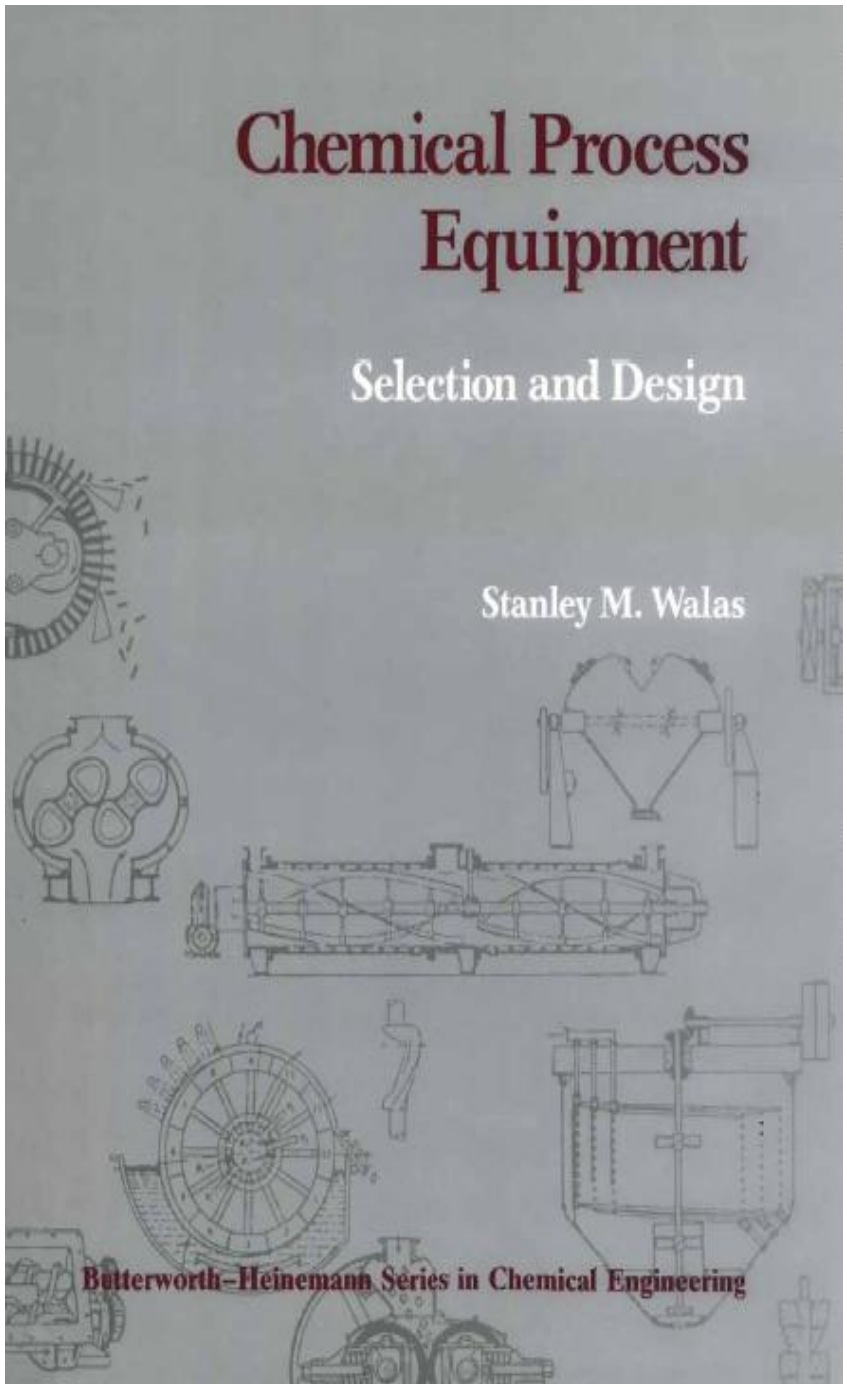
Volume 2:

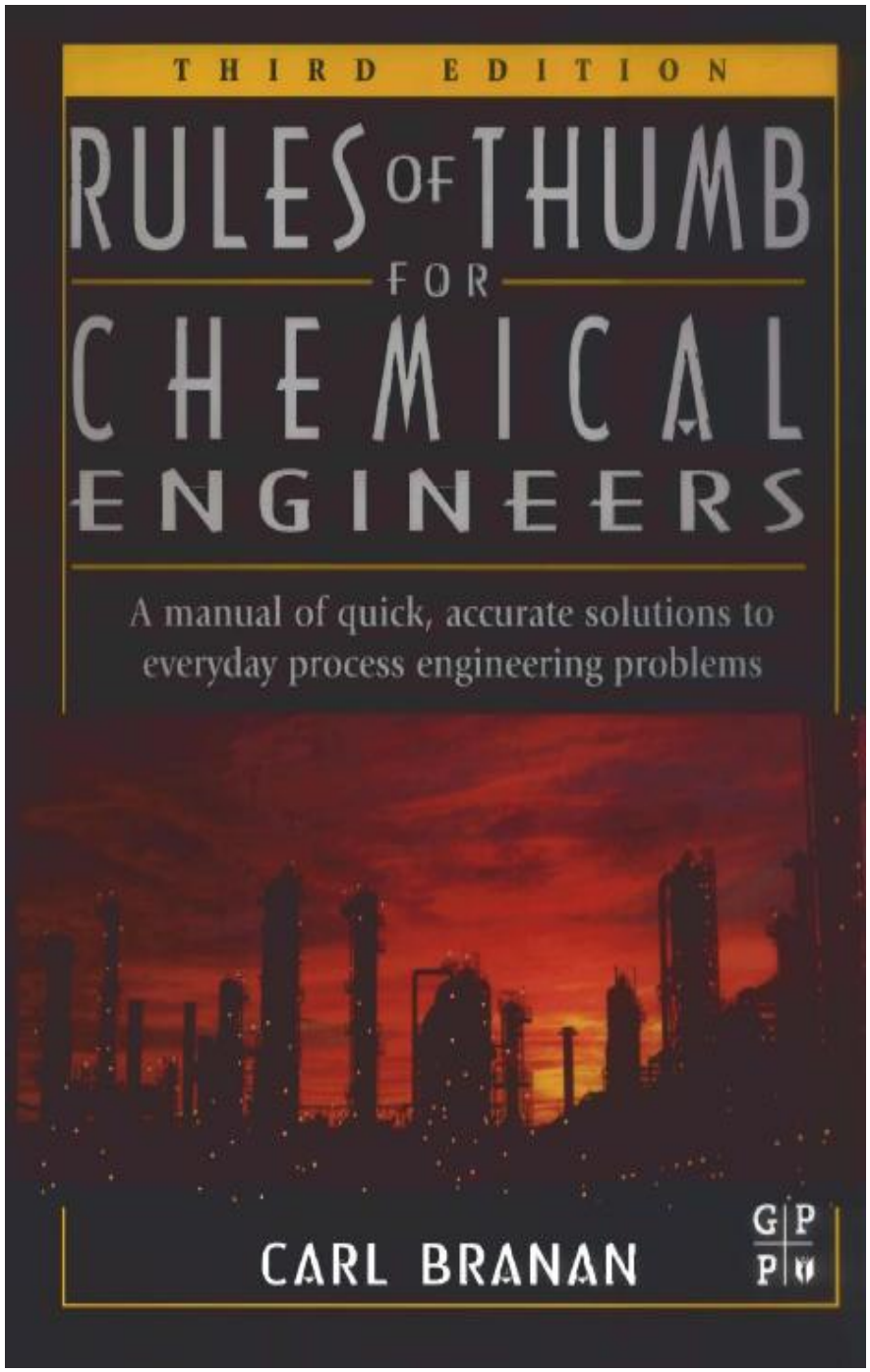
8. Distillation
9. Packed Towers

Volume 3:

10. Heat Transfer
11. Refrigeration Systems
12. Compression Equipment (Including Fans)
13. Reciprocating Compression Surge Drums
14. Mechanical Drivers

www.DownloadSoftware.iR





www.DownloadSoftware.iR

Design Criteria

www.DownloadSoftware.iR

Pressure Design Criteria

$$DP = OP*(1+A/100)+B$$

DT=design Pressure
OT=Operating Pressure

	Lower Limit (PSIA)	Upper Limit (PSIA)	Param. A	Param. B (PSIA)
Range 1	0.000	15.000	-100.000	15.000
Range 2	15.000	50.000	-100.000	50.000
Range 3	50.000	265.000	0.000	25.000
Range 4	265.000	1015.000	0.000	50.000
Range 5	1015.000		5.000	0.000

www.DownloadSoftware.iR

Temperature Design Criteria

$$DT = OT*(1+A/100)+B$$

DT=design temperature

OT=Operating temperature

	Lower Limit (DEG. F)	Upper Limit (DEG. F)	Param. A	Par (DE
Range 1	-459.670	32.000	0.000	-5
Range 2	32.000	70.000	-100.000	7(
Range 3	70.000	200.000	-100.000	25
Range 4	200.000	600.00	0.000	5(
Range 5	600.00	1000.00	0.000	5(

www.DownloadSoftware.iR

Components - Properties

www.DownloadSoftware.iR

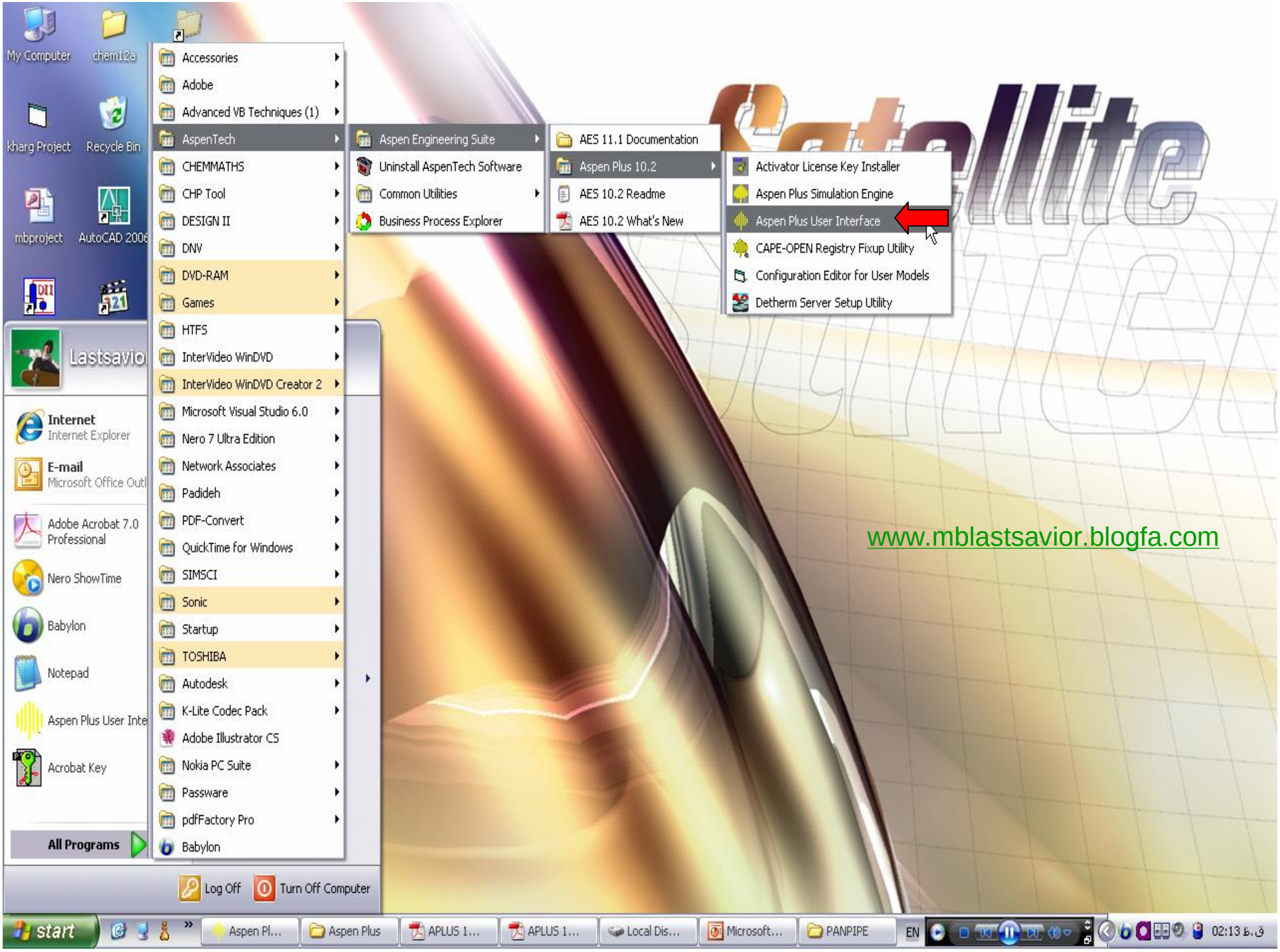
§ نحوه ورود به نرم افزار

§آشنایی با صفحه اصلی نرم افزار

روش انتخاب مواد

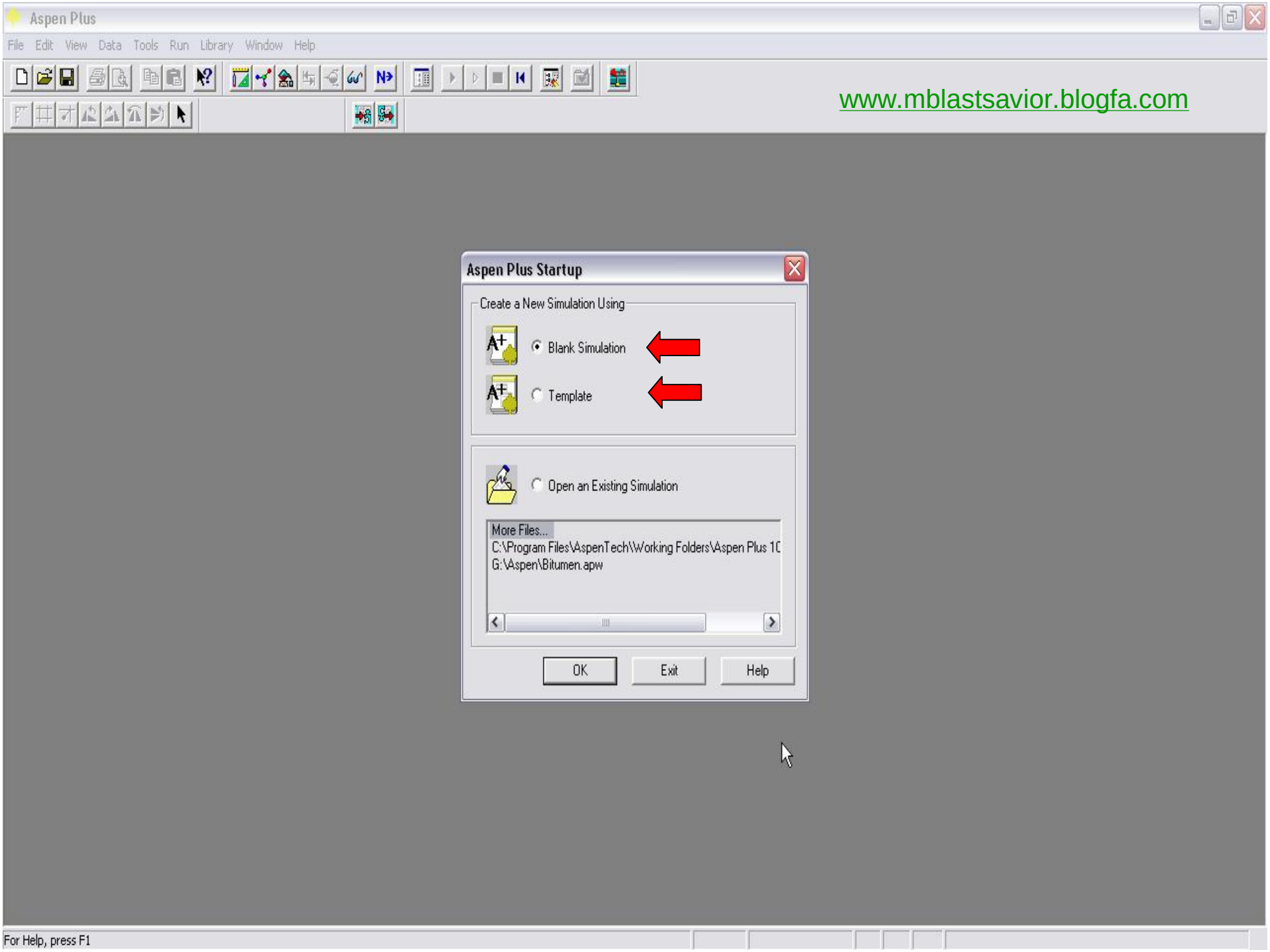
- ü بانکهای اطلاعاتی
- ü جستجو در بانکهای اطلاعاتی (عادی و پیشرفته)
- üتعریف ترکیبات جدید (عدم وجود در بانک اطلاعاتی)

www.DownloadSoftware.iR



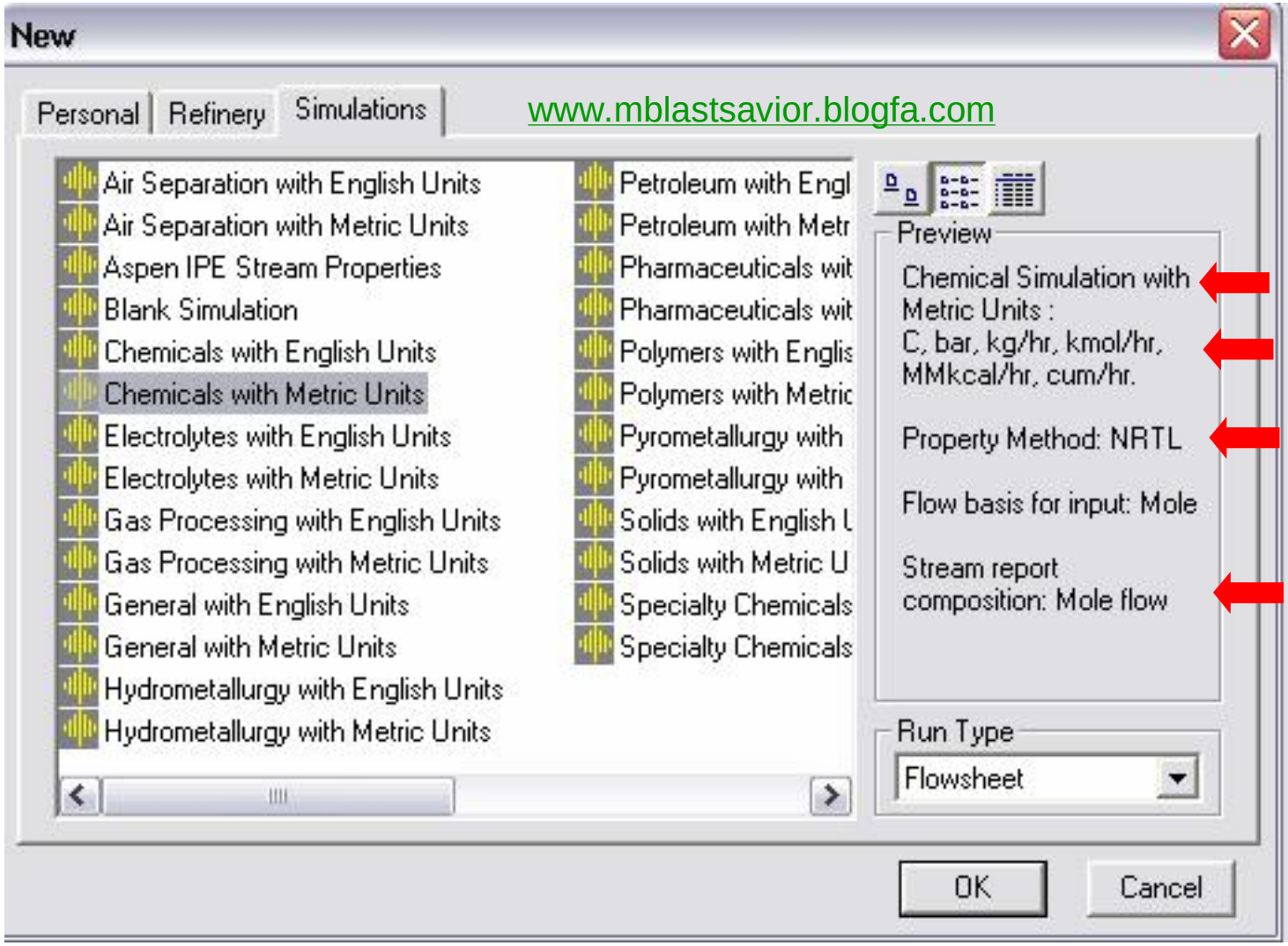
www.DownloadSoftware.iR

www.mblastsavior.blogfa.com



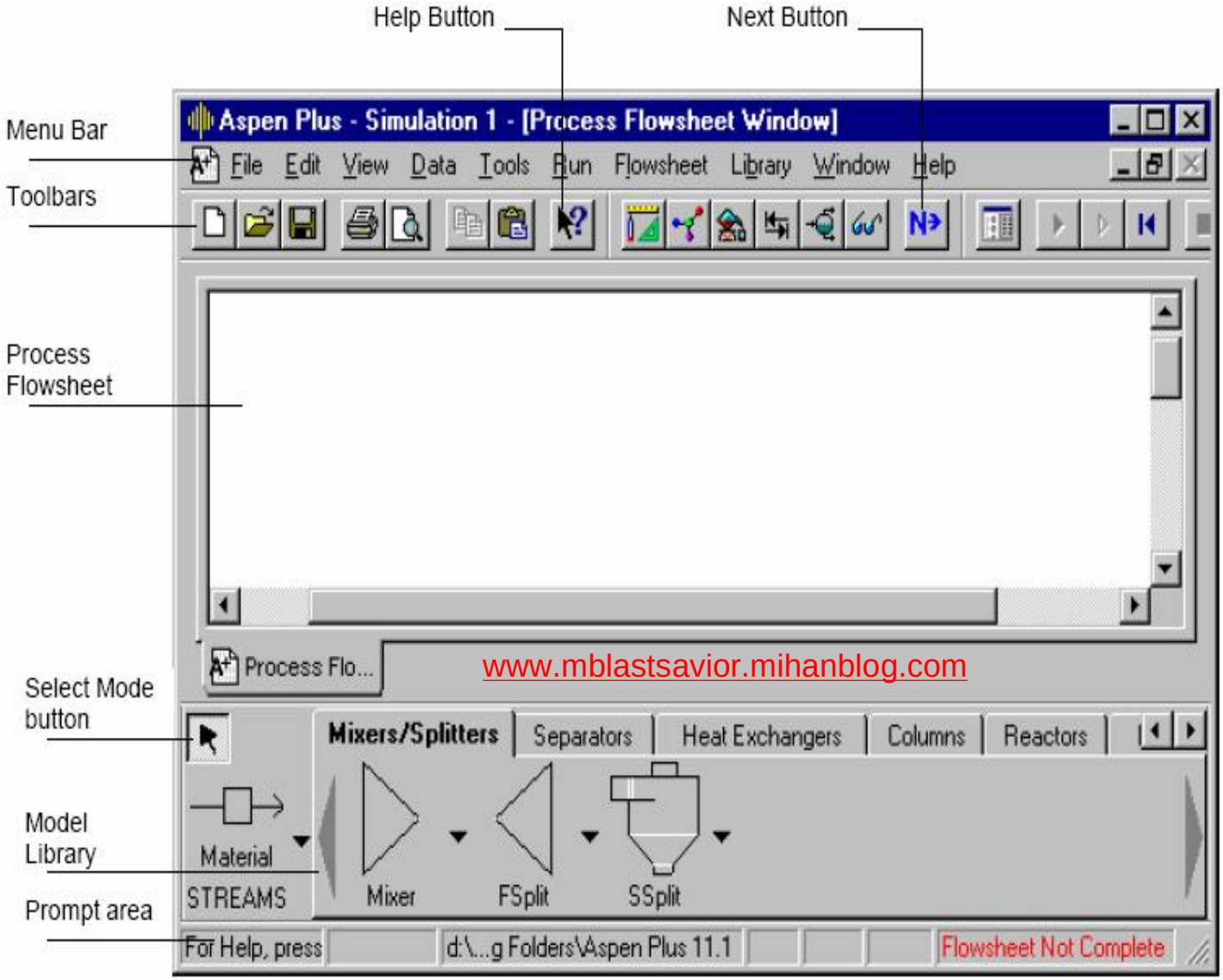
www.DownloadSoftware.iR

TEMPLATE

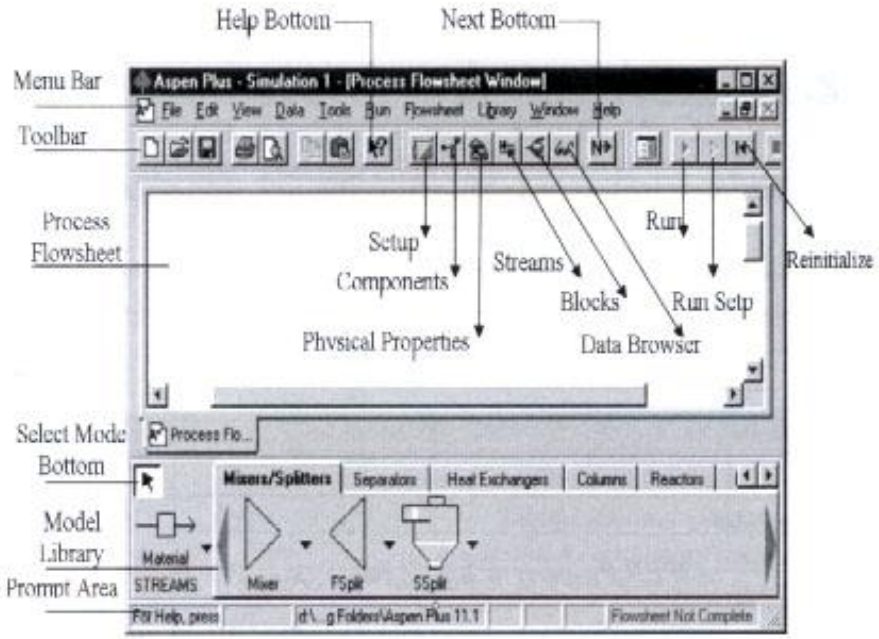


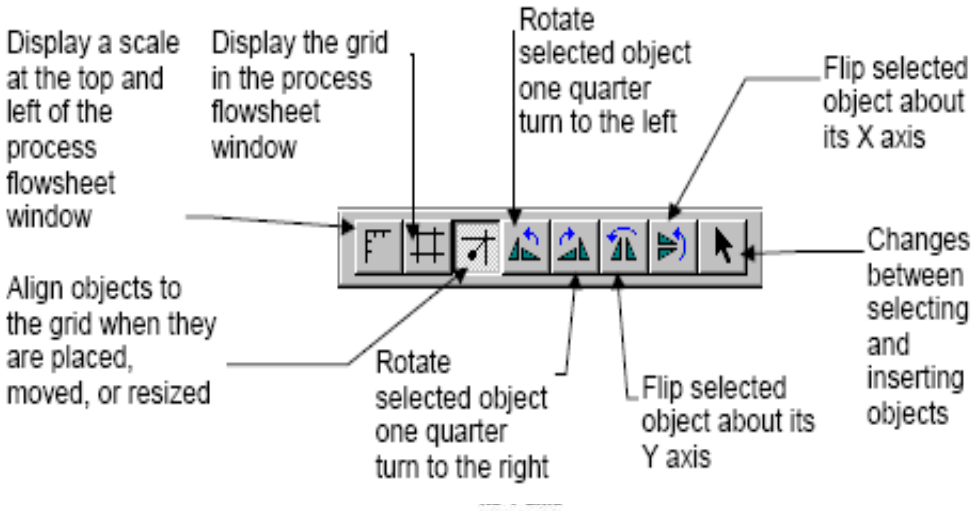
www.DownloadSoftware.iR

Expert Guidance - the Next Function

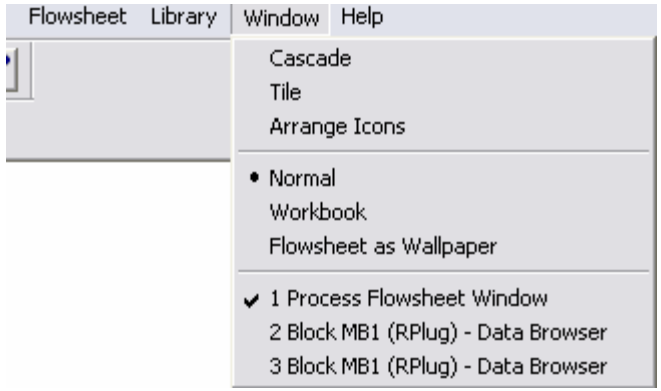


www.DownloadSoftware.iR

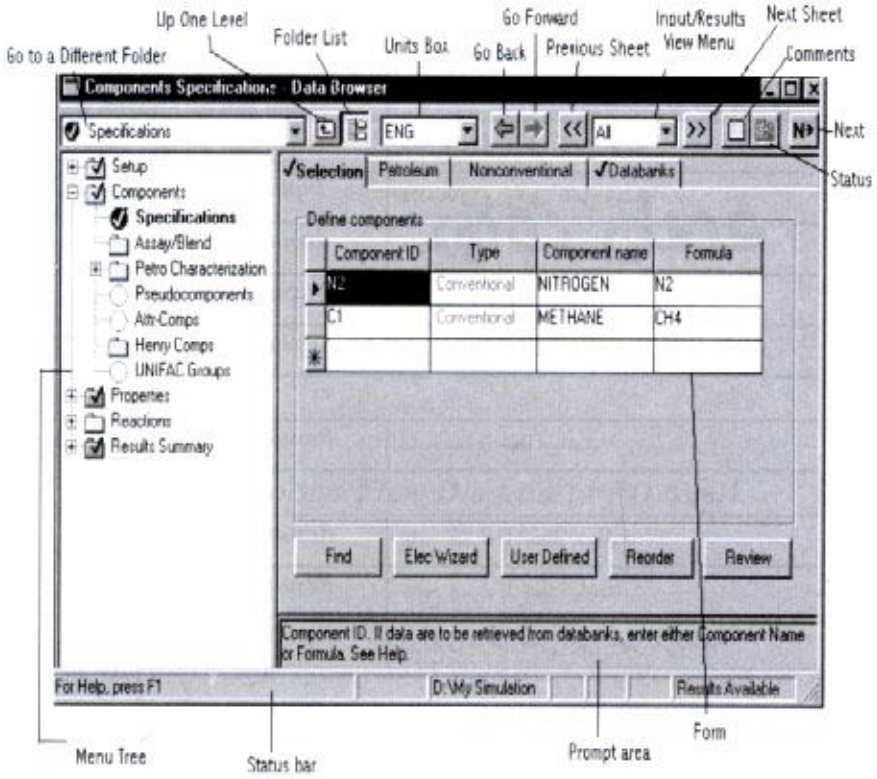


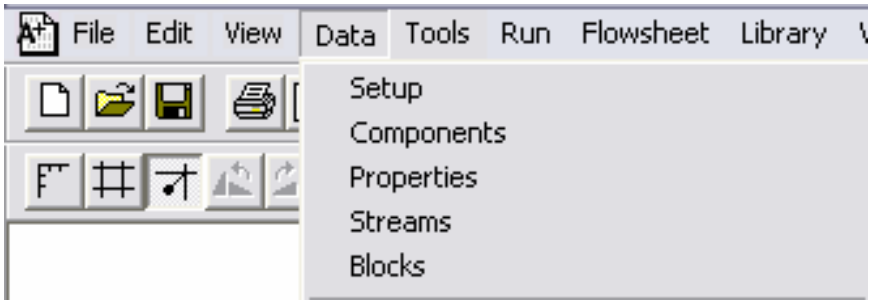


www.DownloadSoftware.iR



www.DownloadSoftware.iR





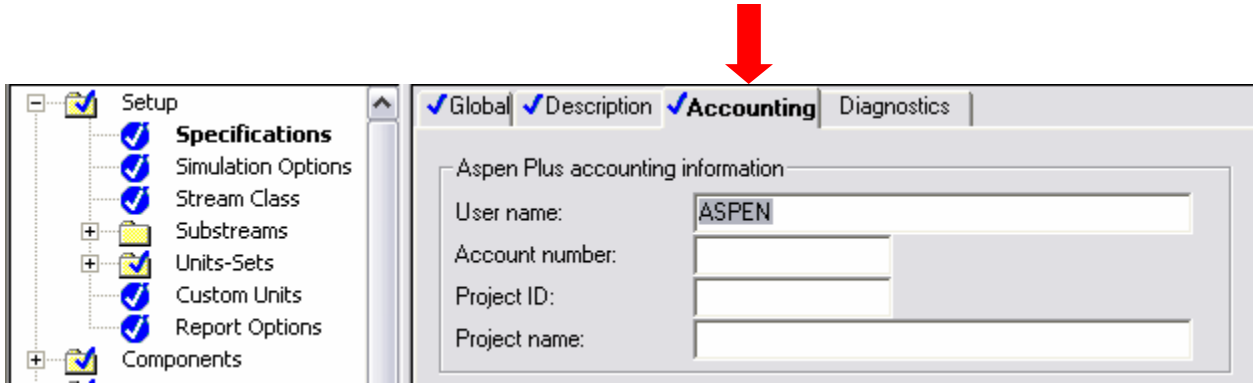
www.DownloadSoftware.iR

علامت	محل کاربرد	معنی
	Input Form	داده های ورودی کامل است
	Input Form	داده های ورودی کامل نیست
	Input Form	داده‌ای وارد نشده است
	Mixed Form	ورودی و نتایج
	Results Form	محاسبات اجرا نشده و خروجی وجود ندارد
	Results Form	نتایج بدون خطا میباشند
	Results Form	نتایج همراه با اخطار میباشند
	Results Form	نتایج همراه با خطا میباشند
	Results Form	ورودی ها در حین اجرا تغییر کرده‌اند
	Input Folder	داده ای وارد نشده اند
	Input Folder	داده های ورودی کافی نیستند
	Input Folder	داده های ورودی کافی هستند
	Results Folder	نتایج موجود نیست
	Results Folder	نتایج موجود است
	Results Folder	نتایج همراه با اخطار می باشند
	Results Folder	نتایج همراه با خطا می باشند
	Results Folder	ورودی ها در حین اجرا تغییر کرده‌اند
✓	کنار شاخه یا فرم	خطا یا اخطاری وجود ندارند
!	کنار شاخه یا فرم	نتایج یا ورودی ها با خطا یا اخطار همراه‌اند

www.DownloadSoftware.iR

This Symbol	On an	Means
	Input form	Required input complete
	Input form	Required input incomplete
	Input form	No data entered
	Mixed form	Input and Results
	Results form	No results present (calculations have not been run)
	Results form	Results available without Errors or Warnings (OK)
	Results form	Results available with Warnings
	Results form	Results available with Errors
	Results form	Results inconsistent with current input (input changed)
	Input folder	No data entered
	Input folder	Required input incomplete
	Input folder	Required input complete
	Results folder	No results present
	Results folder	Results available – OK
	Results folder	Results available with Warnings
	Results folder	Results available with Errors
	Results folder	Results inconsistent with current input (input changed)
✓	Beside folder or form	EO input or results OK
!	Beside folder or form	EO input or results with Errors

www.DownloadSoftware.iR



خطاي اجراي شبيه سازي

```
<< Loading Simulation Engine 16:29:47 Tue Jul 24, 2007>>


->Processing input specifications ...

  ****TERMINAL ERROR
      ACCOUNT-INFO PARAGRAPH MUST BE SUPPLIED
```

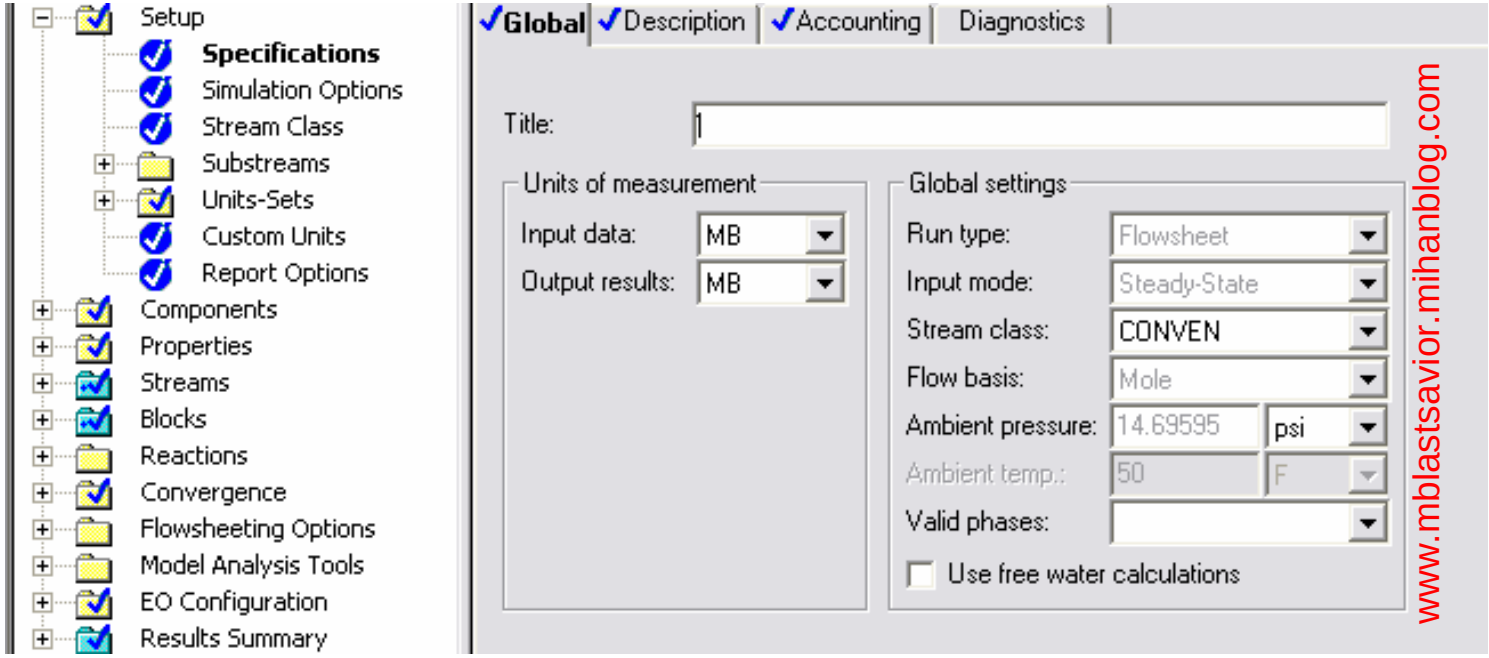
www.mblastsavior.blogfa.com

```
*************************************************************************
*   ERROR SEVERITY LEVEL OF   0 IS <= ABORT LEVEL OF   0                *
*   EXECUTION IS TERMINATED: SIMULATION WILL NOT BE EXECUTED            *
*************************************************************************



! Errors while processing input specifications
```


www.DownloadSoftware.iR



www.DownloadSoftware.iR

Title : در این قسمت عنوان پروژه وارد می شود.

Input Data/Output Data : در این قسمت نوع آحاد اندازه گیری ورودی ها و خروجی ها وارد می شود.

Run Type : انتخاب نوع محیط کار با Aspen Plus که عبارتند از:

- Flow Sheet : برای کار در محیط شبیه سازی
- Assay Data Analysis : برای کار در محیط نفتی
- Data Regression : از مهمترین کاربردهای آن محاسبه ضرایب interaction از روی اطلاعات ورودی مربوط به منحنی T-xy است.
- Properties Plus : با کمک آن می توان فایل خاصیت را تولید نمود و به نرم افزارهای دیگر لینک شد.
- Property Analysis : با کمک آن می توان منحنی های تعادلی را رسم کرد. همچنین می توان با کمک آن سازگاری معادله حالت انتخاب شده را با خواص فیزیکی محاسبه شده مقایسه نمود.
- Property Estimation : در تخمین خواص مجهول کاربرد دارد.

Input Model : محیط شبیه سازی را از نظر پایدار یا ناپایدار بودن مشخص می کند.

Stream Class : نوع شاخه جریان ها در محیط شبیه سازی از نظر نوع اطلاعات ورودی را مشخص می کند که عبارتند از :

www.DownloadSoftware.iR

Use this stream class	When
CONVEN	The simulation does not involve solids, or the only solids are electrolytes salts.
MIXCISLD	Conventional solids are present, but there is no particle size distribution.
MIXNC	Nonconventional solids are present, but there is no particle size distribution.
MIXCINC	Both conventional and nonconventional solids are present, but there is no particle size distribution.
MIXCIPSD	Conventional solids are present, with a particle size distribution.
MIXNCPSD	Nonconventional solids are present, with a particle size distribution.

All unit operation models (except Extract) can handle stream classes with solid substreams:

www.DownloadSoftware.iR

UNIT-SET

Standard	List and select an existing units set as a base for a new units set; search for all the dimensional quantities alphabetically; specify flow, temperature, and pressure-related units
Heat	Specify enthalpy, heat, heat capacity, and entropy-related units
Transport	Specify volume, density, transport-related and miscellaneous thermo units
Concentration	Specify energy/power, time, concentration, and composition-related units
Size	Specify size, equipment sizing, cost, and column sizing-related units
Miscellaneous	Specify miscellaneous units

Tip: To see all of the units types arranged alphabetically click the Search button.

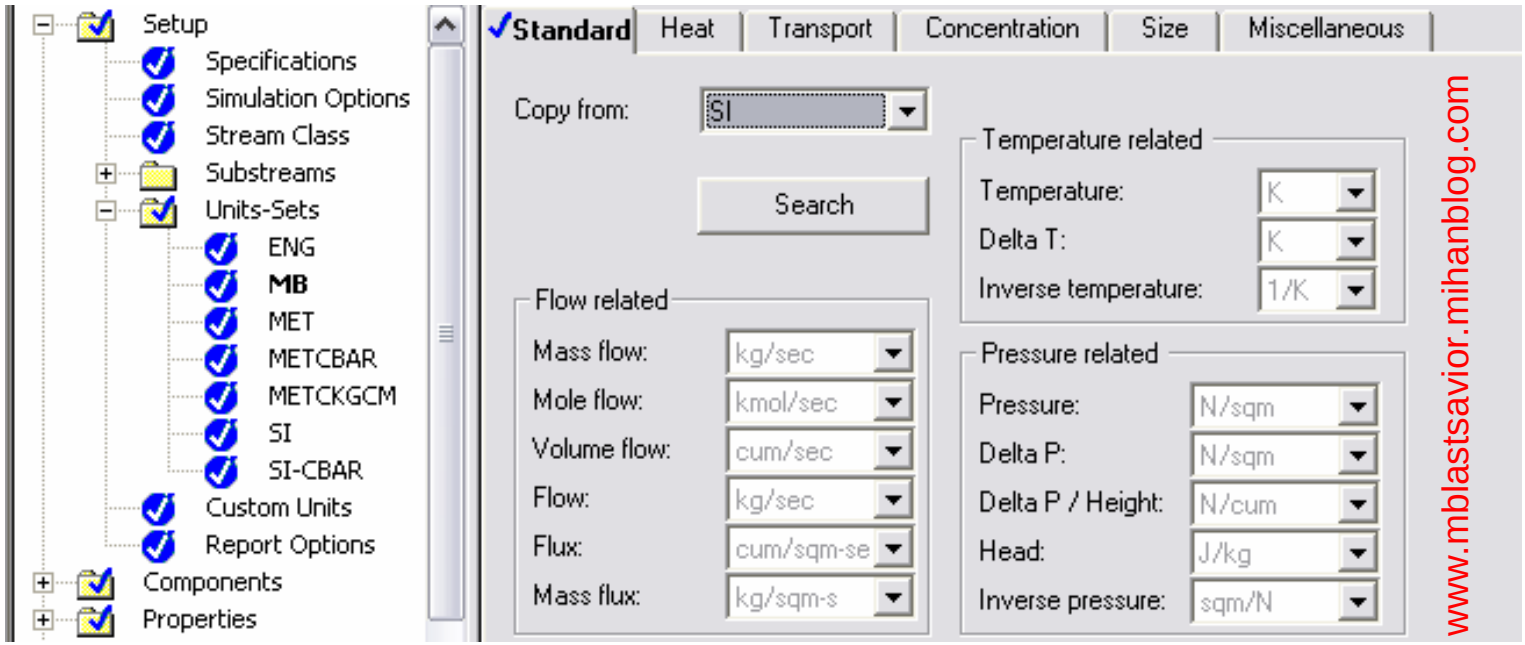
www.DownloadSoftware.iR

UNIT-SET

Unit-Set	Temp	Pres	Mass Flow	Mole Flow	Enthalpy Flow	Volume Flow
ENG†	F	psi	lb/hr	lbmol/hr	Btu/hr	cuft/hr
MET	K	atm	kg/hr	kmol/hr	cal/sec	l/min
METCBAR††	C	bar	kg/hr	kmol/hr	MMkcal/hr	cum/hr
METCKGGM	C	kg/sqcm	kg/hr	kmol/hr	MMkcal/hr	cum/hr
SI	K	n/sqm	kg/sec	kmol/sec	watt	cum/sec
SI-CBAR	C	bar	kg/hr	kmol/hr	watt	cum/hr

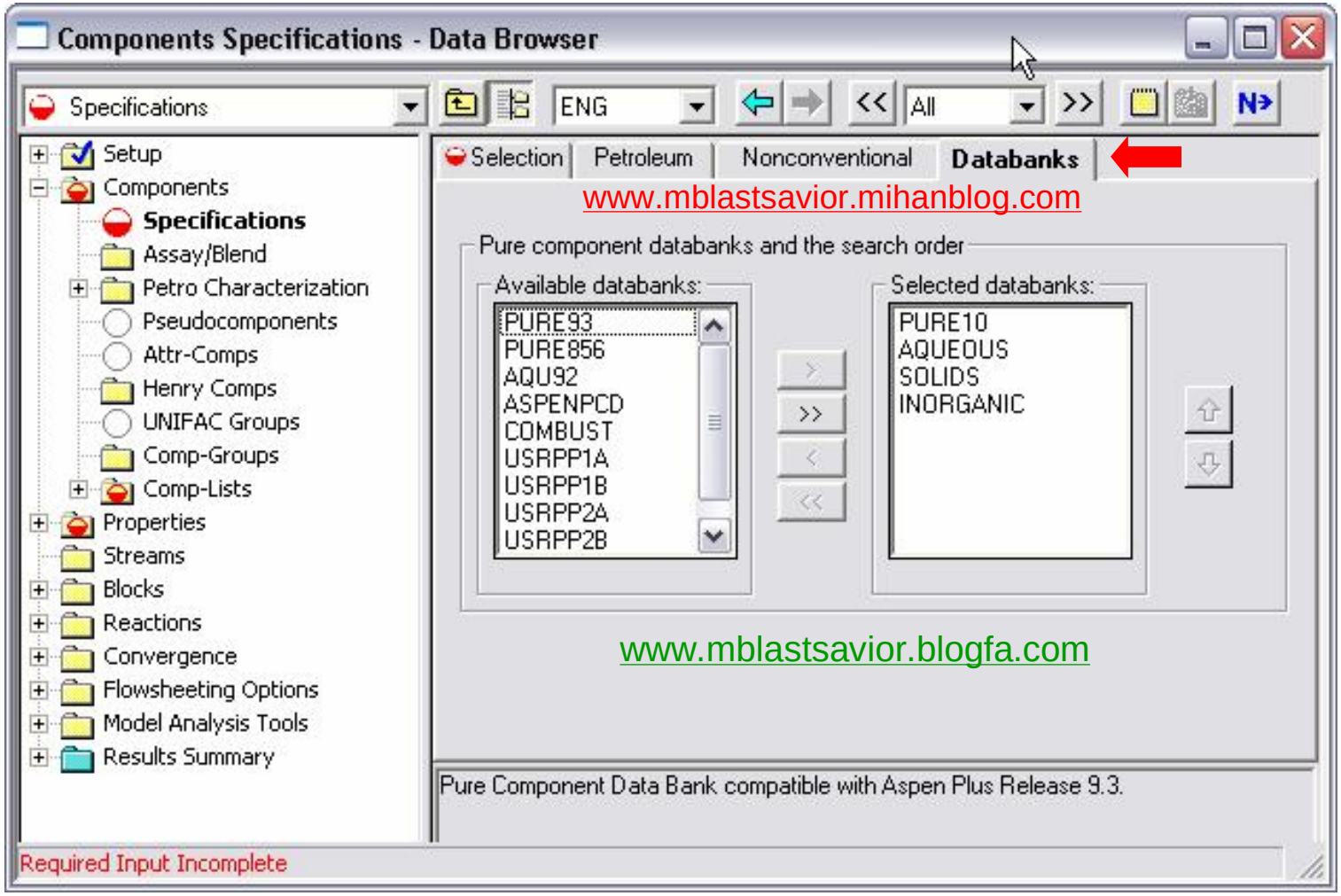
www.DownloadSoftware.iR

UNIT-SET



- International system units (SI)
- English engineering units (ENG)
- Metric engineering units (MET)

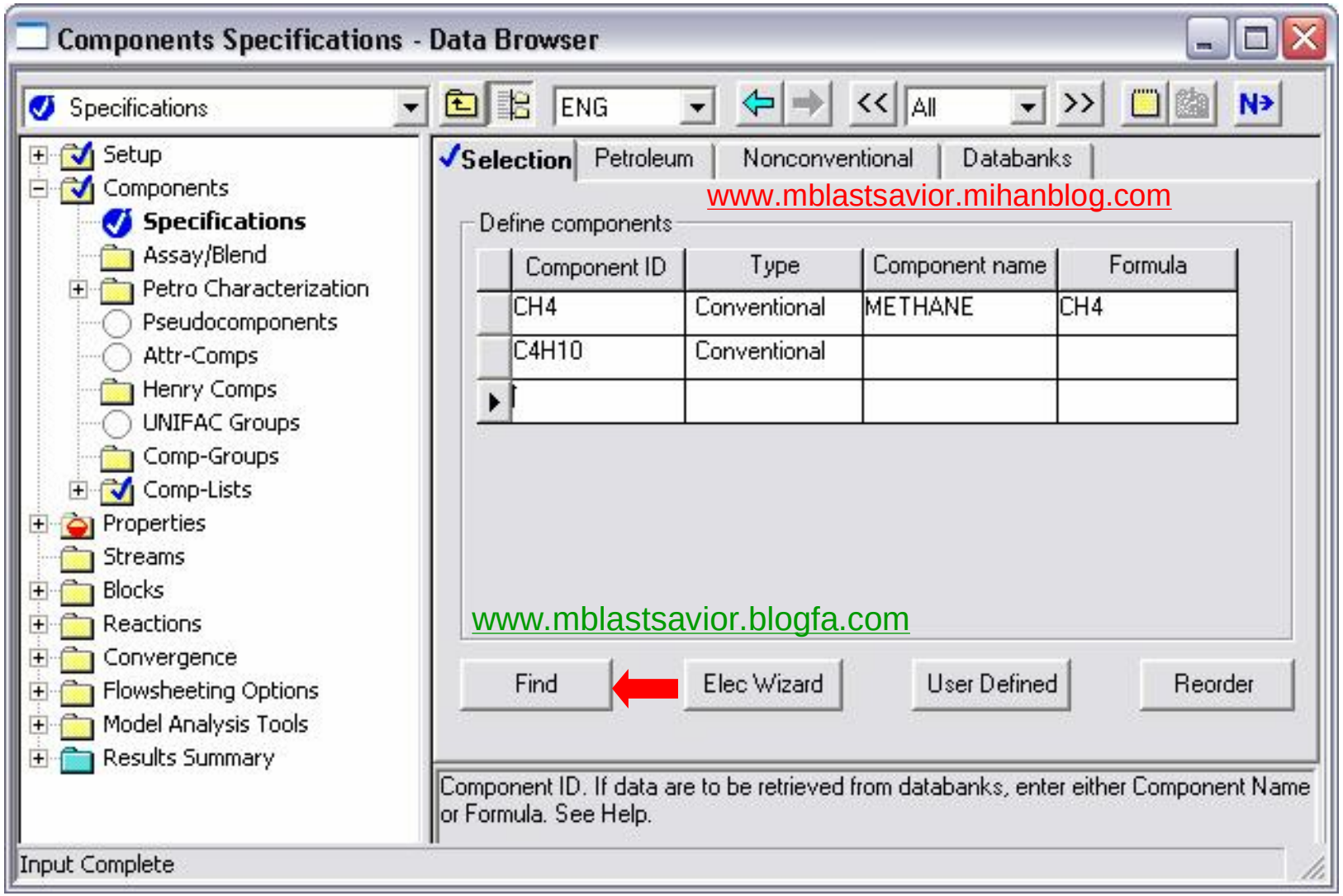
www.DownloadSoftware.iR



www.DownloadSoftware.iR

PURE11	Pure component parameters for mostly organic components	Primary component databank in Aspen Plus
AQUEOUS	Pure component parameters for ionic and molecular species in aqueous solution	Simulations containing electrolytes
SOLIDS	Pure component parameters for strong electrolytes, salts, and other solids	Simulations containing electrolytes and solids
INORGANIC	Pure component parameters for inorganic and organic components	Solids, electrolytes, and metallurgy applications
PURE856	Version of main pure component databank delivered with Aspen Plus Release 8.5-6	For upward compatibility with previous releases of Aspen Plus
PURE93	Version of main pure component databank delivered with Aspen Plus Release 9.3	For upward compatibility with previous releases of Aspen Plus
PURE10	Version of main pure component databank delivered with Aspen Plus Version 10	For upward compatibility with previous releases of Aspen Plus
AQU92	Version of AQUEOUS delivered with Aspen Plus Release 9.2	For upward compatibility with previous releases of Aspen Plus
ASPENPCD	Version of main pure components databank delivered with Aspen Plus Release 8.5-6	For upward compatibility with previous releases of Aspen Plus
COMBUST	Pure component parameters for combustion products, including free radicals	For high temperature, gas phase calculations
ETHYLENE	Pure component parameters for components typically found in ethylene processes for the SRK property method	Ethylene processes

www.DownloadSoftware.iR



www.DownloadSoftware.iR

www.mblastsavior.blogfa.com

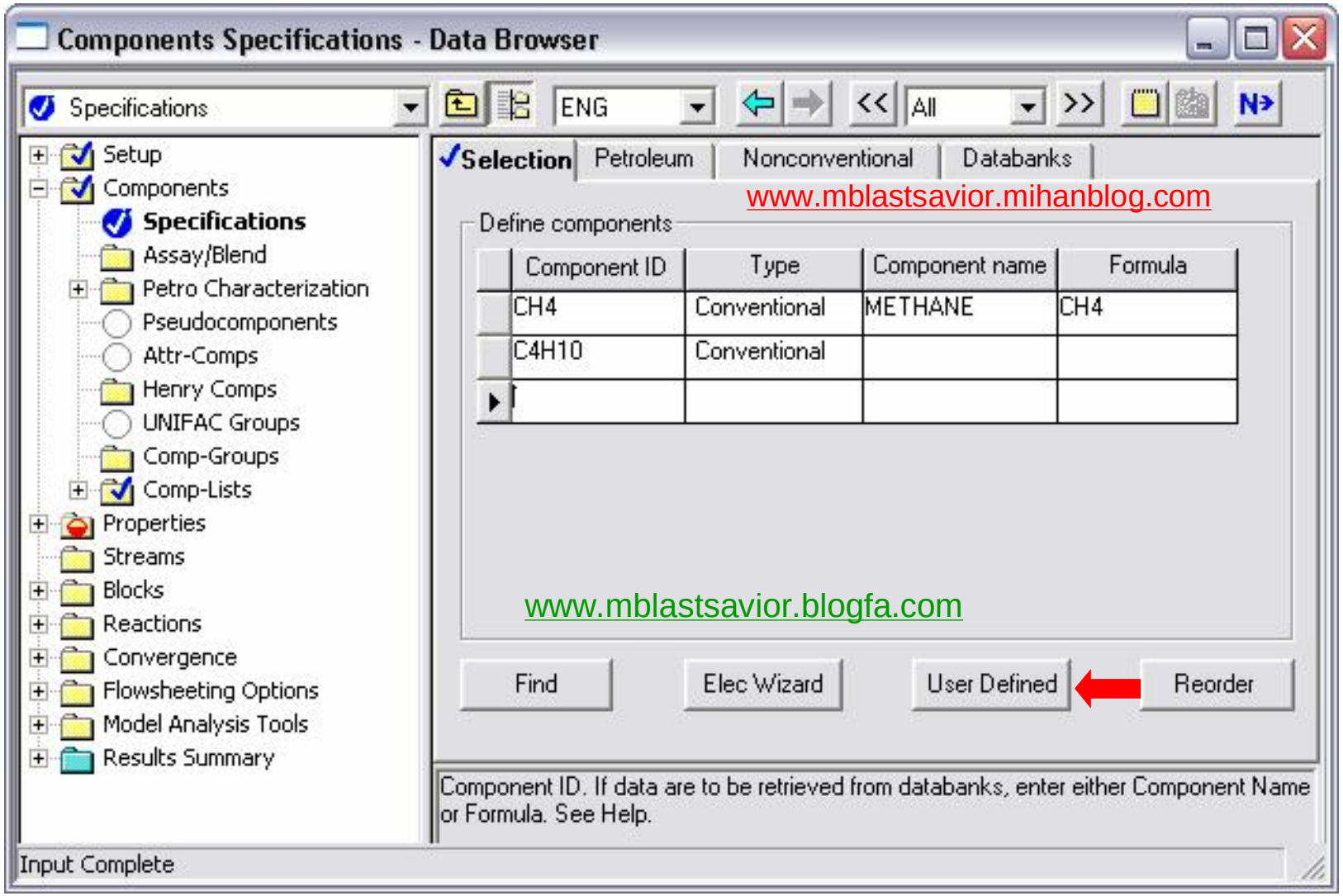
CAS:Chemical Abstract Service

www.DownloadSoftware.iR

مثال:

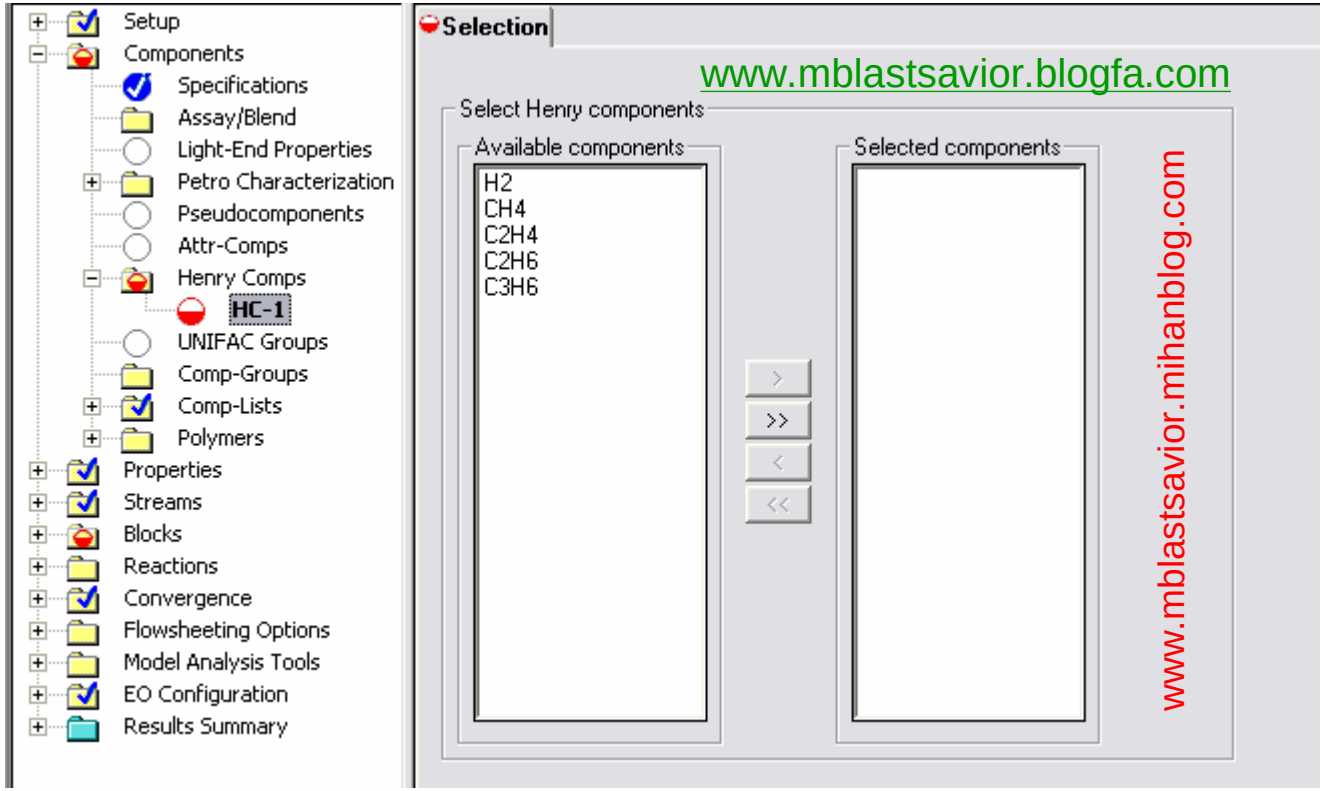
- ترکیبات C4H10(نرمال بوتان)
- CH4
- با C3 شروع و دماي جوش ۲۰۰-۲۵۰ کلوین(به اختیار)

www.DownloadSoftware.iR



www.DownloadSoftware.iR

Henry Coumpounds



www.DownloadSoftware.iR

Henry Coumpounds

To use Henry's law for supercritical components:

1 Select an appropriate property method. These property methods allow Henry's law:

B-PITZER	NRTL-2	UNIQUAC	VANL-2
IDEAL	PITZER	UNIQ-HOC	WILSON
ELECNRTL	PITZ-HG	UNIQ-NTH	WILS-HF
ENRTL-HF	SOLIDS	UNIQ-RK	WILS-HOC
ENRTL-HG	UNIFAC	UNIQ-2	WILS-NTH
NRTL	UNIF-DMD	VANLAAR	WILS-RK
NRTL-HOC	UNIF-HOC	VANL-HOC	WILS-2
NRTL-NTH	UNIF-LBY	VANL-NTH	WILS-GLR
NRTL-RK	UNIF-LL	VANL-RK	WILS-LR

Equation-of-state property methods do not require special treatment for supercritical components.

www.DownloadSoftware.iR

Equation - Properties

www.DownloadSoftware.iR

- روش انتخاب معادلات ترمودینامیکی

  - انتخاب معادله ترمودینامیکی مناسب
  - تغییر معادلات ترمودینامیکی (Modify Property)
  - تغییر خواص ترکیبات در معادلات از پیش تعیین شده (Routes & Model)
  - وارد کردن ثوابت مربوط به ترکیبات (خالص، دوجزیی و ...)
    - Scaler, T Dependent, Binery Parameters
  - وارد کردن خواص از معادلات آزمایشگاهی

www.DownloadSoftware.iR

مقایسه کاربردی مدل های اکتیویته و معادلات حالت

مدل های اکتیویته	معادلات حالت
برای مایعات به شدت غیر ایده آل می توانند استفاده شوند.	برای محلول های 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 می توانند استفاده شوند.
پارامترهای دو تایی به شدت وابستگی دمایی دارند.	جهت برون یابی پارامترها با دما به خوبی عمل می کند.

به بیان دیگر می توان گفت :

- معادلات حالت برای ترکیبات هیدروکربنی در بازه وسیعی از شرایط عملیاتی مناسب می باشند اما کاربرد آنها محدود به سیستم های غیر قطبی یا مواد مختصر قطبی است.
- برای سیستم های شیمیایی غیر ایده آل یا قطبی بهتر است از سیستم ترمودینامیکی دو گانه استفاده گردد. در این حالت یک معادله حالت برای پیش بینی ضرایب فوگاسیته فاز بخار (معمولاً سیستم IDEAL GAS ، یا معادلات حالت SRK , RK , PR) و یک مدل ضریب فعالیت برای فاز مایع انتخاب می شود.

مدل های اکتیویته برای محدوده فشار های معمولی و برای مواقعی استفاده می شوند که رفتار سیستم به تغییرات فشار وابستگی زیادی را نشان دهد. در این حالت انتخاب این مدل ها برای شبیه سازی باید با دقت و احتیاط زیادی انجام شود و تنظیم پارامترهای این مدل ها باید بر اساس نمونه های مشاهده شده از داده های تجربی انجام شود و لذا این مدل ها را نمی توان برای شرایط عملیاتی آزمایش نشده استفاده کرد.

www.DownloadSoftware.iR

EOS(Equation Of State)

(Kabadi Danner)KD: تعادل سيستم هاي آب-هيدروكربن(بخصوص در غلظتهاي پاين)

(Lee Kesler Plocker)LKP:تركيبات و مخلوطهاي غير قطبي

(Soave Redlich Kwong)SRK:مشابهPR با بازدا عملياتي محدودتر و غير مناسب براي سيستم هاي غير ايده آل

Sour PR: تركيب Wilsons Api-sour و PR براي سيستمهاي آبي-اسيدي

Sour SRK: تركيب Wilsons Api-sour و SRK براي سيستمهاي آبي-اسيدي

(zudkevith Joffee)ZJ: تغيير يافته SRK براي تعادل بخار-مايع سيستمهاي هيدروكربني و سيستم هاي شامل هيدروژن

www.DownloadSoftware.iR

	Soave Redlich Kwong	Peng Robinson
	$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V(V+b)}$ $Z^3 - Z^2 + (A - B - B^2)Z - AB = 0$	$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V(V+b)+b(V-b)}$ $Z^3 - (1-B)Z^2 + (A - 2B - 3B^2)Z - (AB - B^2 - B^3) = 0$

Method	Temp (°F)	Temp (°C)	Pressure (psia)	Pressure (kPa)
PR	> -456	> -271	< 15,000	< 100,000
SRK	> -225	> -143	< 5,000	< 35,000

Method	Temp. (°C)	Temp. (°C)	Press. (psia)	Press. (kPa)
CS	0 to 500	18 to 260	<1,500	<10,000
GS	0 to 800	18 to 425	<3,000	<20,000

www.DownloadSoftware.iR

Property Method	VLE Calculation	Enthalpy/Entropy Calculation
Equations of State		
PR	PR	PR
PR LK ENTH	PR	Lee-Kesler
SRK	SRK	SRK
SRK LK ENTH	SRK	Lee-Kesler
Kabadi Danner	Kabadi Danner	SRK
Lee Kesler Plocker	Lee Kesler Plocker	Lee Kesler
PRSV	PRSV	PRSV
PRSV LK	PRSV	Lee-Kesler
Sour PR	PR & API-Sour	PR
SOUR SRK	SRK & API-Sour	SRK
Zudkevitch-Joffee	Zudkevitch-Joffee	Lee-Kesler
Activity Models		
Liquid		
Chien Null	Chien Null	Cavett
Extended and General NRTL	NRTL	Cavett
Margules	Margules	Cavett
NRTL	NRTL	Cavett
UNIQUAC	UNIQUAC	Cavett
van Laar	van Laar	Cavett
Wilson	Wilson	Cavett
Vapour		
Ideal Gas	Ideal	Ideal Gas

www.mblastsavior.mihanblog.com

www.DownloadSoftware.iR

Property Method	VLE Calculation	Enthalpy/Entropy Calculation
RK	RK	RK
Virial	Virial	Virial
Peng Robinson	Peng Robinson	Peng Robinson
SRK	SRK	SRK
Semi-Empirical Models		
Chao-Seader	CS-RK	Lee-Kesler
Grayson-Streed	GS-RK	Lee-Kesler
Vapour Pressure Models		
Mod Antoine	Mod Antoine-Ideal Gas	Lee-Kesler
Braun K10	Braun K10-Ideal Gas	Lee-Kesler
Esso K	Esso-Ideal Gas	Lee-Kesler
Miscellaneous - Special Application Methods		
Amines	Mod Kent Eisenberg (L), PR (V)	Curve Fit
Steam Packages		
ASME Steam	ASME Steam Tables	ASME Steam Tables
NBS Steam	NBS/NRC Steam Tables	NBS/NRC Steam Tables
MBWR	Modified BWR	Modified BWR

www.DownloadSoftware.iR

CS & GS

CS(Chao Seader): براي هيدروكربنهاي سنگين زير 1500 psig و محدوده دمايي 0-5000 F

GS(Grayson Stread):براي سيستمهاي همزمان هيدروكربنهاي سنگين و تركيبات پر هيدروژن

www.DownloadSoftware.iR

Vapor Pressure

Antoine:سيسم هاي ايده آل فشار پايين

Braun K10:سيستم هاي هيدروكربني سنگين در فشار پايين كه K-value آن در نقطه جوش نرمال و فشار 10 psia محاسبه مي شود

Esso K:مانند Braun K10 ولي روش تخمين K متفاوت است

www.DownloadSoftware.iR

Property Methods-EOS

Equation of State Property Methods

Equation-of-State Property Method	K-Value Method
BWR-LS	BWR Lee-Starling
LK-PLOCK	Lee-Kesler-Plöcker
PENG-ROB	Peng-Robinson
PR-BM	Peng-Robinson with Boston-Mathias alpha function
PRWS	Peng-Robinson with Wong-Sandler mixing rules
PRMHV2	Peng-Robinson with modified Huron-Vidal mixing rules
PSRK	Predictive Redlich-Kwong-Soave
RKSWS	Redlich-Kwong-Soave with Wong-Sandler mixing rules
RKSMHV2	Redlich-Kwong-Soave with modified Huron-Vidal mixing rules
RK-ASPEN	Redlich-Kwong-ASPEN
RK-SOAVE	Redlich-Kwong-Soave
RKS-BM	Redlich-Kwong-Soave with Boston-Mathias alpha function
SR-POLAR	Schwartzentruber-Renon

www.DownloadSoftware.iR

Property Methods- Activity Models

Activity Coefficient Property Methods

Activity Coefficient Property Method	Liquid Phase Activity Coefficient Method	Vapor Phase Fugacity Coefficient Method
B-PITZER	Bromley-Pitzer	Redlich-Kwong-Soave
ELECNRTL	Electrolyte NRTL	Redlich-Kwong
ENRTL-HF	Electrolyte NRTL	HF Hexamerization model
ENRTL-HG	Electrolyte NRTL	Redlich-Kwong
NRTL	NRTL	Ideal gas
NRTL-HOC	NRTL	Hayden-O'Connell
NRTL-NTH	NRTL	Nothnagel
NRTL-RK	NRTL	Redlich-Kwong
NRTL-2	NRTL (using dataset 2)	Ideal gas
PITZER	Pitzer	Redlich-Kwong-Soave
PITZ-HG	Pitzer	Redlich-Kwong-Soave
UNIFAC	UNIFAC	Redlich-Kwong
UNIF-DMD	Dortmund-modified UNIFAC	Redlich-Kwong-Soave
UNIF-HOC	UNIFAC	Hayden-O'Connell
UNIF-LBY	Lyngby-modified UNIFAC	Ideal gas

www.DownloadSoftware.iR

Activity Coefficient Property Method	Liquid Phase Activity Coefficient Method	Vapor Phase Fugacity Coefficient Method
UNIF-LL	UNIFAC for liquid-liquid systems	Redlich-Kwong
UNIQUAC	UNIQUAC	Ideal gas
UNIQ-HOC	UNIQUAC	Hayden-O'Connell
UNIQ-NTH	UNIQUAC	Nothnagel
UNIQ-RK	UNIQUAC	Redlich-Kwong
UNIQ-2	UNIQUAC (using dataset 2)	Ideal gas
VANLAAR	Van Laar	Ideal gas
VANL-HOC	Van Laar	Hayden-O'Connell
VANL-NTH	Van Laar	Nothnagel
VANL-RK	Van Laar	Redlich-Kwong
VANL-2	Van Laar (using dataset 2)	Ideal gas
WILSON	Wilson	Ideal gas
WILS-HOC	Wilson	Hayden-O'Connell
WILS-NTH	Wilson	Nothnagel
WILS-RK	Wilson	Redlich-Kwong
WILS-2	Wilson (using dataset 2)	Ideal gas
WILS-HF	Wilson	HF Hexamerization model
WILS-GLR	Wilson (ideal gas and liquid enthalpy reference state)	Ideal gas
WILS-LR	Wilson (liquid enthalpy reference state)	Ideal gas
WILS-VOL	Wilson with volume term	Redlich-Kwong

www.DownloadSoftware.iR

Special Systems

Property Methods for Special Systems

Property Methods for Special Systems	K-Value Method	System
AMINES	Kent-Eisenberg amines model	H2S, CO2, in MEA, DEA, DIPA, DGA solution
APISOUR	API sour water model	Sour water with NH3, H2S, CO2
BK-10	Braun K-10	Petroleum
SOLIDS	Ideal Gas/Raoult's law/Henry's law/solid activity coefficients	Pyrometallurgical
CHAO-SEA	Chao-Seader corresponding states model	Petroleum
GRAYSON	Grayson-Streed corresponding states model	Petroleum
STEAM-TA	ASME steam table correlations	Water/steam
STEAMNBS	NBS/NRC steam table equation of state	Water/steam

www.DownloadSoftware.iR

Choosing a Property Method

Oil and Gas Production

Application	Recommended Property Methods
Reservoir systems	PR-BM, RKS-BM
Platform separation	PR-BM, RKS-BM
Transportation of oil and gas by pipeline	PR-BM, RKS-BM

www.DownloadSoftware.iR

Choosing a Property Method

Refinery

Application	Recommended Property Methods
Low pressure applications (up to several atm) Vacuum tower, atmospheric crude tower	BK10, CHAO-SEA, GRAYSON
Medium pressure applications (up to several tens of atm) Coker main fractionator, FCC main fractionator	CHAO-SEA, GRAYSON, PENG-ROB, RK-SOAVE
Hydrogen-rich applications Reformer, Hydrofiner	GRAYSON, PENG-ROB, RK-SOAVE
Lube oil unit, De-asphalting unit	PENG-ROB, RK-SOAVE

www.DownloadSoftware.iR

Choosing a Property Method

Gas Processing

Application	Recommended Property Methods
Hydrocarbon separations Demethanizer C3-splitter	PR-BM, RKS-BM, PENG-ROB, RK-SOAVE
Cryogenic gas processing Air separation	PR-BM, RKS-BM, PENG-ROB, RK-SOAVE
Gas dehydration with glycols	PRWS, RKSWS, PRMHV2, RKSMHV2, PSRK, SR-POLAR
Acid gas absorption with Methanol (RECTISOL) NMP (PURISOL)	PRWS, RKSWS, PRMHV2, RKSMHV2, PSRK, SR-POLAR
Acid gas absorption with Water Ammonia Amines Amines + methanol (AMISOL) Caustic Lime Hot carbonate	ELECNRTL
Claus process	PRWS, RKSWS, PRMHV2, RKSMHV2, PSRK, SR-POLAR

www.DownloadSoftware.iR

Choosing a Property Method

Petrochemicals

Application	Recommended Property Methods
Ethylene plant Primary fractionator	CHAO-SEA, GRAYSON
Light hydrocarbons Separation train Quench tower	PENG-ROB, RK-SOAVE
Aromatics BTX extraction	WILSON, NRTL, UNIQUAC and their variances
Substituted hydrocarbons VCM plant Acrylonitrile plant	PENG-ROB, RK-SOAVE
Ether production MTBE, ETBE, TAME	WILSON, NRTL, UNIQUAC and their variances
Ethylbenzene and styrene plants	PENG-ROB, RK-SOAVE –or– WILSON, NRTL, UNIQUAC and their variances
Terephthalic acid	WILSON, NRTL, UNIQUAC and their variances (with dimerization in acetic acid section)

See Guidelines for Choosing a Property Method for Polar Non-Electrolyte Systems to see diagrams for recommendations based on pressure and vapor phase association.

www.DownloadSoftware.iR

Choosing a Property Method

Chemicals

Application	Recommended Property Methods
Azeotropic separations Alcohol separation	WILSON, NRTL, UNIQUAC and their variances
Carboxylic acids Acetic acid plant	WILS-HOC, NRTL-HOC, UNIQ-HOC
Phenol plant	WILSON, NRTL, UNIQUAC and their variances
Liquid phase reactions Esterification	WILSON, NRTL, UNIQUAC and their variances
Ammonia plant	PENG-ROB, RK-SOAVE
Fluorochemicals	WILS-HF
Inorganic Chemicals Caustic Acids Phosphoric acid Sulphuric acid Nitric acid Hydrochloric acid	ELECNRTL
Hydrofluoric acid	ENRTL-HF

www.DownloadSoftware.iR

Choosing a Property Method

Coal Processing

Application	Recommended Property Methods
Size reduction crushing, grinding	SOLIDS
Separation and cleaning sieving, cyclones, precipitation, washing	SOLIDS
Combustion	PR-BM, RKS-BM (combustion databank)
Acid gas absorption with Methanol (RECTISOL) NMP (PURISOL)	PRWS, RKSWS, PRMHV2, RKSMHV2, PSRK, SR-POLAR
Acid gas absorption with Water Ammonia Amines Amines + methanol (AMISOL) Caustic Lime Hot carbonate	ELECNRTL
Coal gasification and liquefaction	See Synthetic Fuels table.

www.DownloadSoftware.iR

Choosing a Property Method

Power Generation	**Application**	**Recommended Property Methods**
	Combustion Coal Oil	PR-BM, RKS-BM (combustion databank)
	Steam cycles Compressors Turbines	STEAMNBS, STEAM-TA
	Acid gas absorption	See gas processing.

Synthetic Fuel	**Application**	**Recommended Property Methods**
	Synthesis gas	PR-BM, RKS-BM
	Coal gasification	PR-BM, RKS-BM
	Coal liquefaction	PR-BM, RKS-BM, BWR-LS

www.DownloadSoftware.iR

Choosing a Property Method

Environmental

Application	Recommended Property Methods
Solvent recovery	WILSON, NRTL, UNIQUAC and their variances
(Substituted) hydrocarbon stripping	WILSON, NRTL, UNIQUAC and their variances
Acid gas stripping from Methanol (RECTISOL) NMP (PURISOL)	PRWS, RKSWS, PRMHV2, RKSMHV2, PSRK, SR-POLAR
Acid gas stripping from: Water Ammonia Amines Amines + methanol (AMISOL) Caustic Lime Hot carbonate	ELECNRTL
Acids Stripping Neutralization	ELECNRTL

www.DownloadSoftware.iR

Choosing a Property Method

Water and Steam	**Application**	**Recommended Property Methods**
	Steam systems Coolant	STEAMNBS, STEAM–TA
Mineral and Metallurgical Processes	**Application**	**Recommended Property Methods**
	Mechanical processing: Crushing Grinding Sieving Washing	SOLIDS
	Hydrometallurgy Mineral leaching	ELECNRTL
	Pyrometallurgy Smelter Converter	SOLIDS

www.DownloadSoftware.iR

Specifying a Local Property Method

You can override the global property method by specifying a local property method on:

- The BlockOptions Properties sheet, for a unit operation block

Model	Sheet	Allows you to specify property methods for
Decanter	Decanter Properties Phase Property	Liquid1 and liquid2 phases
RadFrac	RadFrac Properties Property Sections	Column segments, decanters, thermosyphon reboiler
RGibbs	RGibbs Setup Products	Each phase
MultiFrac	MultiFrac Properties Property Sections	Column segments
PetroFrac	PetroFrac Properties Property Sections PetroFrac Stripper Properties Property Sections	Column segments for main column Column segments for stripper
HeatX	HeatX BlockOptions Properties	Hot and cold sides of the exchanger
MHeatX	MHeatX BlockOptions Properties	Each stream in the exchanger
RPlug	RPlug BlockOptions Properties	Reactant and external coolant streams

www.DownloadSoftware.iR

Using Free Water Calculations

For water-hydrocarbon applications, two liquid phases often coexist with a vapor phase. Aspen Plus has two approaches for modeling these types of vapor-liquid-liquid equilibrium simulations:

- Rigorous three-phase calculations
- Calculations with a free water approximation. When you use free water approximation, Aspen Plus assumes the water phase is pure liquid water (free water).

Free water calculations are:

- Normally adequate for water-hydrocarbon systems, where the hydrocarbon solubility in the water phase is generally negligible.
- Always faster than rigorous three-phase calculations, and require minimal physical property data.

www.DownloadSoftware.iR

Specifying Properties for the Free-Water Phase

When you use the free water approximation, you must specify the property method to be used for the free-water phase. This property method calculates all thermodynamic and transport properties for the free-water phase.

To choose a property method:

1 Go to the Properties Specifications Global sheet or Flowsheet Sections sheet, or the BlockOptions Properties sheets for a unit operation model.

2 In the Free-Water Method list box, select one:

Property Method	Description	Merits
STEAM-TA	1967 ASME steam table correlations (default)	-
STEAMNBS	NBS/NRC steam table correlations	More accurate than the ASME steam table
IDEAL or SYSOP0	For systems at low or moderate pressures	More efficient calculations than STEAM-TA or STEAMNBS

www.DownloadSoftware.iR

Special Method for K-Value of Water in the Organic Phase

The global property method calculates the K-value of water unless you specify another method.

In free water calculations, you can use a special method to calculate the K-value of water in the organic phase:

$$K_w = \frac{\gamma_w \varphi_w^{*,l}}{\varphi_w^{v}}$$

Where:

γ_w	=	Activity coefficient of water in the organic phase
$\varphi_w^{*,l}$	=	Fugacity coefficient of pure liquid water calculated using the free-water phase property method
φ_w^{v}	=	Fugacity coefficient of water in the vapor phase mixture

www.DownloadSoftware.iR

How to Select a Calculation Method

To select a calculation method for γ_w and φ_w^v:

1 Go to the Properties Specifications Global or the BlockOptions Properties sheet for a unit operation model.

2 In the Water Solubility list box, select one:

Water Solubility Option	Calculates γ_w from	Calculates φ_w^v from
0	$\gamma_w = \frac{1}{x_w^{sol}}$	Free-water property method
1	$\gamma_w = \frac{1}{x_w^{sol}}$	Primary property method
2	$\gamma_w = f(T, x_w)$ where $\gamma_w = \frac{1}{x_w^{sol}}$ when $x_w = x_w^{sol}$	Primary property method
3 †	The K-value of water is calculated by the primary property method	

† Water solubility option 3 is not recommended unless binary interaction parameters regressed from liquid-liquid equilibrium data are available.

Note: X_w^{sol} is solubility of water in the organic phase, calculated using the water-solubility correlation. (WATSOL).

www.DownloadSoftware.iR

Unit Operations

Type	Model	Description
Mixers/Splitters	Mixer	Stream mixer
	FSplit	Stream splitter
	SSplit	Substream splitter
Separators	Flash2	Two-outlet flash
	Flash3	Three-outlet flash
	Decanter	Liquid-liquid decanter
	Sep	Multi outlet component separator
	Sep2	Two-outlet component separator

www.DownloadSoftware.iR

Unit Operations

Type	Model	Description
Heat Exchangers	Heater	Heater/cooler
	HeatX	Two-stream heat exchanger
	MheatX	Multistream heat exchanger
	HxFlux	Heat transfer between a heat source and a heat sink
	Hetran	Interface to Aspen Hetran shell & tube heat exchanger program
	Aerotran	Interface to Aspen Aerotran air cooled heat exchanger program
	HTRI-Xist	Interface to the Xist program
Columns	DSTWU	Shortcut distillation design
	Distl	Shortcut distillation rating
	RadFrac	Rigorous distillation
	Extract	Rigorous liquid-liquid extractor
	MultiFrac	Rigorous distillation for complex columns
	SCFrac	Shortcut distillation for petroleum
	PetroFrac	Rigorous distillation for petroleum
	RateFrac	Rate-based distillation
	BatchFrac	Rigorous batch distillation
Reactors	RStoic	Stoichiometric reactor
	RYield	Yield reactor
	REquil	Equilibrium reactor
	RGibbs	Equilibrium reactor
	RCSTR	Continuous-stirred tank reactor
	RPlug	Plug flow reactor
	RBatch	Batch reactor

www.DownloadSoftware.iR

Unit Operations

Pressure Changers	Pump	Pump/hydraulic turbine
	Compr	Compressor/turbine
	MCompr	Multistage compressor/turbine
	Pipeline	Multi segment pipeline pressure drop
	Pipe	Single segment pipeline pressure drop
	Valve	Rigorous valve pressure drop
Manipulators	Mult	Stream multiplier
	Dupl	Stream duplicator
	ClChng	Stream class changer
	Analyzer	Stream calculator
	Feedbl	Stream calculator
	Selector	Stream selector
	Measurement	Plant to model connector
Solids	Crystallizer	Mixed suspension mixed product removal crystallizer
	Crusher	Solids crusher
	Screen	Solids separator
	FabFl	Fabric filter
	Cyclone	Cyclone separator
	VScrub	Venturi scrubber
	ESP	Electrostatic precipitator
	HyCyc	Hydrocyclone
	CFuge	Centrifuge filter
	Filter	Rotary vacuum filter
	SWash	Single-stage solids washer
	CCD	Counter-current decanter

www.DownloadSoftware.iR

Unit Operations

Type	Model	Description
User models	User, User2	User-supplied Fortran unit operation models
	User3	Accesses subroutines (such as R3HTUA, supplied with Aspen Plus) and Aspen EO
	Excel Spreadsheets	Excel spreadsheets interfaced through User2
	ACM flowsheets	Flowsheet exported from ACM or AD
	CAPE-OPEN unit operation	COM unit operations developed on VB or C++
	Hierarchy	Hierarchical structure

RateFrac, BatchFrac, Hetran, and Aerotran require a separate license and can be used only by customers who have purchased the right to use them through specific license agreements with Aspen Technology, Inc.

www.DownloadSoftware.iR

Shortcut Keys

Using Shortcut Keys

The following lists describe the available shortcut keys:

General Shortcut Keys

This table shows general shortcut keys:

Item	Shortcut Key
Close active window	ALT+F4
Copy	CTRL+C
Context Help	F1
Cut	CTRL+X
Display popup menu	SHIFT+F10
Display next MDI-child window	CTRL+F6
Paste	CTRL+V
Print	CTRL+P
Redo	CTRL+Y
Save	CTRL+S
Select All	CTRL+A
Switch to next window	ALT+F6
What's This Help	SHIFT+F1

www.DownloadSoftware.iR

Shortcut Keys

Shortcut Keys for Working with Blocks and Streams

This table shows the shortcut keys for working with blocks and streams:

Item	Shortcut Key
Align Blocks	CTRL+B
Center View	CTRL+HOME
Change Section	CTRL+F11
Change Stream Class	CTRL+Q
Delete Blocks or Streams	DEL
Exchange Icon	CTRL+K
Hide Annotation	CTRL+L
Hide Global Data	CTRL+G
Hide ID	CTRL+H
Input	CTRL+I
Rename Block or Stream	CTRL+M
Reroute Streams	CTRL+J
Results	CTRL+R
Stream Results	CTRL+D
Unplace Block or Group	CTRL+U

www.DownloadSoftware.iR

Shortcut Keys

Shortcut Keys for Viewing

This table shows the shortcut keys that you can use for viewing:

Item	Shortcut Key
Annotation	CTRL+ALT+L
Bookmarks	F3
Center View	CTRL+HOME
Control Panel	F6
Current Section Only	SHIFT+F11
Global Data	CTRL+ALT+G
History	CTRL+ALT+H
Input Summary	CTRL+ALT+I
OLE Objects	CTRL+ALT+F
Model Library	F10
Page Break Preview	F2
Pan	CTRL+F3
PFD Mode	F12
Redraw	CTRL+W
Refresh PFD	SHIFT+F12
Report	CTRL+ALT+R
Reset Page Breaks	SHIFT+F2
Zoom Full	CTRL+END
Zoom In	CTRL+UP ARROW
Zoom Out	CTRL+DOWN ARROW

www.DownloadSoftware.iR

همچنین علاوه بر جداول بالا ، می توان معادله ترمودینامیکی مناسب را برای حالت های مختلف محلول ها با کمک جداول زیر تعیین کرد.

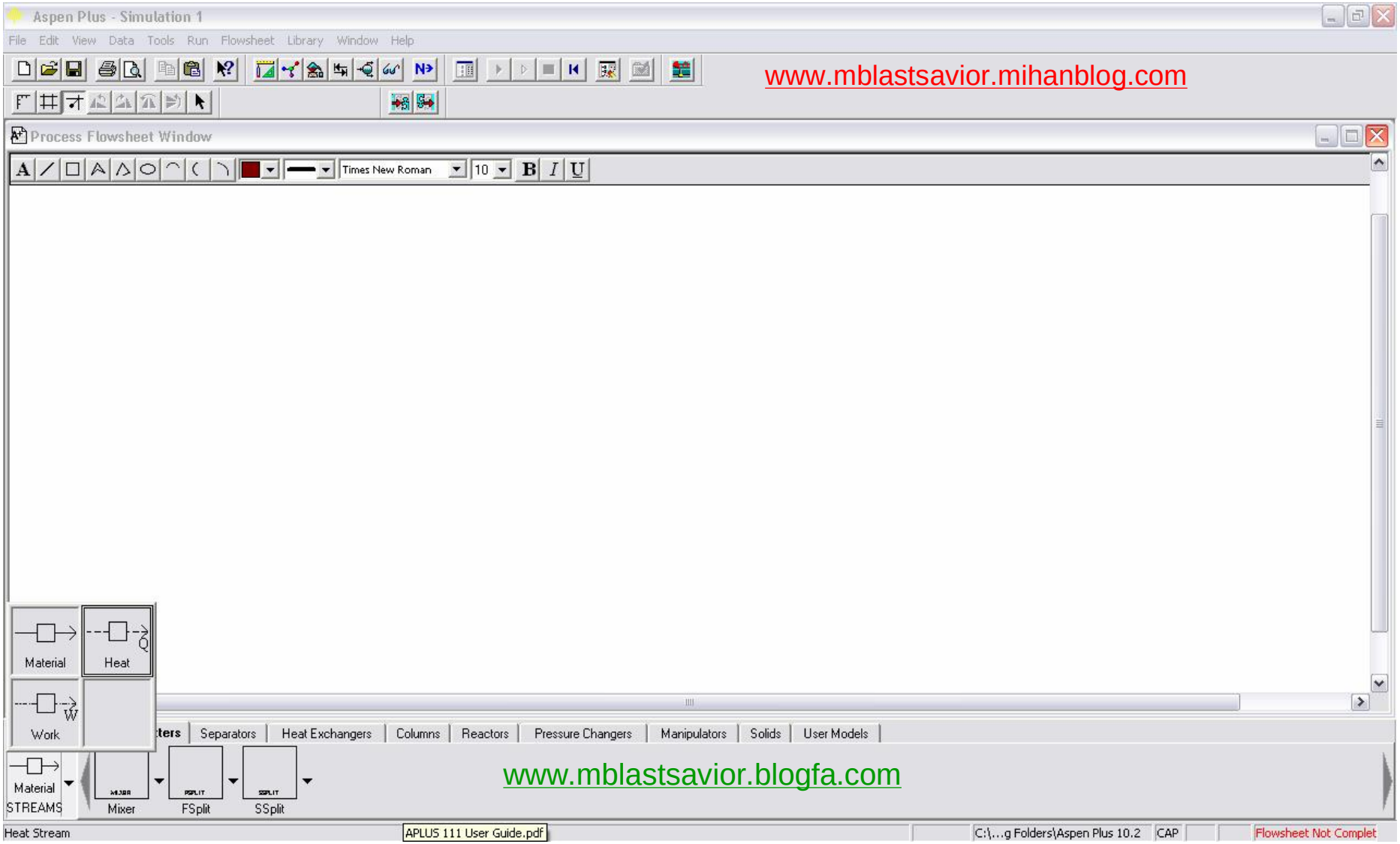
مواد قطبی	الکترولیتی	Pitzer or ENRTL			
	غیر الکترولیتی	P<10 bar	LL دارم	پارامتر های ij موجودند	NRTL , UNIQUAC
				پارامتر های ij موجود نیستند	UNIFACLLE
			LL ندارم	پارامتر های ij موجودند	Wilson , NRTL , UNIQUAC
				پارامتر های ij موجود نیستند	UNIFAC
		P>10 bar	پارامتر های ij موجودند		PR یا Schwartentruber-Renon PR یا قوانین اختلاط WS یا PRS or PRS or با قوانین اختلاط MHV2
			پارامتر های ij موجود نیستند		PSRK ، RKS یا PR با قوانین اختلاط MHV2
مواد غیر قطبی (برای انجام محاسبات فاز بخار)	مواد واقعی	PR or RKS-Plocker-Kesler-Lee			
	مواد فرضی	فشار خلأ	BraunK-10 or Ideal		
		فشار غیر خلأ	BraunK-10 or Chao-Seader & Grayson-Streed		

www.DownloadSoftware.iR

Flowsheet محیط

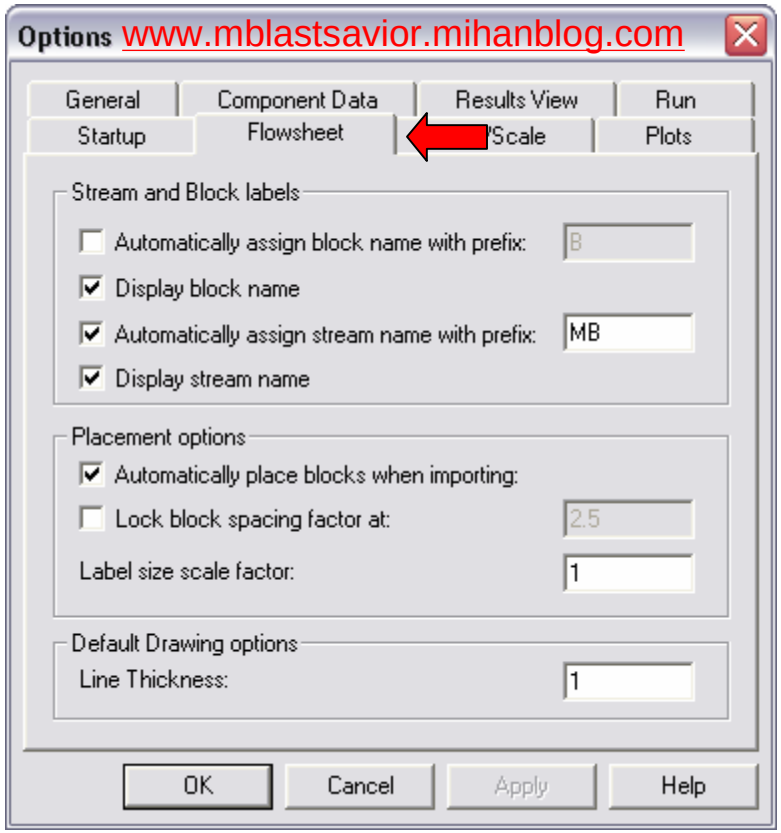
Stream

www.DownloadSoftware.iR



www.DownloadSoftware.iR

نامگذاري اتوماتيک جريانها و دستگاهها

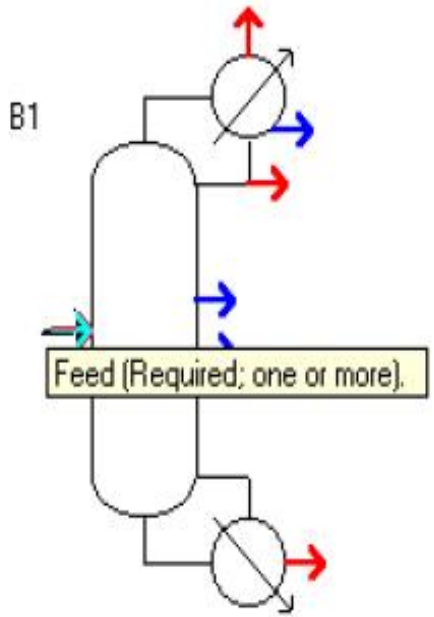


www.DownloadSoftware.iR

Pointer Shape	Function	Use
	Select mode	Click an object to select it. Click and hold an object to enter Move mode. Click and drag to select a region or to move or resize a region (The pointer changes to the Resize shape).
	Insert mode	Click to place a model of the type selected in the Model Library. **Note** After placing each block, you remain in Insert Mode until you click the Select Mode button in the upper left corner of the Model Library.
	Connect mode	Click a port to connect the stream to it Click a blank area of the flowsheet to to place a feed or product
	Move mode	Click and hold to move the object to a desired location
	Port move mode	Click and hold to move the port to a desired location Drag the port away from the model to enter Disconnect mode
	Disconnect mode	Click and hold on a stream while dragging it away from a block to disconnect it. Release the mouse button to enter Connect mode.
	Resize mode	Click and drag to resize a model or region

www.DownloadSoftware.iR

Ports that must have at least one stream connected are shown in red. Other optional ports are shown in blue. If you position the mouse over a displayed port, the arrow is highlighted and a text box with the description of the port appears.



www.DownloadSoftware.iR

Checking Flowsheet Completeness

To check completeness for the entire flowsheet, look at the status indicator in the bottom right of the main window.

If the status is *Flowsheet Not Complete*, then flowsheet connectivity is incomplete because:

- Additional streams must be connected to one or more blocks in the flowsheet.
- Streams have been disconnected but not reconnected.
- No blocks have been defined.
- To find out why the connectivity is incomplete:
- Click the Next button on the Data Browser toolbar.

Reconnect Source to disconnect the source end of the stream

Reconnect Destination to disconnect the output end of the stream

www.DownloadSoftware.iR

Moving Multiple Objects at Once

To move multiple objects at once:

1 Select the objects you want to move.

2 Hold down the mouse button on any object within the region.

The mouse pointer changes to the move shape ( ).

3 Drag the objects to the location you want, and release the mouse button.

Tip You can also select multiple objects and then use the arrow keys (←↑→↓) to move them to the new location.

Tip: You can also select the block and then use the arrow keys (←↑→↓) to make minor adjustments to the position of the block.

Tip You can also select the block ID and then use the arrow keys (←↑→↓) to move the block ID.

Tip You can also change the icon by clicking the block, then pressing the letter n to change to the next icon available for the block, or p to change to the previous available icon.

www.DownloadSoftware.iR

Aligning Blocks

To align two blocks:

1 Click the stream between the two blocks.

Tip: You can also select one or more streams and press CTRL + B.

2 Click with the right mouse button on the stream.

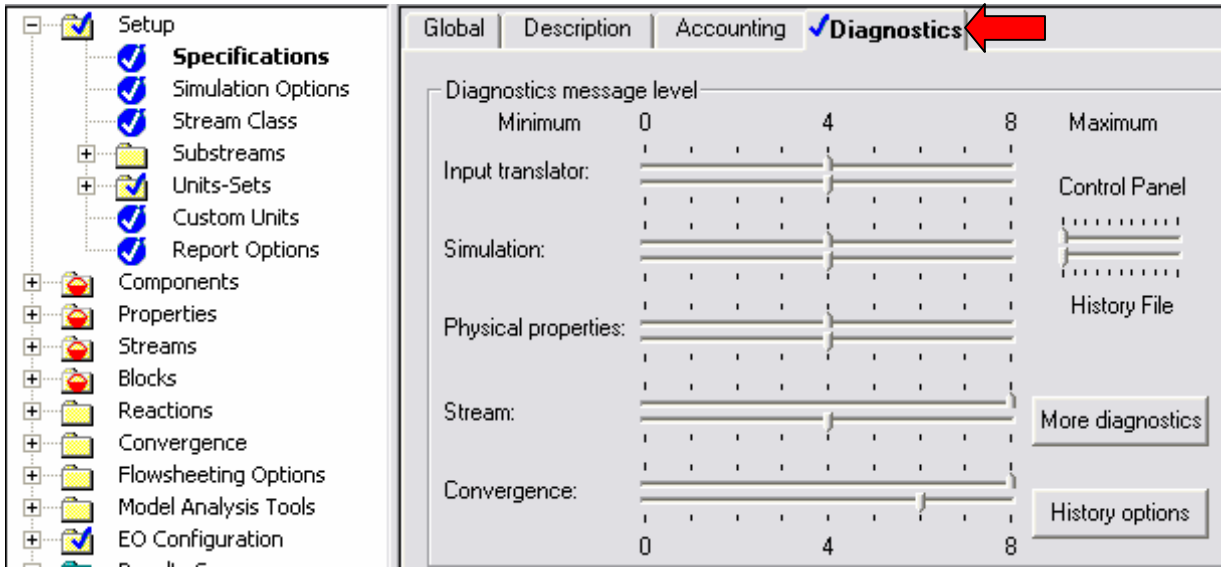
3 From the menu that appears, click Align Blocks.

www.DownloadSoftware.iR

Diagnostic Sheet

Aspen Plus writes progress and diagnostic messages to the Control Panel and the History File during a run. The default for all types of messages is level 4. You can control the amount of diagnostic information produced, although it is generally not necessary. It is sometimes necessary to increase the level in order to converge a flowsheet or to debug user Fortran.

Use this sheet to override defaults for simulation history diagnostic message levels and Control Panel message levels printed. You can set message levels and diagnostics for input translation, simulation, physical properties, stream, convergence, Fortran variables, cost and economics.



Tip: You can override the global defaults locally, using the Block Options sheets for streams, blocks, property tables, and other objects that perform calculations.

www.DownloadSoftware.iR

انواع جریانها در نرم افزار ASPEN

۱. **جریان مواد (Pseudo و Real)**

a) جریان واقعی مواد (خوراک، محصول، بین تجهیزات و ...)

b) شبه جریانها (جریانهای درونی داخل Block)

۲. **جریان انرژی:** + **انرژی ورودی** - **انرژی خروجی**

۳. **جریان کار** : + **بلوک در حال کار** − **انجام کار بر روی بلوک**

نکته ۱: جریانهای شبه محصول در بلوک های PetroFrac، RadFrac، MultiFrac، RateFrac، Extract و CCD قابل تعریف است.

نکته ۲: تعریف جریانهای شبه محصول با تکمیل صفحات Pseudo Stream در بلوکهای فوق صورت می گیرد.

www.DownloadSoftware.iR

Specifying Material Streams

For all material process feed streams, you must specify:

- Flow rate
- Composition
- Thermodynamic condition

www.DownloadSoftware.iR

Possible Stream Thermodynamic Condition Specifications

This table describes possible stream thermodynamic condition specifications:

Phases	Free Water	State Specification	Stream Properties Calculated by
Vapor only	No	Temperature, Pressure	Vapor phase thermodynamic calculations
Solid only	No	Temperature, Pressure	Solid phase thermodynamic calculations
Liquid only	No	Temperature, Pressure	Liquid phase thermodynamic calculations
Liquid-freewater	Yes	Temperature, Pressure	Liquid phase thermodynamic calculations with free water considered
Vapor-liquid or vapor-liquid-liquid	No	Temperature, Pressure	TP flash
Vapor-liquid or vapor-liquid-liquid	No	Temperature, Molar Vapor fraction	TV flash
Vapor-liquid or vapor-liquid-liquid	No	Pressure, Molar Vapor fraction	PV flash
Vapor-liquid-freewater	Yes	Temperature, Pressure	TP flash with free water considered
Vapor-liquid-freewater	Yes	Temperature, Molar Vapor fraction	TV flash with free water considered
Vapor-liquid-freewater	Yes	Pressure, Molar Vapor fraction	PV flash with free water considered

www.DownloadSoftware.iR

جریان مواد

مشخص کردن جریان مواد:

- دبی(Flow rate)
- درصد ترکیبات(Composition)
- شرایط ترمودینامیکی (۲ متغیر از ۳ متغیر: T, P, vapor fraction)

آشنایی با منوی Tools- Options- Flowsheet

نکات مربوطه:

1. **Steram Class**
2. **Source and Destination**
3. **Stdvol-flow: 1 atm & 60°F**
4. **Flash Option à Valid Phase (Base of Flash Calculation)**

www.DownloadSoftware.iR

جریان مواد (ادامه)

مثال ۱:

جریان خوراکی با دبی مولی 2 lbmol/hr **از هیدروژن و** 3 lbmol/hr

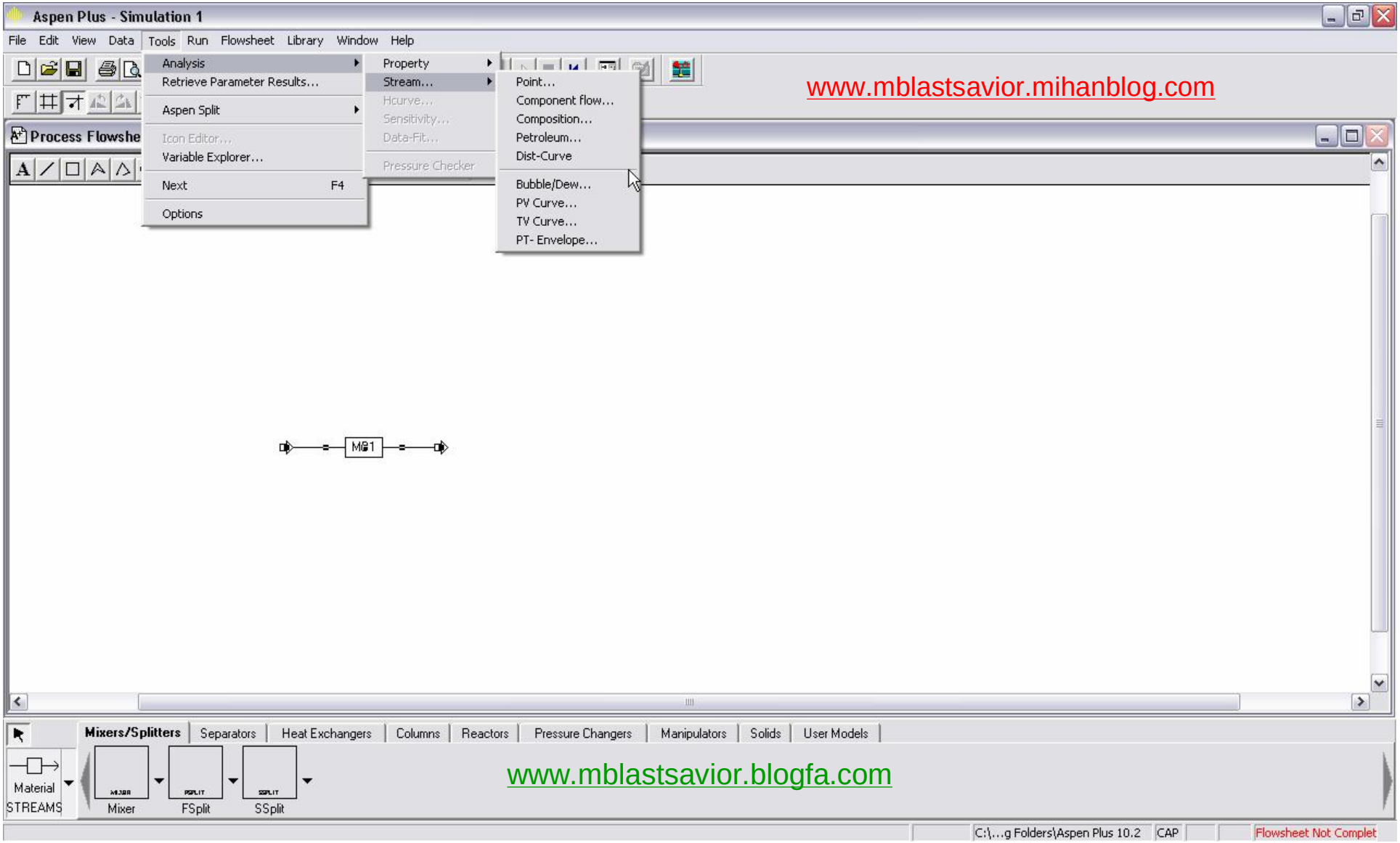
از متان در دمای ۱۰۰ °F **در فشار** 1atm **و** ۱۴٫۷ psia **را تعریف نمایید.**

www.DownloadSoftware.iR

رسم نمودارهای خواص جریان
Tools/Analysis/Stream

• **Point**	تولید و نمایش خواص نقطه ای جریان انتخاب شده
• **Component Flow**	نمایش میزان مواد موجود در جریان
• **Composition**	نمایش ترکیب درصد مواد موجود در جریان
• **Petroleum**	نمایش خواص نفتی جریان
• **Dist-Curve**	نمایش Dist-Curve
• **Bubble/Dew**	نمایش نمودار PT در کسر حجمی های مختلف
• **PV Curve**	نمایش نمودار PV
• **TV Curve**	نمایش نمودار TV
• **PT- Envelope**	نمایش نمودار PT- Envelope

www.DownloadSoftware.iR



www.mblastsavior.mihanblog.com

www.mblastsavior.blogfa.com

www.DownloadSoftware.iR

رسم نمودارهای خواص جریان (ادامه)

مثال ۲:

جریانی شامل مخلوط مساوی از اتان و هپتان در دمای ۲۷۰°F در نظر بگیرید.

نمودار PV (فشار –کسر بخار) را رسم کنید. محدوده فشار را از 14.7 تا ۱۴۷ psia در نظر بگیرید.

سپس نمودار PT را نیز در کسر بخارهای ۰,۲، ۰,۴، ۰,۶، ۰,۸ و ۱,۰ رسم نمایید.

www.DownloadSoftware.iR

Transfer Blocks

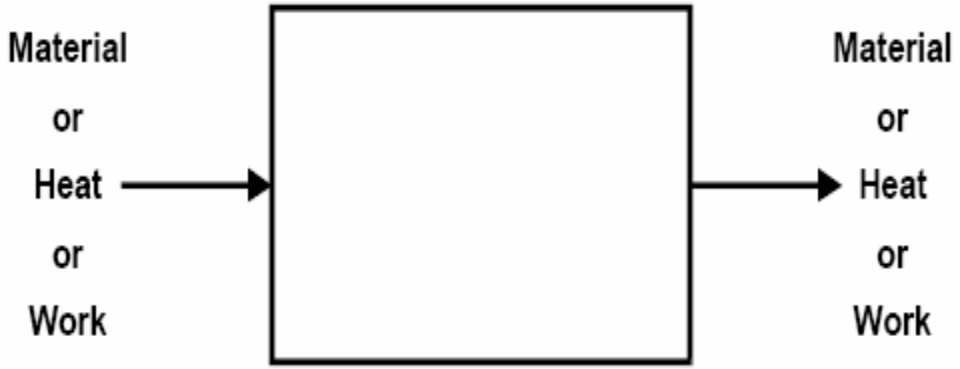
- Whole streams
- Stream composition and flow rate
- Any flowsheet variable (for example, block variables)

www.DownloadSoftware.iR

Manipulators

Model	Description	Purpose	Use For
Mult	Stream multiplier	Multiplies component and total flow rates by a factor	Scaling streams by a factor
Dupl	Stream duplicator	Copies inlet stream into any number of duplicate	Duplicating feed or internal streams

Flowsheet Connectivity for Mult



The outlet stream must be the same type (material, heat, or work) as the inlet stream.

This factor has to be positive for material streams. You can specify either a positive or negative factor for heat or work streams, thus allowing a change in direction for the heat or work flow.

www.DownloadSoftware.iR

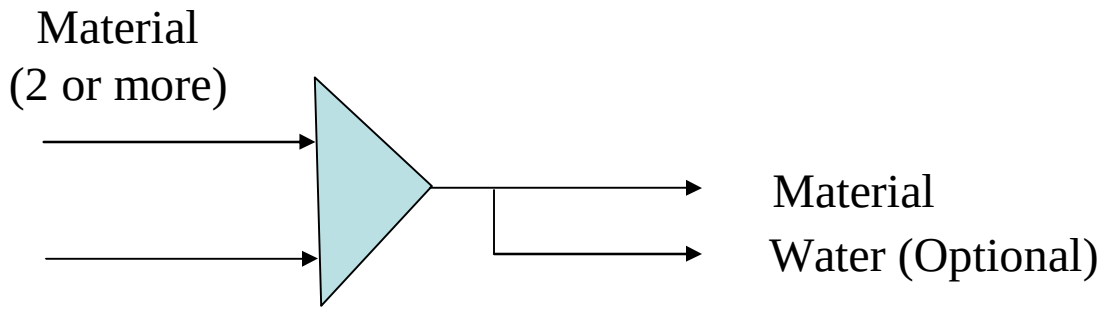
Flowsheet محیط

Mixer and Splitter

www.DownloadSoftware.iR

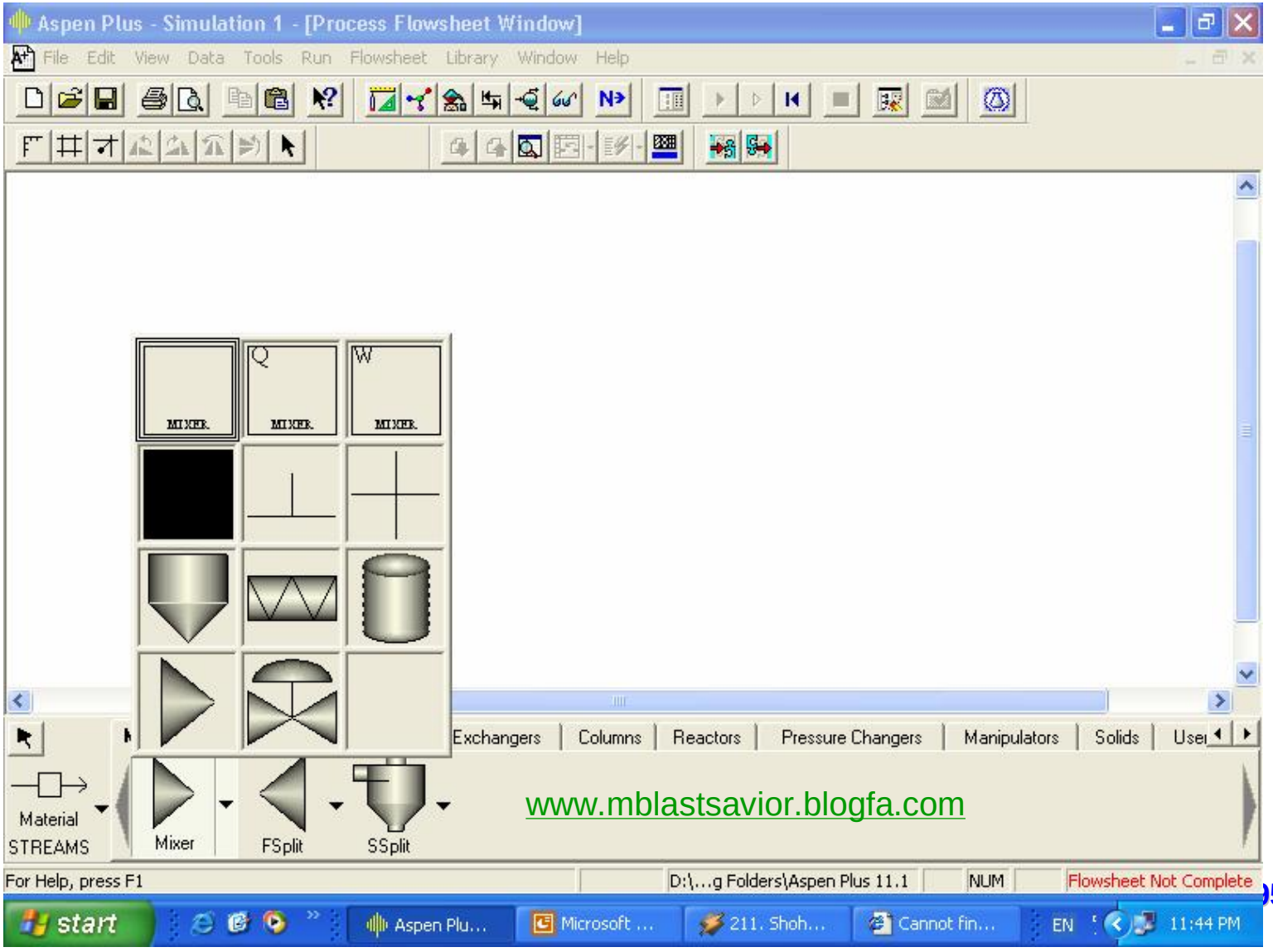
مخلوط کن ها (Mixer)

هدف: برای مخلوط کردن دو یا چند جریان ماده و گرما



www.DownloadSoftware.iR

انواع مدلهای Mixer در نرم افزار



www.DownloadSoftware.iR

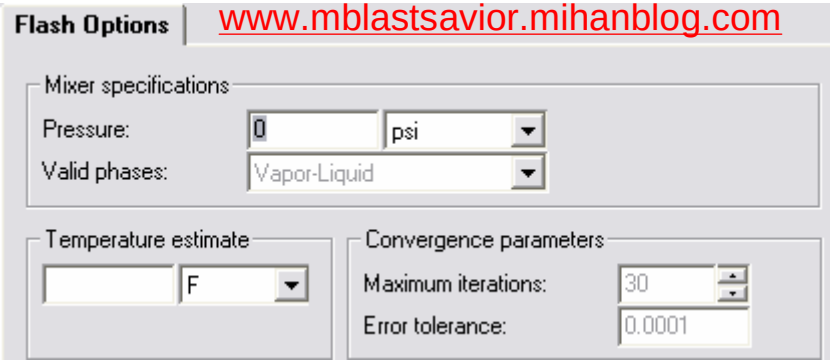
Mixer واردکردن اطلاعات

Pressure:

Absolute Press.:

If + à outlet pressure

If - à Pressure drop



Gauge Press.:

If +

If - } **Outlet Pressure**

Valid Phase: Outlet Phase

Block Option این صفحه تقریباً در تمام تجهیزات فرآیندی وجود دارد.

برای تغییر(prpperty method)

www.DownloadSoftware.iR

You can select the following valid phases:

Valid Phase	Solids?	Number of phases?	Free Water?	Phase?
Vapor-Only	Yes or no	1	No	V
Liquid-Only	Yes or no	1	No	L
Vapor-Liquid	Yes or no	2	No	–
Vapor-Liquid-Liquid	Yes or no	3	No	–
Liquid Free-Water †	Yes or no	1	Yes	–
Vapor-Liquid Free-Water †	Yes or no	2	Yes	–
Solid-Only	Yes	1	No	S

When mixing m
pressure or pressure drop. If you specify pressure drop, Mixer determines the minimum of the inlet stream pressures, and applies the pressure drop to the minimum inlet stream pressure to compute the outlet pressure. If you do not specify the outlet pressure or pressure drop, Mixer uses the minimum pressure from the inlet streams for the outlet pressure.

Mixer performs an adiabatic calculation on the product to determine the outlet temperature,

www.DownloadSoftware.iR

دو جریان Feed 1 و Feed 2 با مشخصات زیر در یک Mixer مخلوط می شوند. مشخصات جریان های خروجی از جداکننده را به صورت جدول نتایج در صفحه فلوشیت نمایش دهید ؟

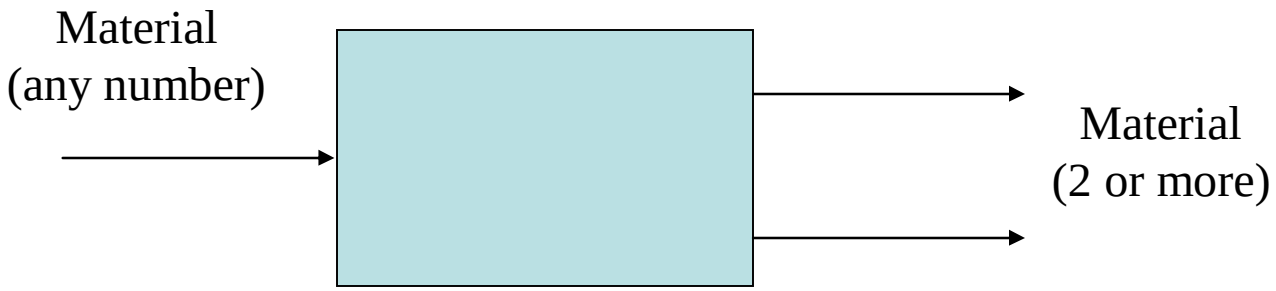
	FEED 1	FEED 2
دما $(^{\circ}C)$	۱۰	-۲۰
فشار (Kpa)	۴۱۰۰	۴۰۰۰
دبی مولی $(Kmol/hr)$	۳۵	۲
% mol C_1	۰/۱۹	۰/۳۵
% mol C_2	۰/۱۵	۰/۲۱
% mol C_3	۰/۱	۰/۱۵
% mol i-C_4	۰/۱	۰/۱۱
% mol n-C_4	۰/۱۱	۰/۱۳
% mol i-C_5	۰/۰۸	۰/۰۵
% mol n-C_5	۰/۰۹	۰/۰۷
% mol n-C_6	۰/۰۹	۰/۰۲
% mol n-C_7	۰/۰۵	۰/۰۰۵
% mol n-C_8	۰/۰۴	۰/۰۰۵

www.DownloadSoftware.iR

FSpilt (flow splitters) and SSplit

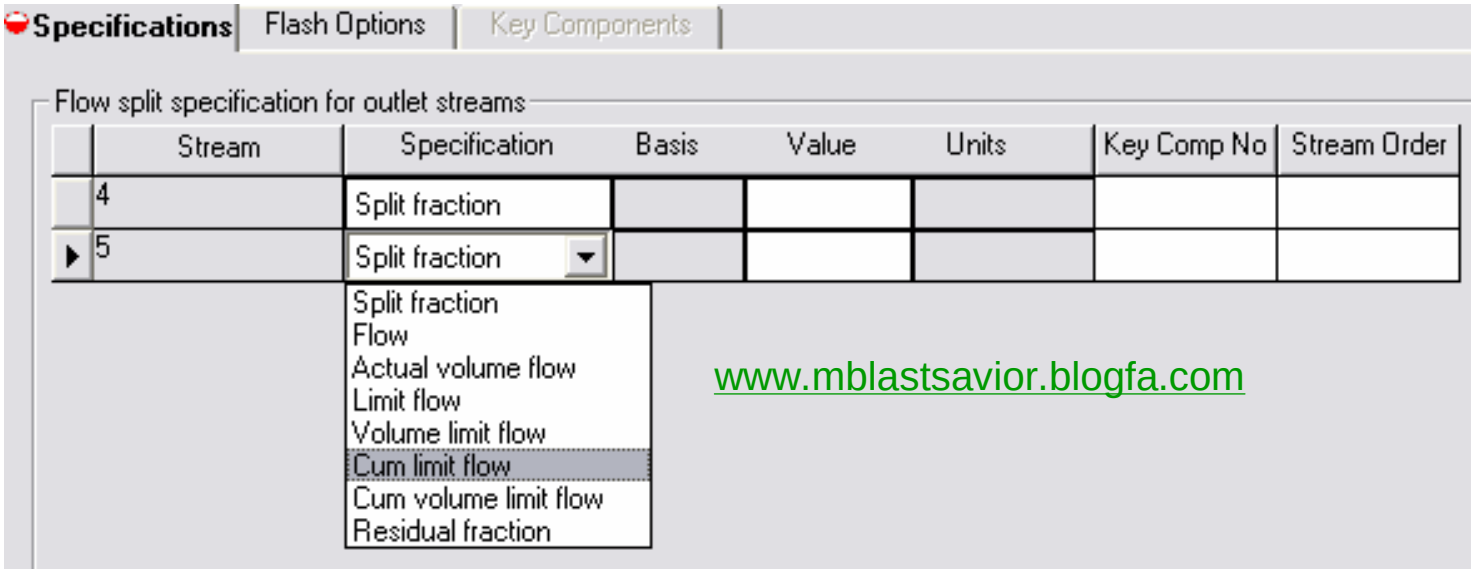
هدف: برای تقسیم کردن جریانات ورودی به چندین جریان در خروجی

SSplit در فرآیندهای حاوی مواد جامد نیز استفاده می شود.



All outlet streams have the same composition and conditions as the mixed inlet.
flow splitters, such as bleed valves.
FSplit cannot split a stream into different types. For example, FSplit cannot split a material stream into a heat stream and a material stream.

www.DownloadSoftware.iR



حداقل باید دبی (n-1) جریان در خروجی تعریف شود.(n: تعداد کل جریان ها در خروجی)

دبی مورد نظر می تواند جرمی، مولی و یا حجمی باشد.

To model a splitter where the composition and properties of the output streams can differ, use a Sep block or a Sep2 block.

www.DownloadSoftware.iR

key components

To specify the flow rate of a component or group of components in an outlet stream, specify a group of key components and the total flow rate for the group (the sum of the component flow rates) on the Input Specifications sheet, and define the key components in the group on the Input KeyComponents sheet.

Outlet streams have the same composition as the mixed inlet stream. For this reason, when you specify the flow rate of a key component, the total flow rate of the outlet stream is greater than the flow rate you specify.

www.DownloadSoftware.iR

مدلهای مختلف SSplit

Name	Models
CCD	Multistage solids washers that recover dissolved components from an entrained liquid of a solids stream
CFuge	The separation of liquids from solids
Crusher	Breaking solid particles in a crusher
Cyclone	Solids separation from a gas stream
Filter	The separation of liquids from solids
Screen	Separating solid particles in a screen
Vscrub	Solids separation from a gas stream

www.DownloadSoftware.iR

Flowsheet محیط

Separators

www.DownloadSoftware.iR

Separators

هدف: بررسی انواع مخازن جداکننده دو فازی و سه فازی **شامل:**

1. Flash2
2. Flash3
3. Decanter
4. Sep
5. Sep2

www.DownloadSoftware.iR

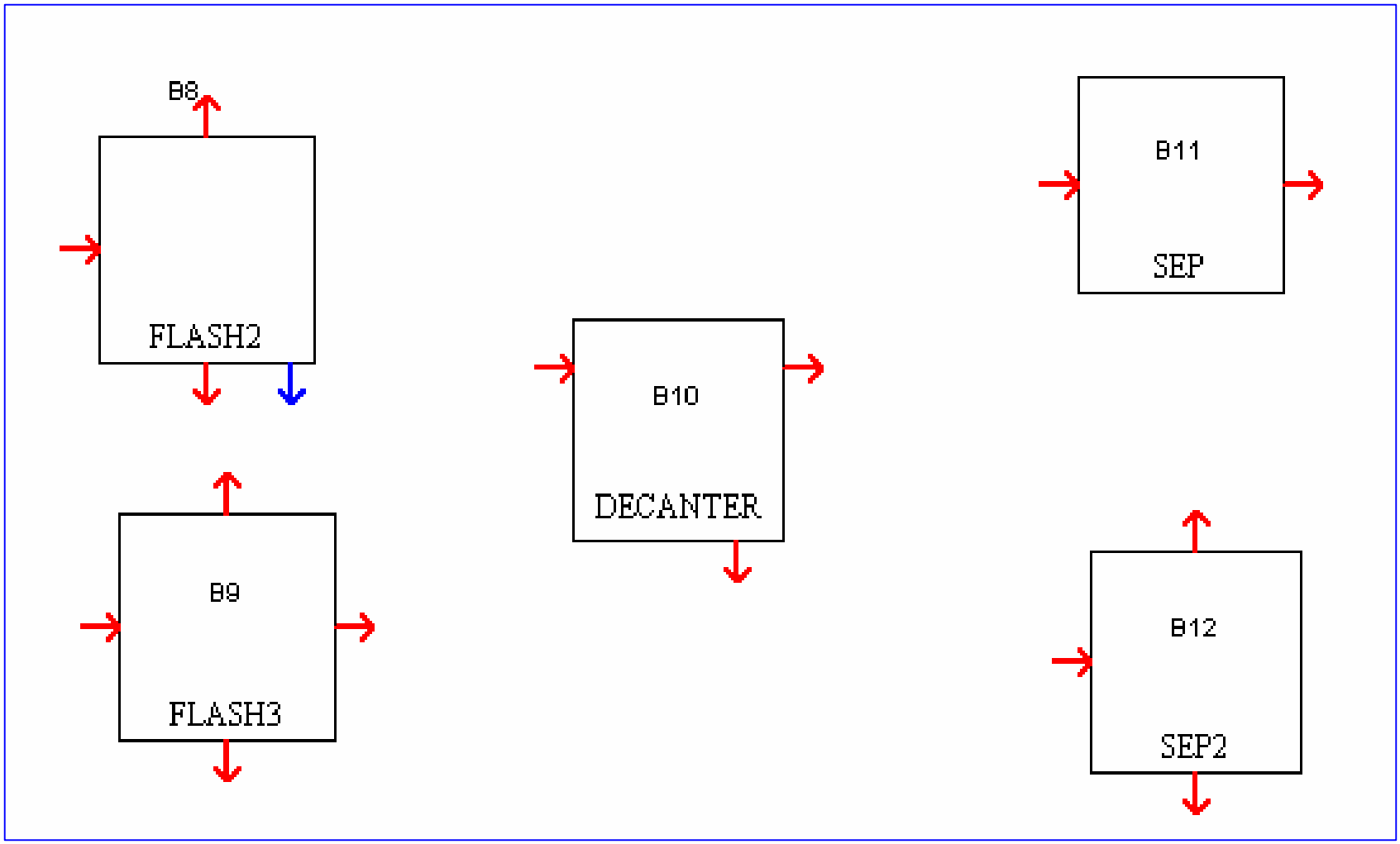
Choosing the Right Unit Operation Model

Select appropriate unit operation models from the following table:

Type	Model	Description
Mixers/Splitters	Mixer	Stream mixer
	FSplit	Stream splitter
	SSplit	Substream splitter
Separators	Flash2	Two-outlet flash
	Flash3	Three-outlet flash
	Decanter	Liquid-liquid decanter
	Sep	Multi outlet component separator
	Sep2	Two-outlet component separator

www.DownloadSoftware.iR

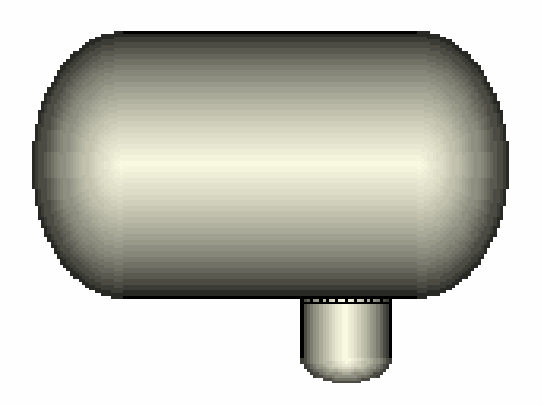
انواع مدلهای موجود در قسمت Separator

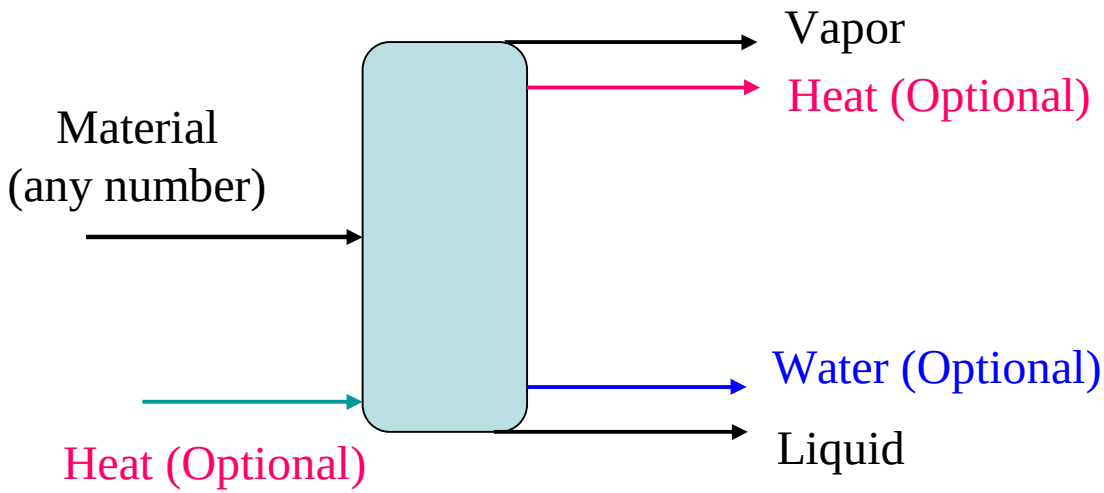


www.DownloadSoftware.iR

Flash2

هدف: شبیه سازی انواع FD دوفازی و سه فازی (مایع-آب-بخار)





www.DownloadSoftware.iR

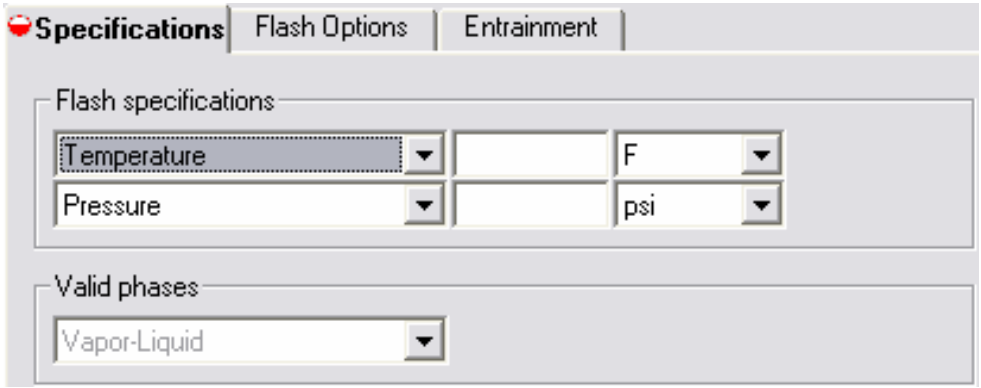
وارد کردن اطلاعات Flash2

۱. وارد کردن ۲ متغیر از ۳ متغیر موجود در صفحه Flash Spec

۲. اگر فلاش در حالت آدیاباتیک است، مقدار گرما برابر با صفر می باشد.

۳. تعیین میزان مایع خروجی با فاز بخار در صفحه Entrainment

۴. چگونگی تعیین فشار مطابق با توضیحات ارائه شده در Mixer می باشد.

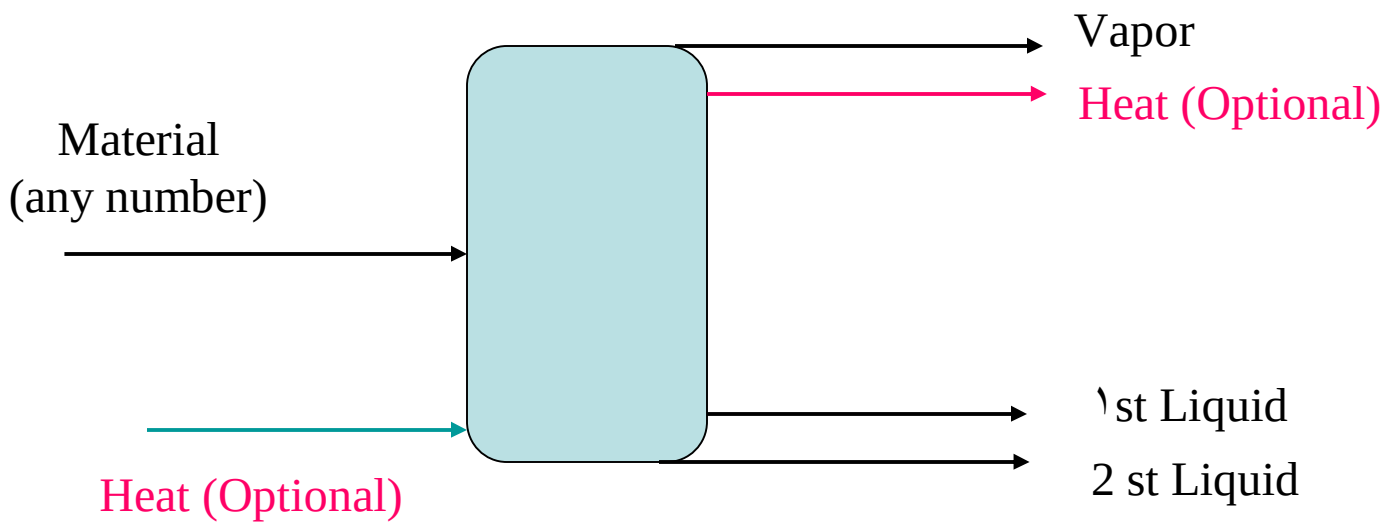


www.DownloadSoftware.iR

Flash3

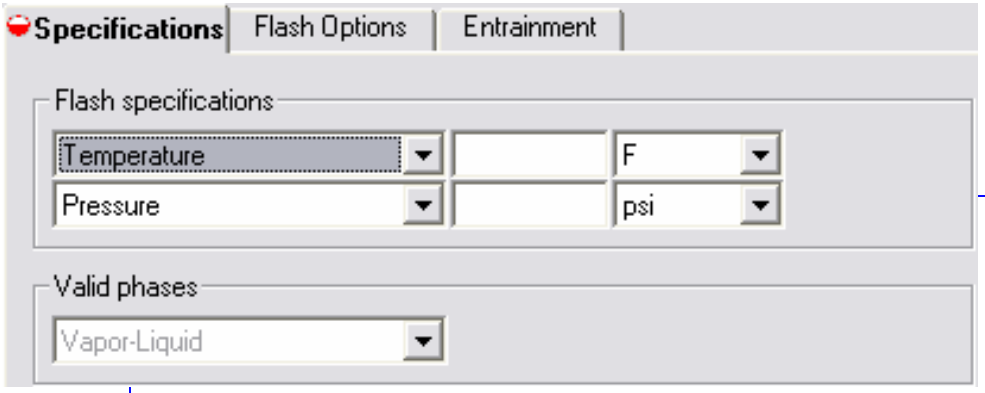
هدف:

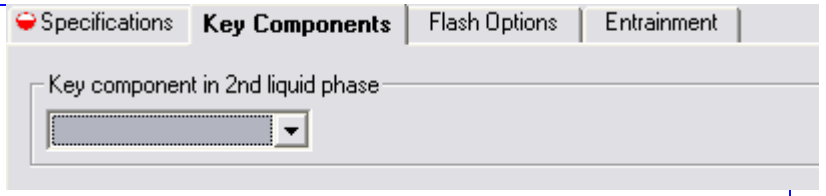
شبیه سازی انواع دکانتورها و جداکننده های تک مرحله ای با دو فاز مایع



www.DownloadSoftware.iR

Flash3 وارد کردن اطلاعات





۱. وارد کردن ۲ متغیر از ۳ متغیر موجود در صفحه Flash Spec

۲. اگر فلاش در حالت آدیاباتیک است، مقدار گرما برابر با صفر می باشد.

۳. تعیین میزان مایع خروجی با فاز بخار در صفحه Entrainment

۴. چگونگی تعیین فشار مطابق با توضیحات ارائه شده در Mixer می باشد.

۵. انتخاب ترکیب اصلی در فاز مایع دوم در صفحه Key Component

www.DownloadSoftware.iR

مثال ۳

خوراک زیر وارد جداکننده سه فازی می شود. با استفاده ازمعادله PR و با انتخاب آب به عنوان ماده اصلی در فاز دوم، خروجی های سیستم را محاسبه نمایید.

T (°C)	20		i-C4 frac.	0.08
P (kpa)	200		n-C4 frac.	0.12
(kgmol/hr)	100		i-C5 frac.	0.12
C1 frac.	0.1		n-C5 frac.	0.13
C2 frac.	0.03		H_2O frac.	0.4
C3 frac.	0.04		www.mblastsavior.blogfa.com	

www.DownloadSoftware.iR

Viewing the Status of the Simulation

You can view the progress of a simulation in:

- The Status Bar
- Control Panel Status Messages

Viewing Simulation Status Using the Status Bar

The main window status bar shows the progress of a running simulation and the current status of the simulation when it is not running. Status messages appear on the right side of the status bar.

This table shows the meaning of the status messages:

Status message	Meaning
Flowsheet Not Complete	Flowsheet connectivity is incomplete. To find out why, click the Next button in the toolbar.
Required Input Not Complete	Input specifications for the run are incomplete. Click Next on the toolbar to find out how to complete the input specifications, and to go to sheets that are incomplete.
Required Input Complete	The required input specifications for the run are complete. You can run the simulation or enter optional specifications.
Ready to Execute Block	The simulation is paused because you clicked the Stop or Step buttons, or a stop point you set was encountered. Click the Step or Run buttons to continue calculations.
Results Present	The run has completed normally, and results are present.
Results With Warnings	Results for the run are present. Warning messages were generated during the calculations. See the Control Panel for messages.
Results With Errors	Results for the run are present. Error messages were generated during the calculations. See the Control Panel for messages.
Input Changed	Results for the run are present, but you have changed the input since the results were generated. The results may be inconsistent with the current input.

www.DownloadSoftware.iR

Generating an Aspen Plus Report File

You can generate a report file documenting the complete input specifications and simulation results for your Aspen Plus run. Use

To generate a report:

- From the View menu, click Report.

To save the entire report file from an interactive run:

1 From the File menu, click Export.

2 In the Save As Type box, select Report files.

www.DownloadSoftware.iR

To display

The results of a specified unit operation block

The results of a specified Convergence block

The results of a specified Sensitivity block

The results of a specified Transfer block

The results of a specified Calculator block

The results of a specified stream or of all streams

The results of a specified Balance block

The results of a specified Pressure relief block

The results of a specified Regression block

The entire Report file

Table of contents for the report

Material and energy balance for the flowsheet

The connecting streams (feeds and products) for a selected block

www.DownloadSoftware.iR

Checking the Simulation History

Aspen Plus keeps a detailed history of your simulation run in a file that you can view with your text editor. Input specifications, warning messages, error messages, and block-by-block convergence information are available.

Activating and Deactivating Blocks

Various simulation objects can be activated and deactivated. When deactivated, they still need to be completely specified to run the problem, but they are ignored during simulation. Blocks and Streams can be deactivated and activated by clicking the right mouse button on the flowsheet object, and choosing Deactivate/Activate. The following objects can be deactivated and activated from the data browser tree view right mouse button menu:

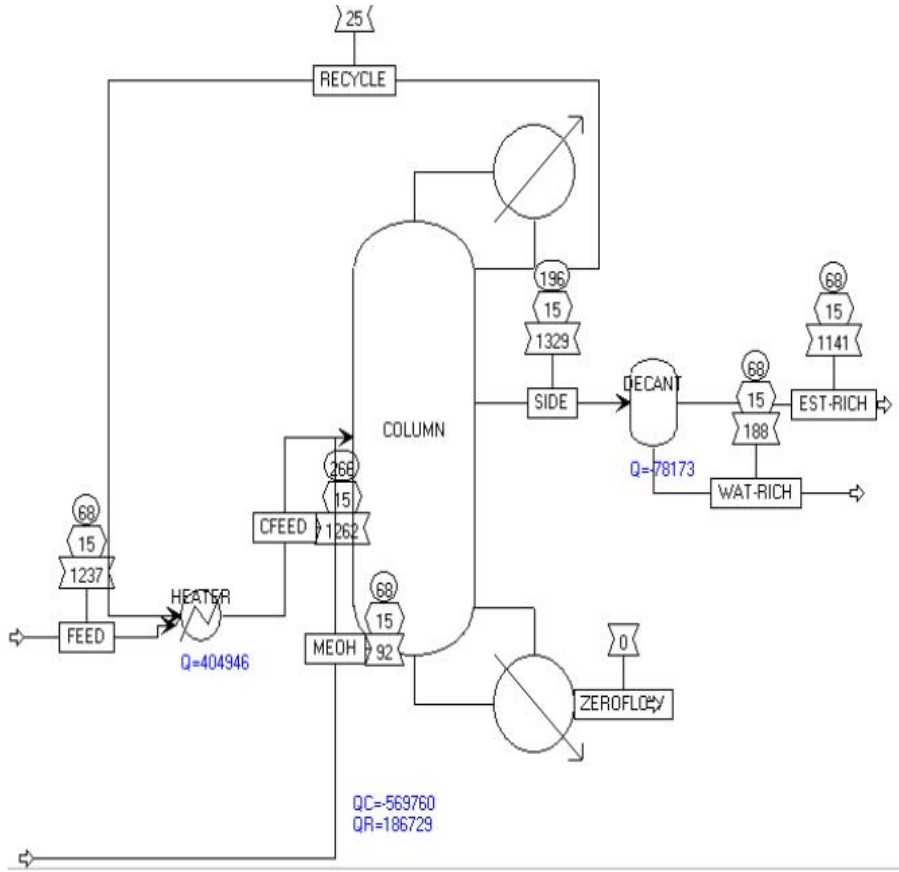
- Blocks and Streams
- Convergence blocks
- Sequence
- Most Flowsheeting Options: Design-Spec, Calculator, Transfer, Balance, and Pres-Relief blocks
- Most Model Analysis Tools: Sensitivity, Optimization, Constraint, and Case-Study blocks
- Regression
- Properties Analysis (Prop-Table)

www.DownloadSoftware.iR

Global Data

This data	Is displayed
Stream temperature, pressure, mass flow rate, volume, molar flow rate, and vapor fraction	In symbols attached to stream IDs
Heat stream duty	In symbols attached to stream IDs
Work stream power	In symbols attached to stream IDs
Block heat duty and power	Next to the block icon

:xample where Global data is turned on to show
:, pressure, and flow rate for each stream.

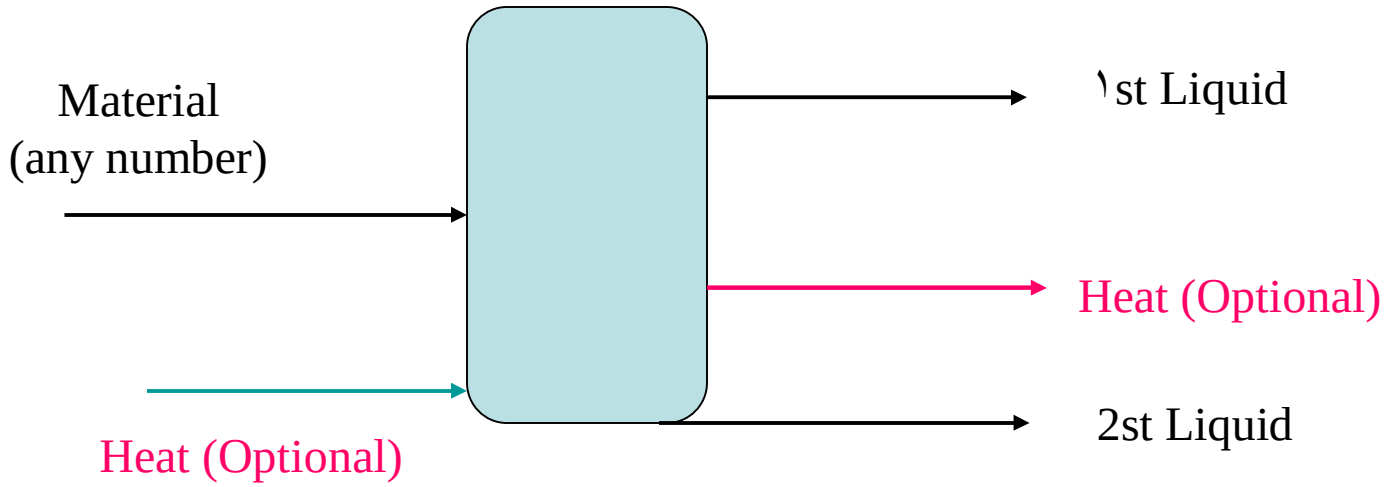


www.DownloadSoftware.iR

Decanter

هدف:

شبیه سازی انواع دکانتورها و جداکننده های تک مرحله ای بدون فاز بخار (توانایی انجام محاسبات تعادلی مایع-مایع و مایع-آب)



www.DownloadSoftware.iR

Decanter

- **شرایط کاری دکانتور از لحاظ حرارتی**

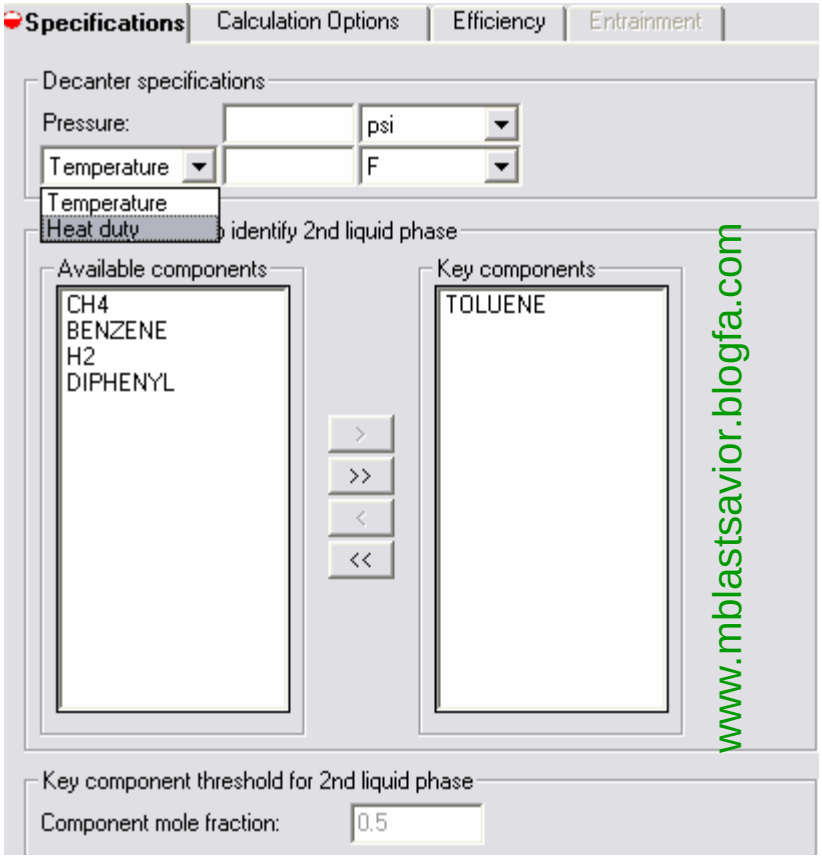
۱. آدیاباتیک
۲. با فلوی حرارتی ثابت
۳. در دمای ثابت

انتخاب ترکیب اصلی در فاز دوم به عنوان Key Component

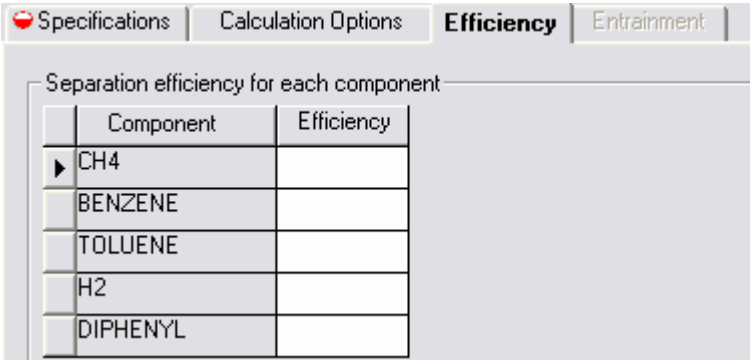
تعیین بازده جداسازی هر Component در صفحه Efficiency

نکته: اگر محاسبات از نوع مایع-آب است، نمی توان بازده مواد را وارد نمود.

www.DownloadSoftware.iR



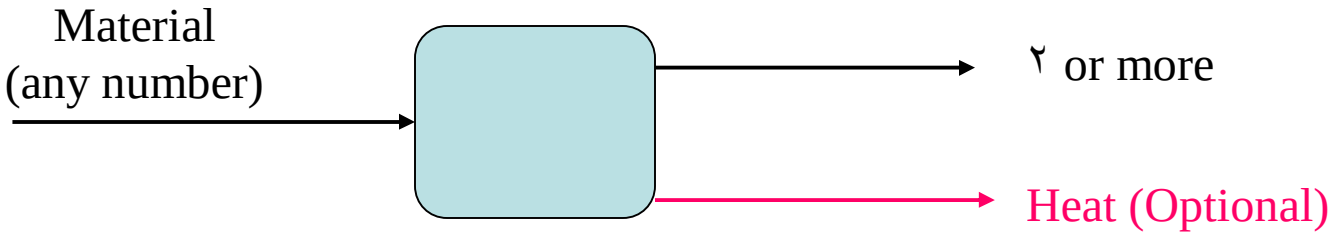
www.mblastsavior.blogfa.com



www.DownloadSoftware.iR

Sep

هدف:
تعیین جزئیات جداسازی در مواردی که میزان جداسازی هر ترکیب در جریانهای خروجی مشخص است.



نکته ۱: اگر ترکیب درصد جریانهای خروجی Sep همگی یکسانند، میتوان به جای Sep از FSplit استفاده نمود.

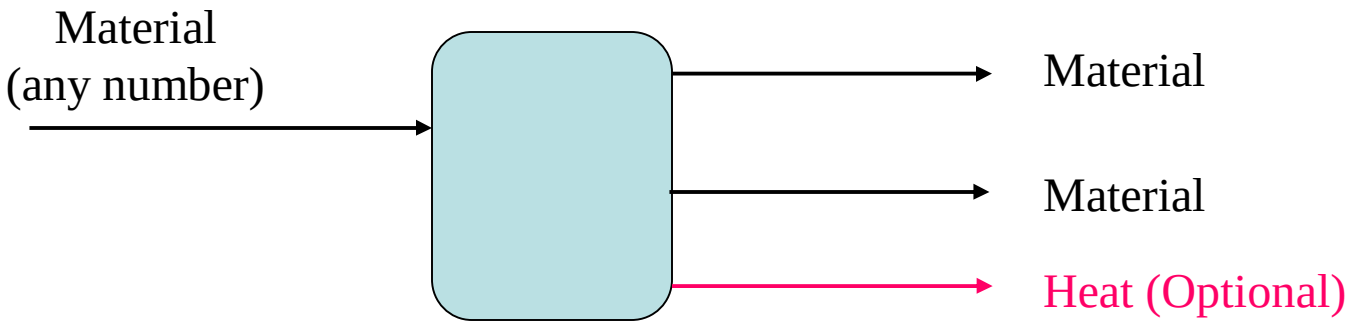
نکته ۲: این مدل دقیق نیست!

www.DownloadSoftware.iR

Sep2

هدف:

۱. تقسیم جریان ورودی به ۲ جریان در خروجی
۲. توانایی گرفتن خلوص هر ترکیب در خروجی
۳. امکان استفاده به جای برجهای تقطیر و جذب به عنوان یک Run مقدماتی
۴. اگر ترکیب درصد و شرایط خروجی هر ۲جریان یکسانندآنگاه FSplit هم قابل استفاده است.



www.DownloadSoftware.iR

مثال ٤

خوراک زیر وارد دکانتور می شود و خروجی ۲ فاز (آلی و آبی) می باشد.
فاز آبی شامل ۹۰ درصد از آب ورودی و ۳۰٪ فورفورال ورودی و ۵۰٪
اسید استیک ورودی می باشد. سایر ویژگیهای خروجی های سیستم را محاسبه نمایید.

T (°C)	۲۵
P (atm)	۱
(kgmol/hr)	50
Water	0.4
Acetic Acid	0.2
Furfural	0.4

www.DownloadSoftware.iR

Flowsheet محیط

Heat Exchanger

www.DownloadSoftware.iR

Heat Exchanger

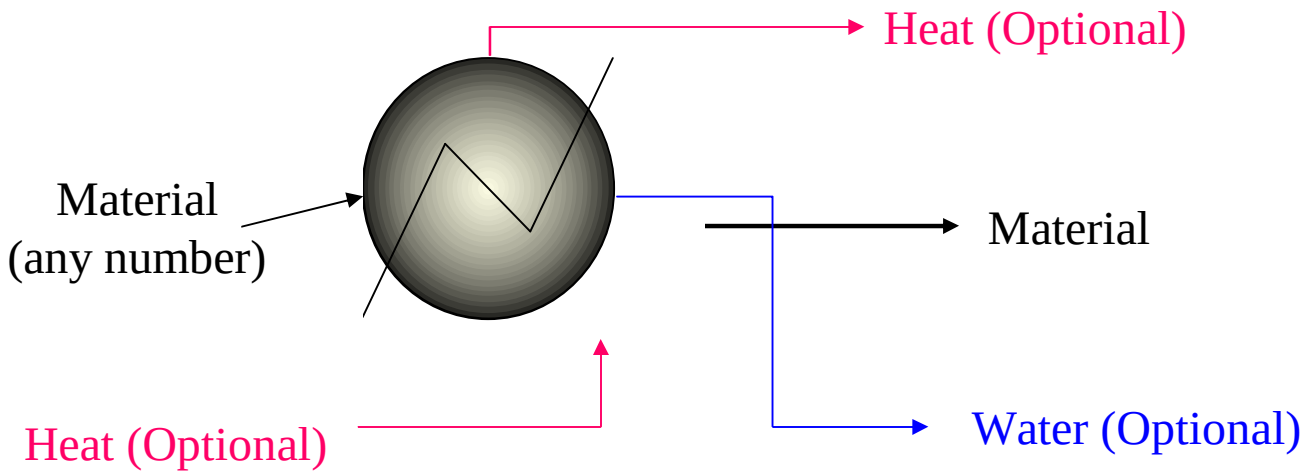
هدف: بررسی انواع مبدلهای حرارتی **شامل:**

1. **Heater**
2. **HeatX**
3. **MHeatX**
4. **Hetran**
5. **Aerotran**
6. **HXFlux**
7. **HTRIXIST**

www.DownloadSoftware.iR

Heater

هدف: **Thermal and Phase State Changer**



www.DownloadSoftware.iR

کاربردهای Heater

You can use Heater to model:

1) **Heaters or coolers**

2) **Valves when you know the pressure drop**

3) **You can also use Heater to set or change the thermodynamic condition of a stream.**

The heat duty specification may be provided by a heat stream from another block.

www.DownloadSoftware.iR

Heater- Input Specification

وارد کردن ۲ مورد از اطلاعات زیر:

- دمای خروجی
- فشار خروجی
- افت فشار
- کسر بخار خروجی
- گرمای لازم
- میزان تغییرات دما
- درجه Superheat شدن
- درجه Subcooled شدن

www.DownloadSoftware.iR

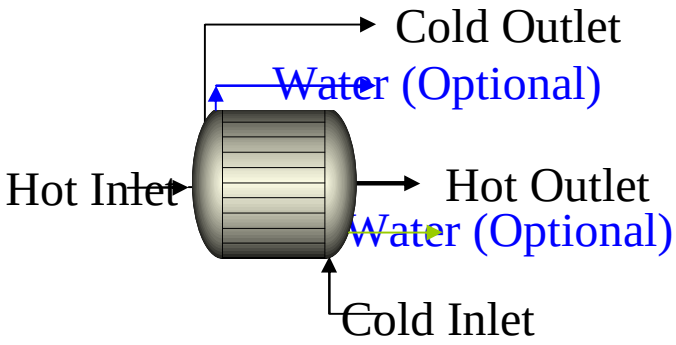
Heater - Hcurves

- امکان بررسی خواصی که در Prop-Set تعریف شده اند. (مانند دما، فشار، انرژی و کسر بخار)
- انتخاب یکی از متغیرهای دما، کسر بخار یا گرما به عنوان متغیر مستقل در صفحه Set up و رسم گرافهای مربوطه

www.DownloadSoftware.iR

HeatX

هدف: انجام محاسبات مبدلهای دو جریانه
در ۲ حالت Shotcut و Detailed



www.DownloadSoftware.iR

کاربردهای HeatX

You can use HeatX to model:

1) **Design (Thermal & Mechanical)**

2) **Rating (Last HX is *OK* now?)**

3) **Simulation (Feed & A *are OK* à Outlet Calculation)**

Shortcut:: Design & Simulation

Detailed:: Rating & Simulation

www.DownloadSoftware.iR

اطلاعات مورد نیاز در Shortcut-Design

- **Specification**: اطلاعات مورد نیاز بر اساس پنجره های خالی
- **Pressure Drop**: افت فشار برای Hot Side و Cold Side
  - محاسبه افت فشار با توجه به ساختمان مبدل در حالت Detailed
  - محاسبه افت فشار به روش flow-dependent

Constant K in the PML flow-dependent pressure drop correlation

*dP = K (mass flow rate**2)/density*

*= K (mass flow rate**2)(0.5(1/inlet density + 1/outlet density))*

www.DownloadSoftware.iR

اطلاعات مورد نیاز در Shortcut-Design (ادامه)

- **U Methods**: مبدل ناهمسو ß F=1

مقدار پیش فرض نرم افزار ۰،۸

$$Q = UAF\Delta T_{LMTD}$$

§ **روشهای محاسبه U در حالت Shortcut**

1) مقدار ثابت

۲) با توجه به نوع جریان گرم و سرد

۳) استفاده از تابع توانی

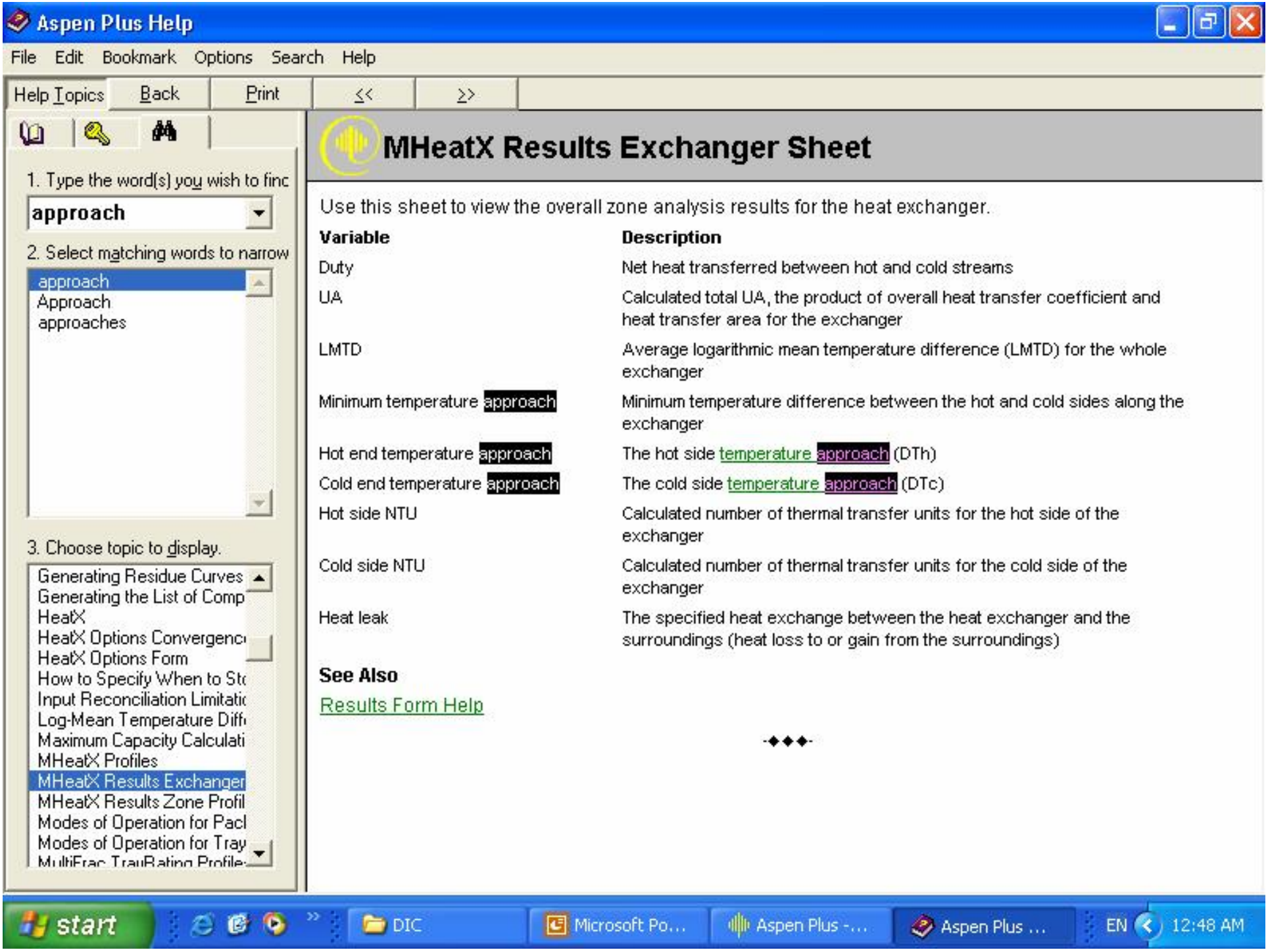
۴) با توجه به هندسه مبدل

www.DownloadSoftware.iR

اطلاعات مورد نیاز در حالت Shortcut-Simulation

- **Simulation:**
  - مطابق با قسمتهای قبلی
  - وارد کردن سطح انتقال حرارت در صفحه Setup-Specification
  - حداقل Temperature Approach
- **خلاصه:**
  - T خروجی با توجه به روش محاسباتی
  - P با توجه به قسمت Pressure Drop
  - Q با توجه به دبی جریان ورودی

www.DownloadSoftware.iR



www.DownloadSoftware.iR

اطلاعات مورد نیاز در حالت Detailed

مطابق با قسمتهای قبل به استثنای

- امکان محاسبه افت فشار با توجه به ساختمان مبدل و روابط موجود

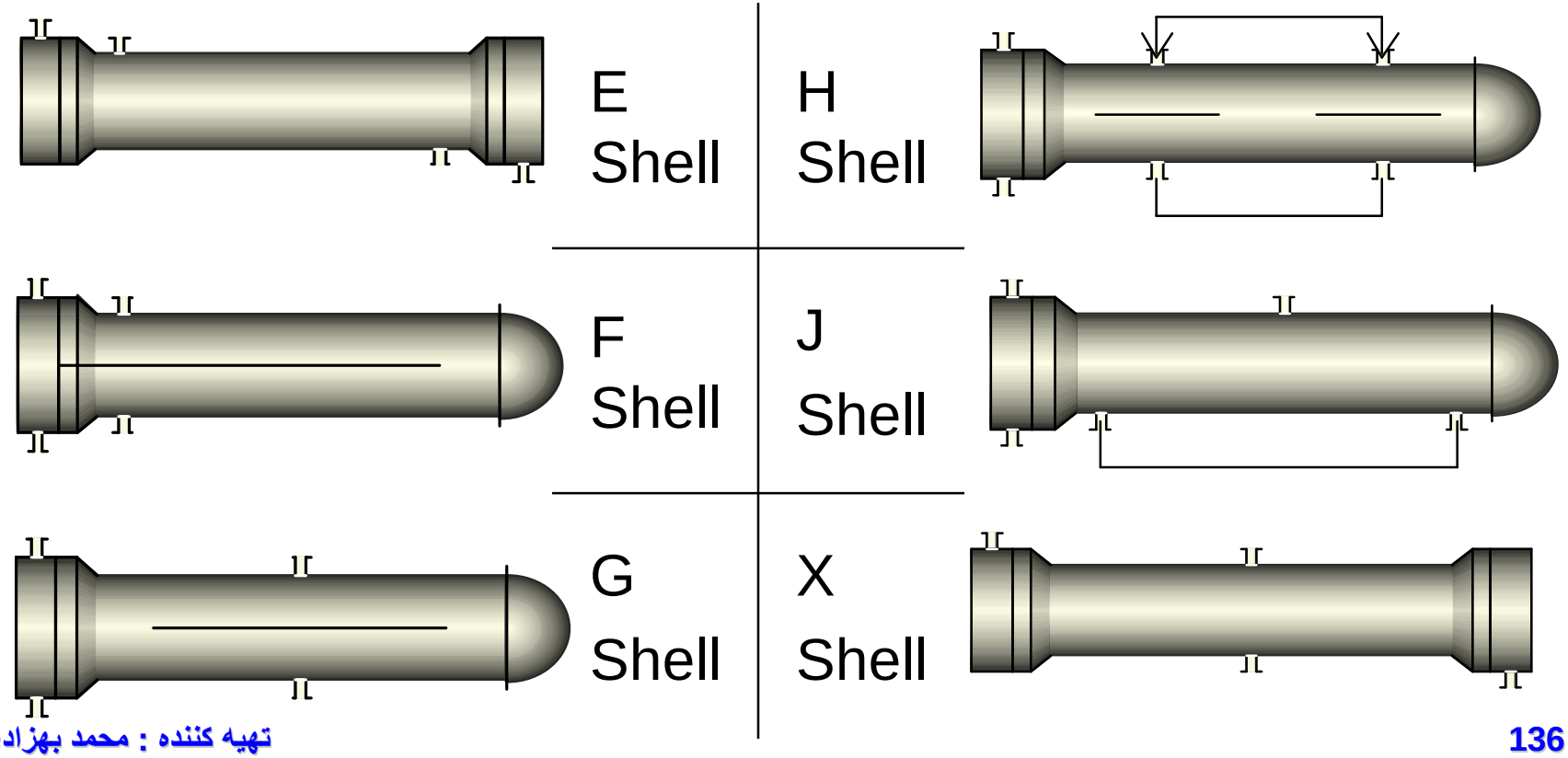
- امکان استفاده از ۲ روش دیگر برای محاسبه U
  - با توجه به ساختمان مبدل
  - با استفاده از ضرایب فیلمی دو طرف (تکمیل صفحه مربوطه)

- تکمیل صفحه Geometry
  - نوع Shell با توجه به استاندارد TEMA
  - تعداد Pass لوله
  - جهت قرار گرفتن مبدل
  - تعداد عایق بندی های بین Shell و Tube
  - فاصله بین قطر داخلی Shell تا دایره مجازی محاط بر روی لوله ها

www.DownloadSoftware.iR

اطلاعات مورد نیاز در حالت Detailed (ادامه)

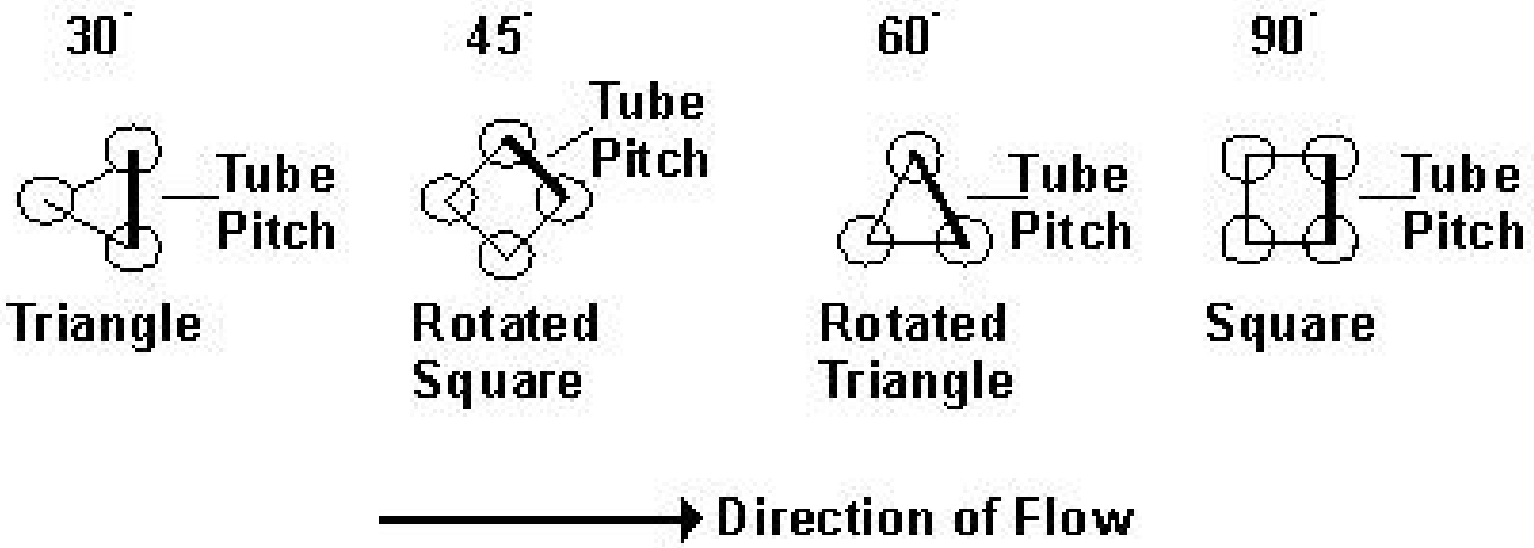
انواع Shell با توجه به استاندارد TEMA:



www.DownloadSoftware.iR

اطلاعات مورد نیاز در حالت Detailed (ادامه)

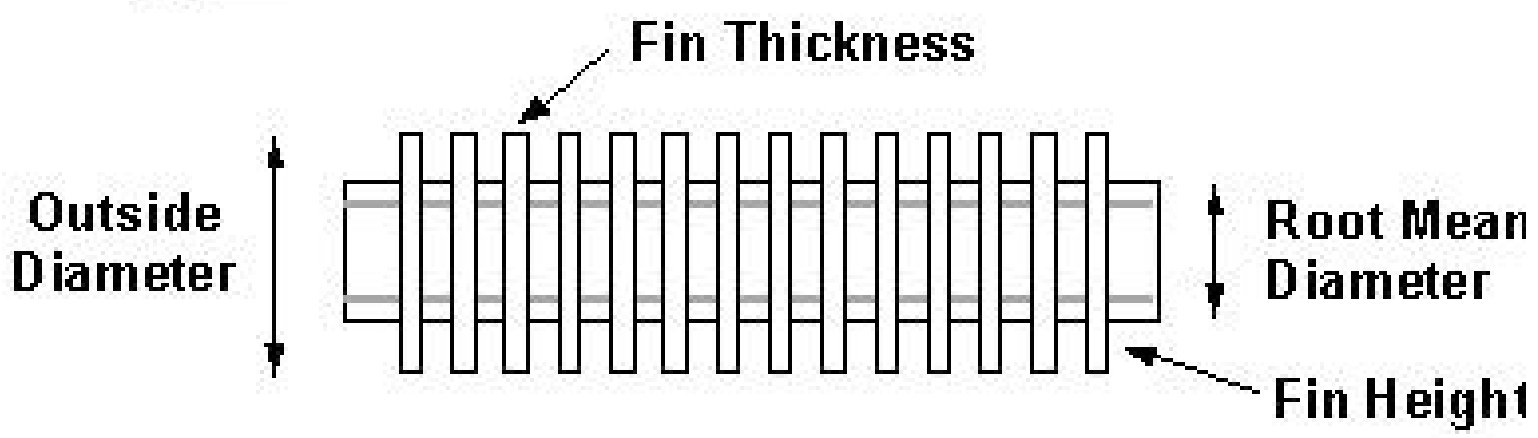
طرز قرار گرفتن لوله ها نسبت به یکدیگر:



www.DownloadSoftware.iR

اطلاعات مورد نیاز در حالت Detailed (ادامه)

ابعاد قسمتهای مختلف پره:



Fin Dimensions

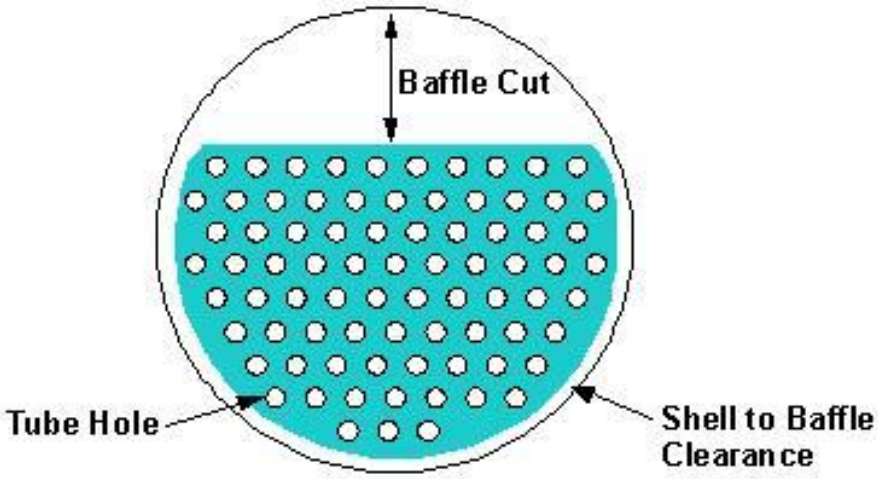
www.DownloadSoftware.iR

اطلاعات مورد نیاز در حالت Detailed (ادامه)

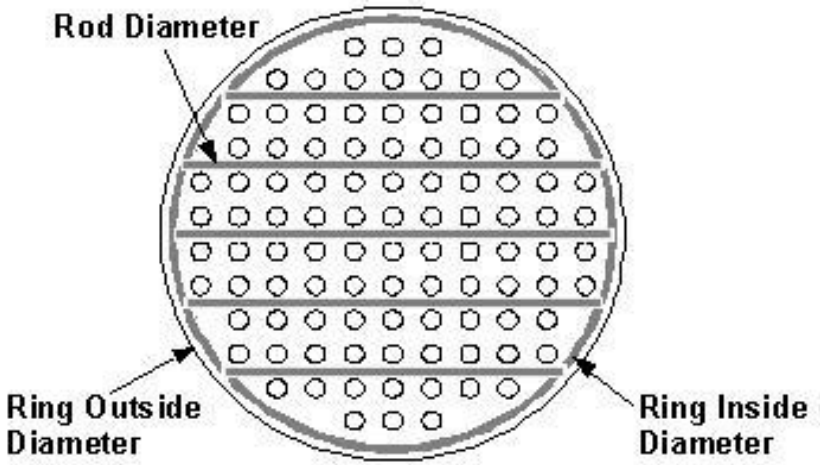
انواع بافلهای Shell:

1) Rod Baffle Shell 2) Segmental Baffle Shell

اطلاعات مورد نیاز برای طراحی حالات فوق در شکلهای ژیر نشان داده شده است:



Dimensions for Segmental Baffles



Dimensions for Rod Baffles

www.DownloadSoftware.iR

مثال۵: شبیه سازی مبدل Heatx

با در نظر گرفتن شرایط زیر ، مبدل مربوطه را شبیه سازی نمایید.

فرض کنید Approach دمایی جریان گرم خروجی برابر با 10°F با÷شد.

جریان	گرم ورودی	سرد ورودی					
T (°F)	158	۷۷		کربن استیل	جنس لوله	256	تعداد لوله
P (psi)	14	۱۴		6 m	طول لوله	3/4	قطر لوله
(kmol/hr)	10	۳۰		۶	تعداد بافل	14	BWG
H_2O frac.	۰,۰۵	۱		۱	تعداد گذر	0.25	Baffle Cut
EtOH frac.	۰,۹۵	۰		مثلثی	آرایش لوله ها	504 mm	قطر داخلی Shell

نوع Shell	E	قطر نازل	۳ in

فاصله بین مرکز دو لوله مجاور را 1 in در نظر بگیرید.

www.DownloadSoftware.iR

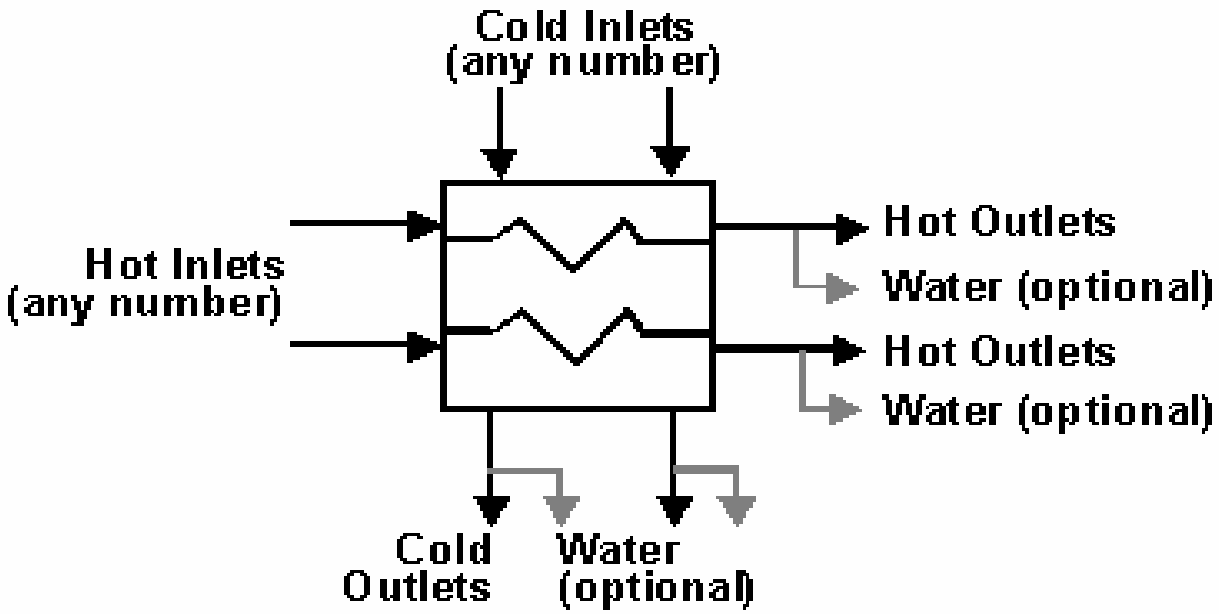
MHeatX

هدف و نحوه عملکرد:

۱. انتقال حرارت بین چندین جریان گرم و سرد
۲. عمده کاربرد برای شبیه سازی Cold Box و چیلرهای چند منظوره
۳. جریانهای یک طرف کاملاً معلوم و فقط یک جریان نامشخص در طرف دیگر
۴. تعیین شرایط جریان خروجی نامشخص با محاسبات آنتالپی
۵. سایر ویژگیها مانند HeatX دو جریانه

شمای گرافیکی و جریان مواد در MHeatX Block

www.DownloadSoftware.iR



Material Streams

inlet At least one material stream on the hot side, unless a load stream is used.
At least one material stream on the cold side, unless a load stream is used.

outlet One outlet stream for each inlet stream.
One water decant stream for each outlet stream (optional).

Load Streams

inlet Any number of load streams on either or both sides.

outlet One outlet load stream for each inlet load stream.

The inlet stream sides are non-contacting.

www.DownloadSoftware.iR

مثال ۶: شبیه سازی مبدل MHeatx

دو جریان H1 و H2 توسط دو جریان C1 و C2 خنک می شوند. با استفاده از معادله حالت PR و با استفاده از اطلاعات زیر، شرایط خروجی C2 را به دست آورید.

نام جریان	H1	HO1	H2	HO2	C1	CO1	C2	CO2
T (°C)	20	-72	30	27	-87.2	19.9	-79.13	?
P (kpa)	5000	4900	5000	4990	2000	1950	250	?
(kmol/hr)	100	100	50	50	75	75	49.2	?
C1 frac.	.5368	.5368	.95	.95	.95	.95	.02	?
C2 frac.	.1538	.1538	.05	.05	.05	.05	.98	?
C3 frac.	.0769	.0769	0	0	0	0	0	?
i-C4 frac.	.0692	.0692	0	0	0	0	0	?
n-C4 frac.	.0615	.0615	0	0	0	0	0	?
i-C5 frac.	.0538	.0538	0	0	0	0	0	?
n-C5 frac.	.0462	.0462	0	0	0	0	0	?

www.DownloadSoftware.iR

برای تبدیل جریان خوراک Freon-12 با دبی $\frac{kmol}{hr}$ ۹۰ و دمای ۲۷۰ k و فشار ۳ at به بخار اشباع ، اتیلن گلایکل با دمای ۳۴۰ k ، دبی $\frac{kmol}{hr}$ ۳۸۲/۳ و فشار ۲ atm در دسترس می باشد. اگر دمای اتیلن گلایکل خروجی به ۳۰۰ k برسد دمای جریان خروجی Freon-12 ، حرارت مورد نیاز ، ضریب کلی انتقال حرارت و سطح انتقال حرارت را در دو حالت Short Cut و Detailed مقایسه نمایید.

- معادله ترمودینامیکی را NRTL-RK انتخاب کنید.
- در حالت Short Cut کلیه افت فشارها را برابر صفر در نظر بگیرید.
- برای حالت Detailed جریان گرم را به داخل لوله ها و جریان سرد را به داخل پوسته هدایت کنید.
- برای حالت Detailed ضریب تصحیح LMTD و افت فشارها با توجه به هندسه مسأله محاسبه شود.
- برای محاسبه ضریب کلی انتقال حرارت از روش Film Coefficient استفاده کنید.
- ضرایب فیلمی انتقال حرارت جریان گرم که به صورت تک فاز است با توجه به هندسه مدل محاسبه شود و برای جریان سرد که با تغییر فاز همراه است ، مقادیر فرض زیر وارد شود.

Cold stream phase specific values

Liquid:	100	Watt/sqm-K
Boiling:	2200	Watt/sqm-K

نکته:

Aspen Plus برای محاسبه ضریب انتقال حرارت جوششی و میعان زیاد دقیق نیست و برای طراحی مناسب بایستی ضریب کلی انتقال حرارت توسط کاربر وارد شود.

www.DownloadSoftware.iR

- مشخصات زیر که مربوط به هندسه مبدل می شوند را وارد سیستم کنید

Shell		Tube	
Tema Shell Type	1 pass shell	Total Number	550
No. of tube pass	2	Pattern	Triangle
Exchanger Orientation	Horizontal	Material	Carbon Steel
Inside Shell Diameter	2.5 meter	Length	5 meter
Shell to bundle Clearance	0.25 meter	Pitch	1.5 in
Inlet Nozzle Diameter	0.1 meter	Inner Diameter	0.02033 meter
Outlet Nozzle Diameter	0.1 meter	Outer Diameter	0.02086 meter
Baffles		Inlet Nozzle Diameter	0.11 meter
No. of Baffles	5	Outlet Nozzle Diameter	0.25 meter
Baffle Cut	0.25		
Baffle to Baffle Spacing	1 meter		

با توجه به سطح انتقال حرارت بدست آمده در حالت Detailed/Rating ، خروجی ها را یکبار دیگر در حالت Detailed/Simulation مقایسه نمایید.

	Short Cut	Detailed/Rating	Detailed/Simulation
سطح انتقال حرارت			
دمای جریان سرد خروجی			
ضریب کلی انتقال حرارت			
بار حرارتی مبدل			

www.DownloadSoftware.iR

Hetran Interface

هدف و نحوه عملکرد:

۱. از برنامه های کاربردی Aspen B-jac و طراح مبدلهای حرارتی

۲. خروجی آن: TEMA Sheet مبدل

۳. قابلیت Link به Aspen Plus & Aspen 11.1

۴. طراحی دقیق مبدل در محیط Hetran

نکته: Aspen Plus توانایی Link شدن به برنامه های Aspen B-jac هم نسخه خود را دارد.

www.DownloadSoftware.iR

Hetran Interface (ادامه)

نحوه عملکرد:

۱. وارد کردن اطلاعات مورد نظر در فایل Aspen B-jac

۲. Run کردن فایل Aspen B-jac

۳. انتخاب فایل مورد نظر در صفحه .Sprc در نرم افزار Aspen+ (Brows

۴. اعمال تغییرات کلی در "Aspen + " مانند:

- مانند نوع محاسبات
- Fouling
- افت فشار
- ضزیب فیلمی

www.DownloadSoftware.iR

Aerotran Interface

هدف و نحوه عملکرد:

۱. از برنامه های کاربردی Aspen B-jac و طراح کولرهای هوایی

۲. قابلیت Link به Aspen 11.1 & Aspen Plus

۳. طراحی دقیق کولر هوایی در محیط Aerotran

۴. بقیه موارد به طور کامل مشابه با Hetran می باشد.

www.DownloadSoftware.iR

HX Flux

هدف و نحوه عملکرد:

۱. برنامه ای ساده برای محاسبه U، A، ΔT_{LMTD}

۲. ورودی ها: Q +دمای جریانهای سرد و گرم در ورودی و خروجی + A یا U

۳. خروجی ها: ΔT_{LM} یکی از پارمترهای A یا U

www.DownloadSoftware.iR

Log-Mean Temperature Difference

Two methods are used in determining log-mean temperature difference (LMTD). F

$$LMTD = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln\left(\frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}\right)}$$

For the approximate method:

$$LMTD = \left(\frac{\Delta T_1^{1/3} + \Delta T_2^{1/3}}{2}\right)^3$$

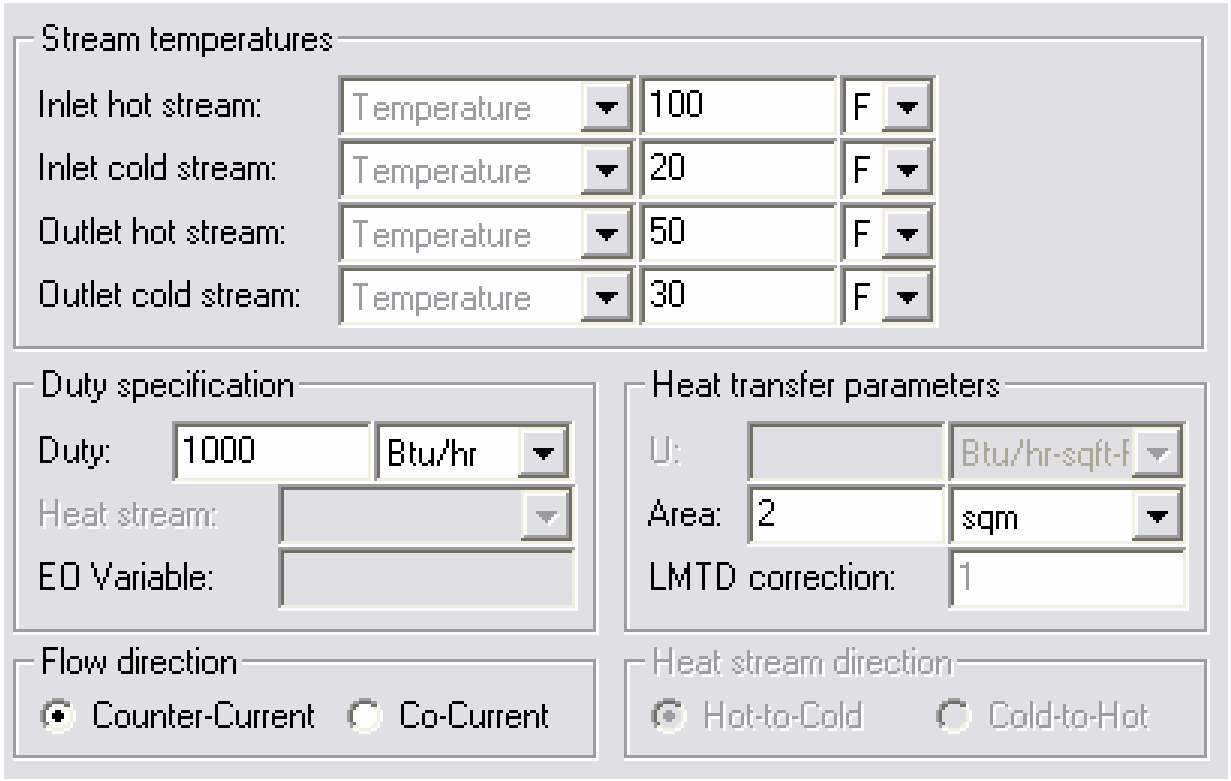
where ΔT_1 and ΔT_2 are the approach temperatures.

The approximate method is used even if the rigorous method is specified when:

- Either of the approach temperatures is zero.
- There is no difference in the approach temperatures.

www.DownloadSoftware.iR

مثال ۷: HX Flux



www.DownloadSoftware.iR

HTRIXIST Interface

هدف و نحوه عملکرد:

۱. از برنامه های کاربردی برای طراحی مبدلهای حرارتی Shell & Tube

۲. قابلیت Link به Aspen Plus & Aspen 11.1

۳. عملکرد برنامه HTRI مشابه با Hetran می باشد.

www.DownloadSoftware.iR

Heat Exchanger

1. **Heater** (Thermal and Phase State Changer Calculation)
2. **HeatX** (محاسبات مبدلهای ۲ جریانه در حالات مختلف)
3. **MHeatX** (انتقال حرارت بین چندین جریان گرم و سرد)
4. **Hetran** (طراحی حرارتی مبدلها و تهیه TEMA Sheet)
5. **Aerotran** (مورد استفاده در طراحی کولرهای هوایی)
6. **HXFlux** (برنامه ای ساده برای محاسبه ΔT_{LMTD} ،A ،U)
7. **HTRIXIST** (برای طراحی مبدلهای Shell & Tube)

www.DownloadSoftware.iR

مثال ۵-۸:

- جریان مایع c5 تا c9 را از فشار ۴۰ bar تا ۴۵ bar پمپ نمایید.
- میزان NPSHA و FHP و BHP چقدر است؟

www.DownloadSoftware.iR

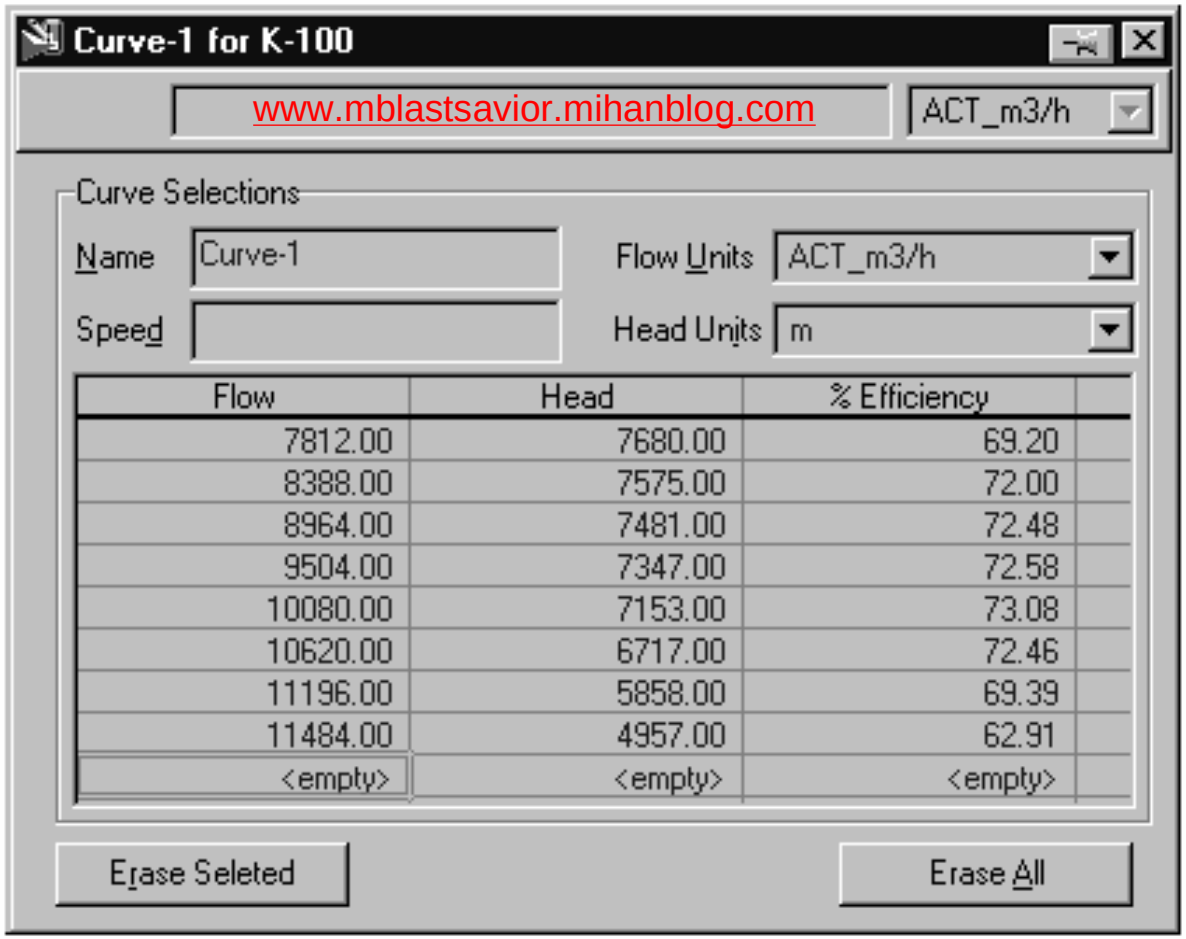
Installing a Stream

1. Add a Material Steam to the PFD with the following data:

In This Cell...	Enter...
Name	Feed
Temperature	70 °C (160 °F)
Pressure	130 kPa (19 psia)
Molar Flow	500 kgmole/hr (1100 lbmole/hr)
Mole Fraction [H_2O]	0.24
Mole Fraction [H_2S]	0.07
Mole Fraction [CO_2]	0.06
Mole Fraction [C1]	0.04
Mole Fraction [C2]	0.11
Mole Fraction [C3]	0.25
Mole Fraction [i-C4]	0.08
Mole Fraction [n-C4]	0.15

www.DownloadSoftware.iR

On the **Curve** page, select the **Adiabatic** radio button in the **Efficiency** group. Press the *Add Curve* button, and enter the data as shown here:



www.DownloadSoftware.iR

Questions

What is the Outlet Pressure of the compressor? _____

What is the Adiabatic Efficiency? _____

*The Polytropic Efficiency?*_____

www.DownloadSoftware.iR

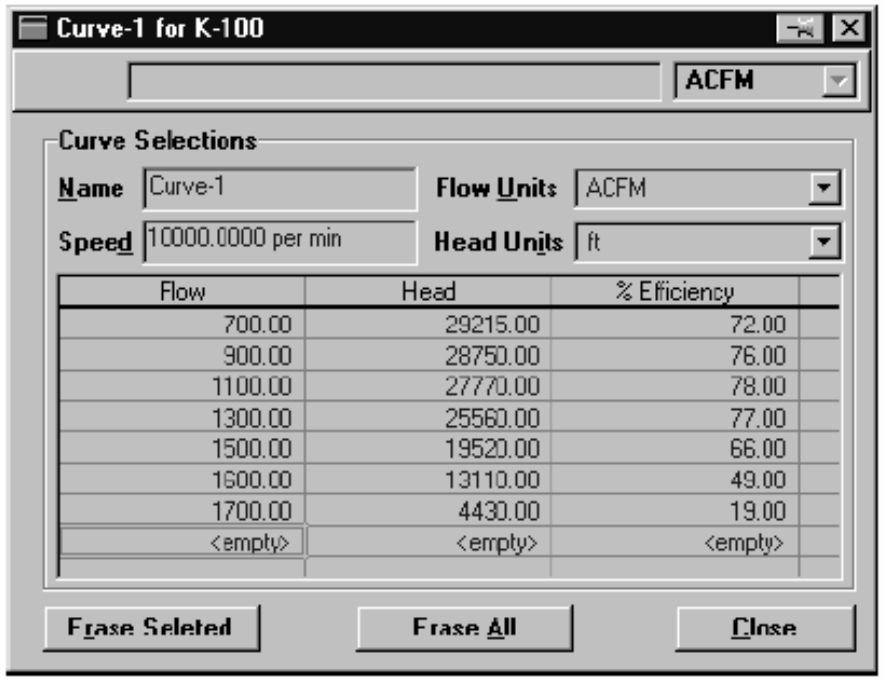
Multiple Curves

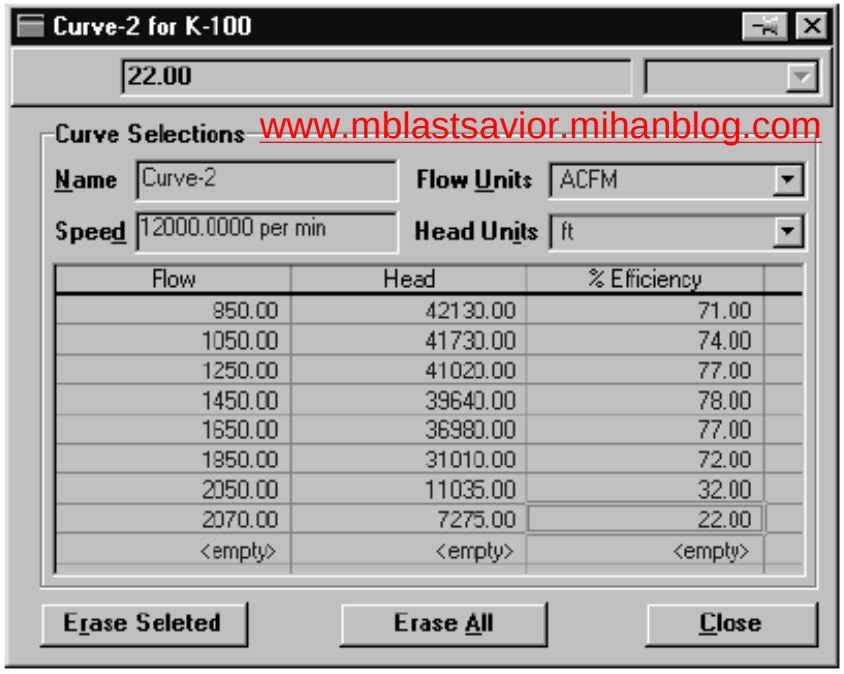
In This Cell...	Enter...
Name	LP Gas
Temperature	10 °C (50 °F)
Pressure	1700 kPa (245 psia)
Molar Flow Rate	1500 kgmole/hr (3300 lbmole/hr)
Comp. Mole Fraction - C1	0.99
Comp. Mole Fraction - C2	0.002
Comp. Mole Fraction - C3	0.0005
Comp. Mole Fraction - N2	0.005
Comp. Mole Fraction - CO2	0.0025

3. Add a **Compressor** to the PFD with this data:

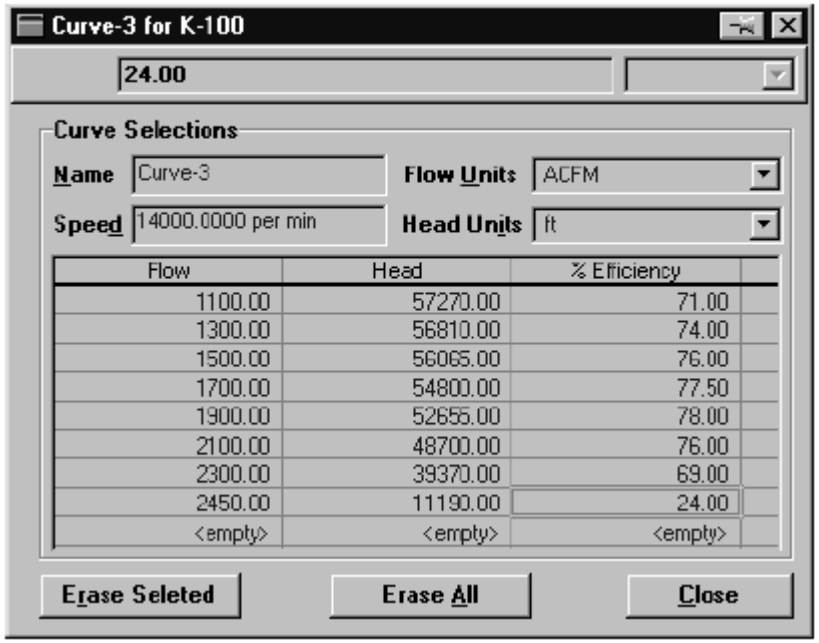
In This Cell...	Enter...
Inlet	LP Gas
Outlet	HP Gas
Energy	Comp Duty

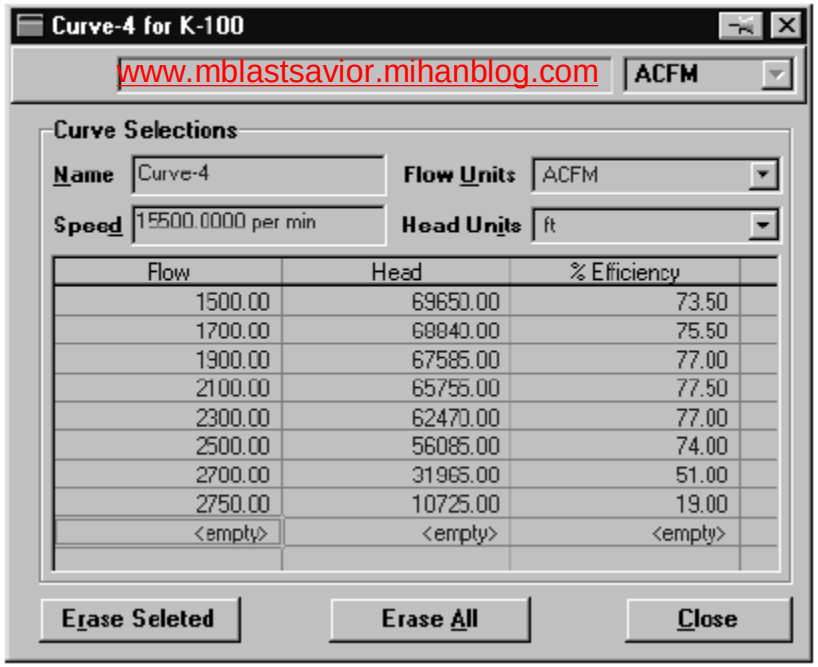
www.DownloadSoftware.iR





www.DownloadSoftware.iR

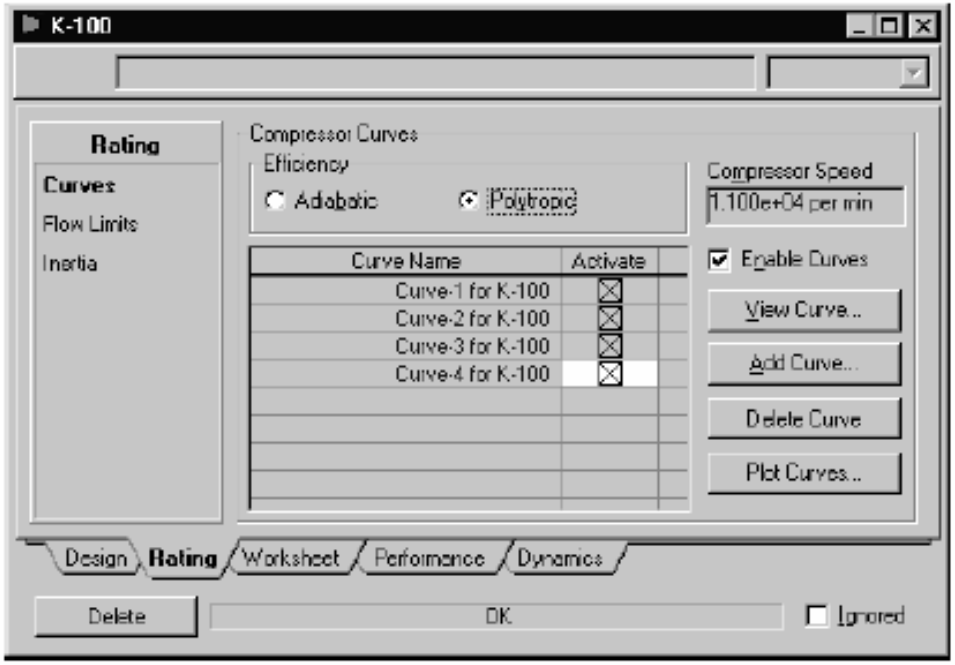




www.DownloadSoftware.iR

Ensure that all of the curves are activated, and the **Enable Curves** box is checked. These curves are polytropic curves, therefore the **Polytropic** radio button must be checked in the **Efficiency** group on the **Curves** page.

On the **Curves** page, enter a speed of **11 000 per min.**



What is the pressure of the HP Gas stream? _____

www.DownloadSoftware.iR

Optional Exercise

1. Delete the specified compressor speed of **11 000 per minute**.
2. Enter a pressure of **5000 kPa** (**725 psia**) for the **HP Gas** stream.
3. HYSYS will automatically calculate the compressor speed needed to meet this outlet pressure.

What is the compressor speed needed to achieve the specified outlet pressure? _____

What are the Adiabatic and Polytropic efficiencies of the compressor under these conditions? _____

What is the temperature of the HP Gas? _____

www.DownloadSoftware.iR

Pump Curves

Defining the Fluid Package

1. Begin a new case and select the **Peng Robinson** EOS package.
2. Add the components **n-Hexane, n-Heptane,** and **n-Octane.**

Installing a Stream

Add a new stream to the PFD and enter the following information:

In This Cell...	Enter...
Name	LP Mixture
Temperature	25 ^{o}C (77 ^{o}F)
Pressure	120 kPa (18 psia)
Liquid Volume Flow	500 m^3/hr (76,000 BPD)
Comp. Mass Fraction [Hexane]	0.60
Comp. Mass Fraction [Heptane]	0.30
Comp. Mass Fraction [Octane]	0.10

www.DownloadSoftware.iR

Adding the Pump

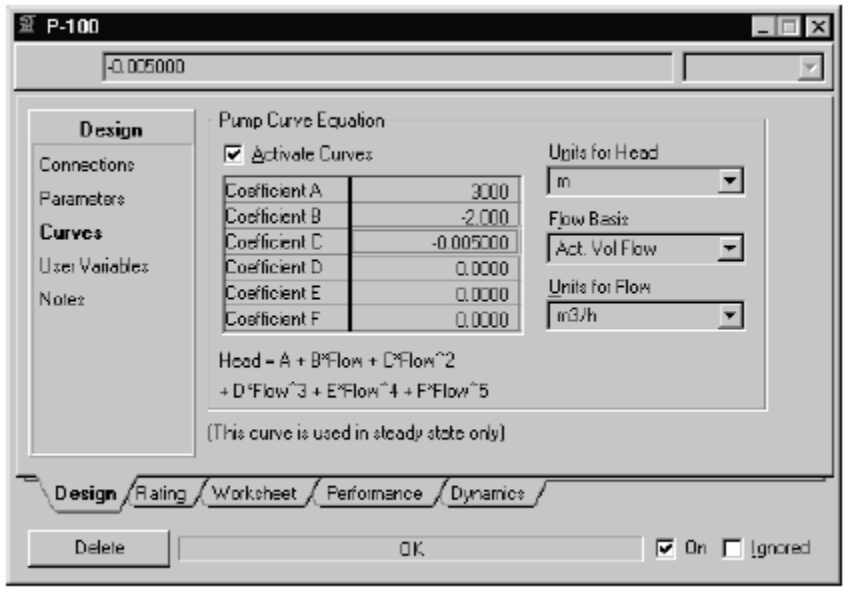
1. Add a **Pump** to the PFD and enter the following information:

In This Cell...	Enter...
Inlet	LP Mixture
Outlet	HP Mixture
Energy	Pump Duty
Efficiency (Parameters Page)	75 %

2. On the **Curves** page, enter the following data:

In This Cell...	Enter...
Coefficient A	3000
Coefficient B	-2.0
Coefficient C	-0.005
All Other Coefficients	0
Units for Head	m
Flow Basis	Act. Vol. Flow
Units for Flow	m^3/hr

www.DownloadSoftware.iR



What is the outlet pressure of the pump? _____

The pump sales representative, who supplied the curve data, guaranteed an outlet pressure of 5000 kPa (725 psia) at the specified flow rate. Should you fill out the purchase order? _____

www.DownloadSoftware.iR

Distillation Columns

Towers

Fractionators

www.DownloadSoftware.iR

Distillation Columns

هدف: بررسی انواع مبدلهای حرارتی **شامل:**

1. **DSTWU**
2. **Distil**
3. **RadFrac**
4. **Extract**
5. **MultiFrac**
6. **SCFrac**
7. **PetroFrac**
8. **RateFrac**
9. **BatchFrac**

www.DownloadSoftware.iR

DSTWU

هدف و نحوه عملکرد:

۱. طراحی برجهای با یک خوراک ورودی و ۲ محصول خروجی

۲. قابلیت استفاده از کندانسورهای جزیی و کامل

۳. طراحی بر اساس دبی مولی و فراریت ثابت در طول برج

۴. طراحی برج تقطیر Shortcut با استفاده از روش Winn-Underwood-Gililand

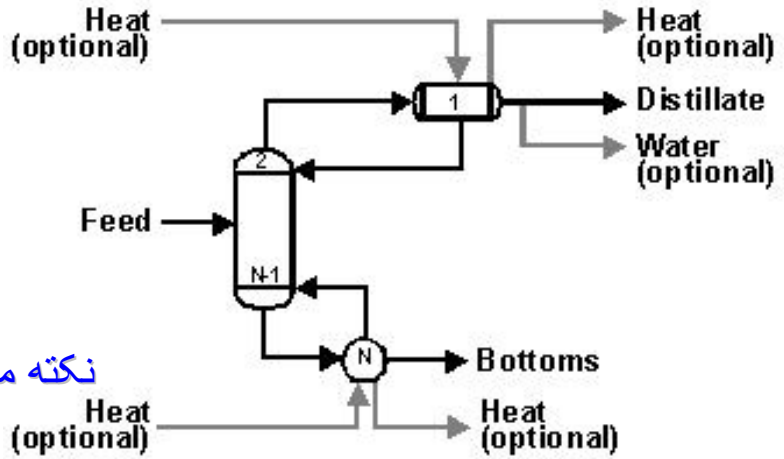
۵. نکته : در Hysys روش Fenske به جای Winn

- § روش Win: تخمین حداقل تعداد سینی لازم
- § روش Underwood: تخمین حداقل Reflux Ratio
- § روش Gililand: Reflux Ratio لازم برای تعداد سینی مشخص یا تعداد سینی لازم برای Reflux Ratio مشخص

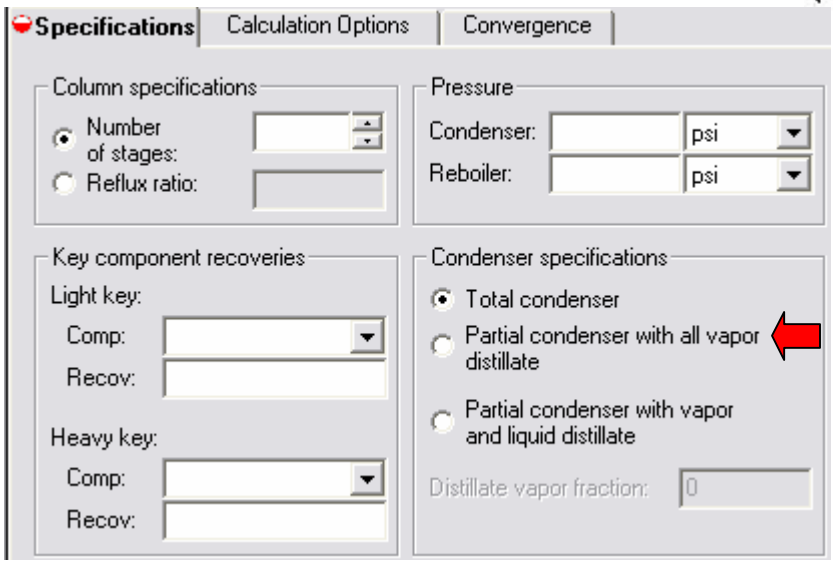
www.DownloadSoftware.iR

Flowsheet Connectivity for DSTWU

کندانسور همیشه مرحله اول
و
ریبویلر همیشه سیني آخر



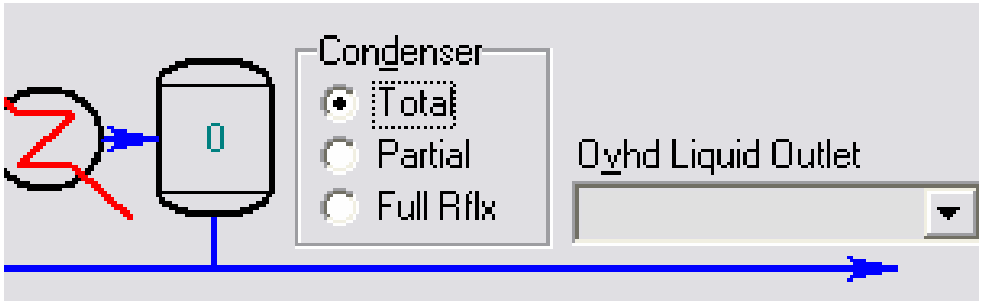
نکته مهم:همیشه در برقراري جريانها در صفحه دقت نماييد!!!



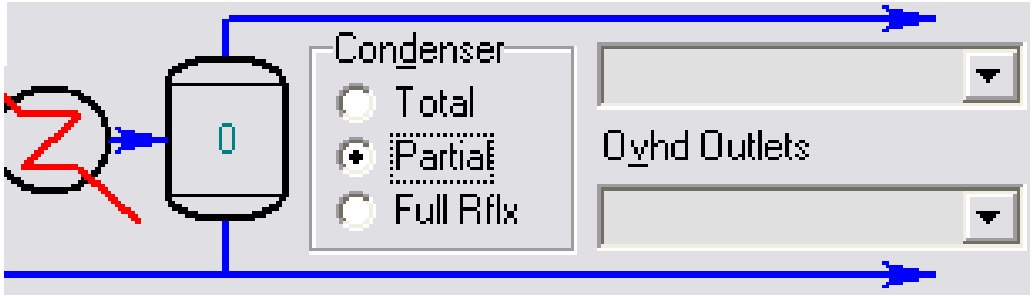
Full Reflux Condenser

www.DownloadSoftware.iR

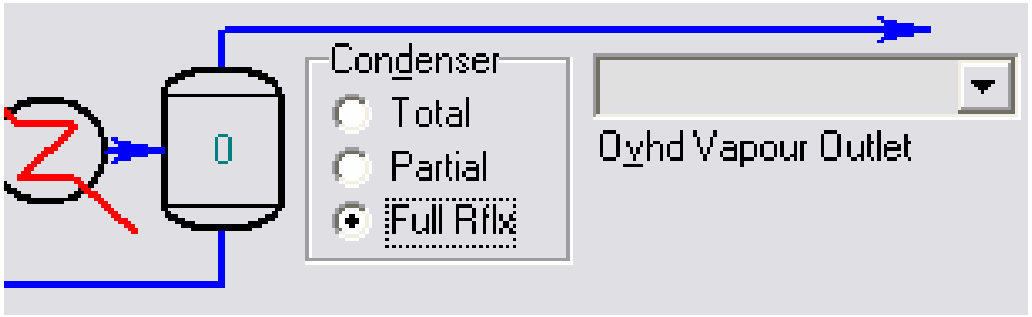
Total Condenser



Partial Condenser



Full Reflux Condenser



www.DownloadSoftware.iR

اطلاعات مورد نیاز در DSTWU

- وارد کردن تعداد سینی(numbwr of stages) یا RR(reflux ratio)
- وارد کردن Key Component و میزان بازیافت(recovery)
  - منظور از Light Key، سبکترین ماده ای است که در بالای برج وجود دارد.
  - منظور از Heavy Key، سنگین ترین ماده ای است که در بالای برج وجود دارد.
  - منظور از Recovery، میزان وجود ماده مورد نظر در بالای برج است.

www.DownloadSoftware.iR

مثال ۹: شبیه سازی برجDSTWU

خوراک زیر وارد برجی با ۱۰ سینی و کندانسور کامل و ریبویلر با فشار ۱٤ psi می شود. ریکاوری متان در بالای برج تقریباً کامل است و سنگین ترین ترکیب در بالای برج پروپان با ریکاوری ۰،۰۰۱ است. مطلوبست شبیه سازی برج.

T (°F)	100
P (Psia)	14
Flow (lbmol/s)	1
C1 frac.	0.25
C2 frac.	0.25
C3 frac.	0.25
n-C4 frac.	0.25

www.DownloadSoftware.iR

Distl

هدف و نحوه عملکرد:

۱. طراحی برجهای با یک خوراک ورودی و ۲ محصول خروجی

۲. قابلیت استفاده از کندانسورهای جزیی و کامل

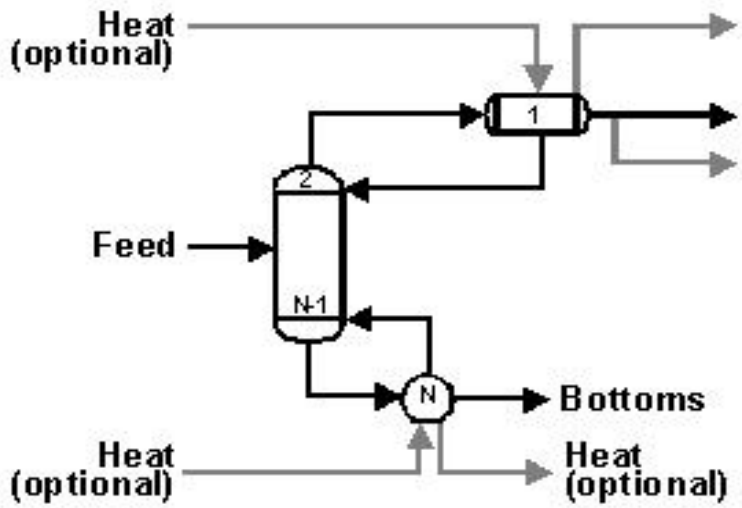
۳. طراحی بر اساس دبی مولی و فراریت ثابت در طول برج

۴. طراحی برج تقطیر Shortcut با استفاده از روش Edmister

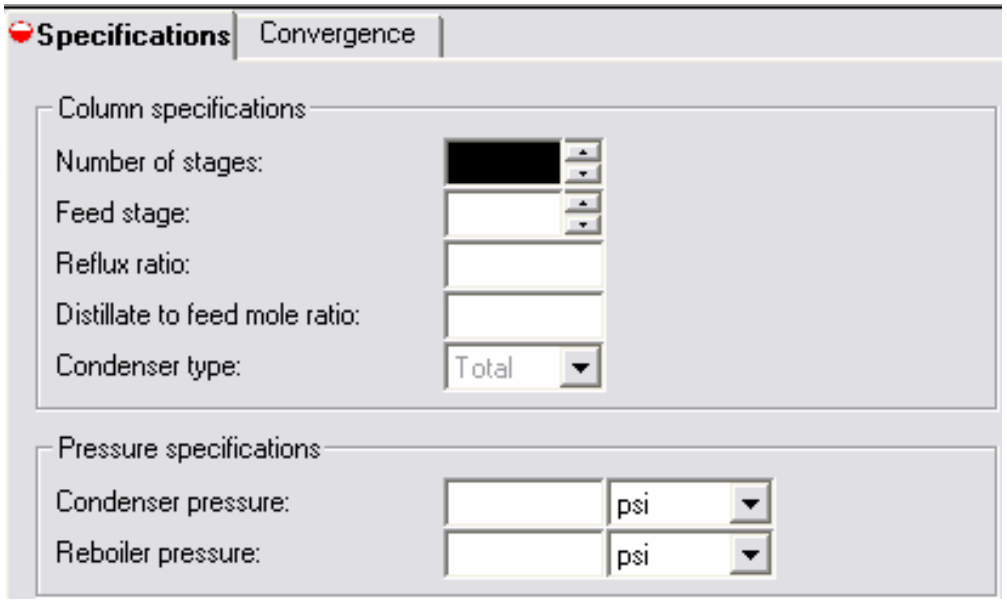
- بر اساس اطلاعات نسبت مولی محصول بالای برج به دبی مولی خوراک و RR

www.DownloadSoftware.iR

Flowsheet Connectivity for Distl



نکته مهم:همیشه در برقراري جريانها در صفحه دقت نماييد!!!



کندانسور همیشه مرحله اول
و
ريبويلر هميشه سيني دوم

www.DownloadSoftware.iR

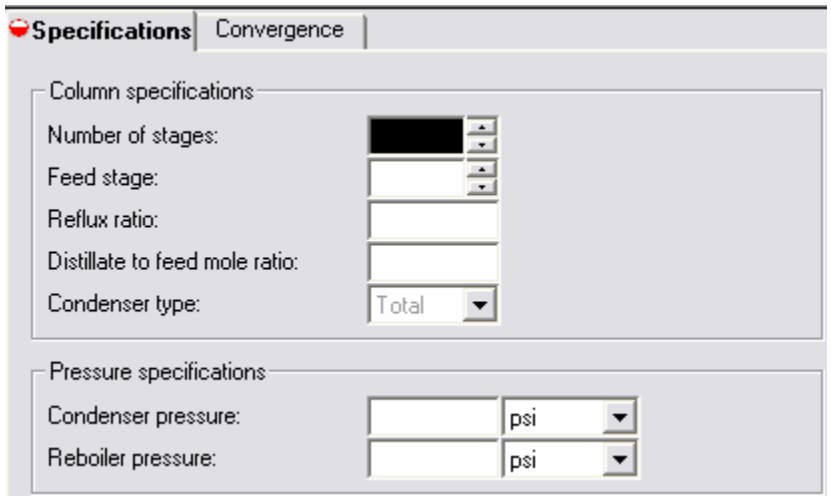
مثال ۱۰: شبیه سازی برجDistl

خوراک زیر وارد برجی با ۱۴ سینی (سینی خوراک ۷) و نسبت جریان برگشتی ۶،۰۶ می شود و کندانسور کامل و ریبویلر آن به ترتیب با فشار ۲۴۸ psi و ۲۵۲ کار می کنند. نسبت دبی مولی جریان محصول بالای برج به دبی مولی خوراک ۰،۲۲۶ می باشد. مطلوبست محاسبه ترکیب درصد اجزاء در محصولات بالا و پایین برج با استفاده از معادله حالت RK-Soave.

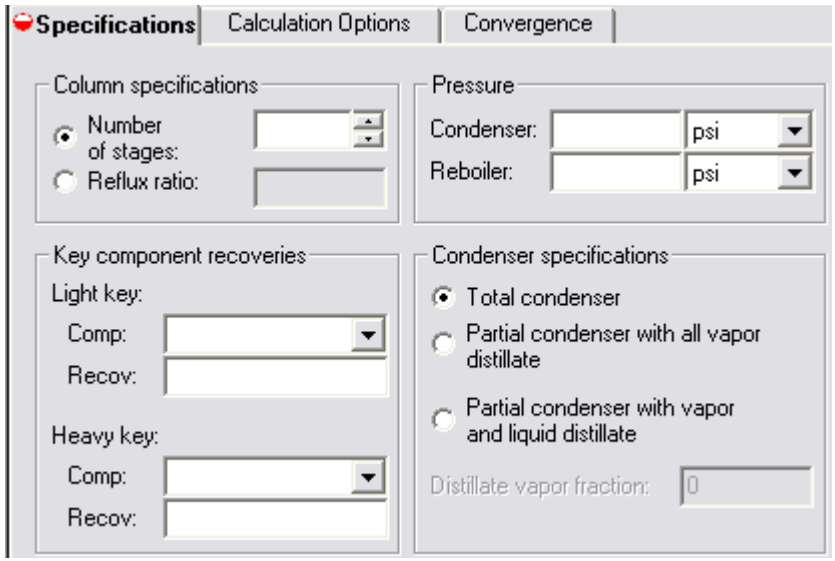
T (°F)	۲۲۵	C1	30
P (Psia)	۲۵۰	C3	200
		n-C4	370
Flow	(lbmol/hr)	n-C5	350
		n-C5	50

www.DownloadSoftware.iR

تفاوتهای اصلی Distl و DSTWU



- Distl
- سینی خوراک
- نسبت دبی مولی خروجی به ورودی



- DSTWU
- ریکاوری
- Key Component

www.DownloadSoftware.iR

RadFrac

هدف و نحوه عملکرد:

۱. یک مدل دقیق برای شبیه سازی جداکننده های چند مرحله ای

۲. توانایی شبیه سازی Unit های زیر:

- تقطیر، جذب، برج جذب ریبویلردار، Stripper (و همراه با ریبویلر)، تقطیر آزوتوروپی و استخراجی

۳. توانایی کار در شرایط زیر:

- سیستمهای دوفازی، سه فازی، سیستمهای با اختلاف دمای جوش کم و غیر ایده آلیته فاز مایع

www.DownloadSoftware.iR

RadFrac (ادامه)

انواع کندانسورها:

۱. کندانسور کامل – یک مشخصه

۲. کندانسور Full (شامل فقط جریان بخار) – یک مشخصه

۳. کندانسور جزیی (شامل جریان مایع و بخار)– دو مشخصه

- یکی در Set up – configuration از بین متغیرهای زیر و دیگری در Condenser - Spec. (دما یا کسر بخار داخل کندانسور)

دبی جریان بالا یا پایین، گرمای ریبویلر یا کندانسور،

نسبت Boil up یا نسبت جریان محصول به خوراک

www.DownloadSoftware.iR

RadFrac (ادامه)

دیگر توانایی های RadFrac

۱. حداکثر ۳ جریان جانبی برای هر Stage (یک جریان بخار و دو جریان مایع)

۲. تعداد نامحدود جریانهای Pseudo Stream

۳. A pseudoproduct stream does not affect column results

۴. لزوم وارد کردن یک مشخصه به ازای هر جریان محصول (شامل: فاز جریان محصول، شماره سینی محصول، میزان دبی آن یا نسبت دبی آن به خوراک)

۵. توانایی اضافه کردن یک مشخصه و تعریف یک متغیر در Folderهای Design Spec & Vary

www.DownloadSoftware.iR

RadFrac (ادامه)

انواع ریبویلر:

۱. ریبویلر Kettle – یک مشخصه

۲. ریبویلر ترموسیفون – دو مشخصه

- یکی در Set up – Operation از بین متغیرهای زیر و دیگری در Reboler - Spec. (دما یا دبی بخار ریبویلر یا هر دو)

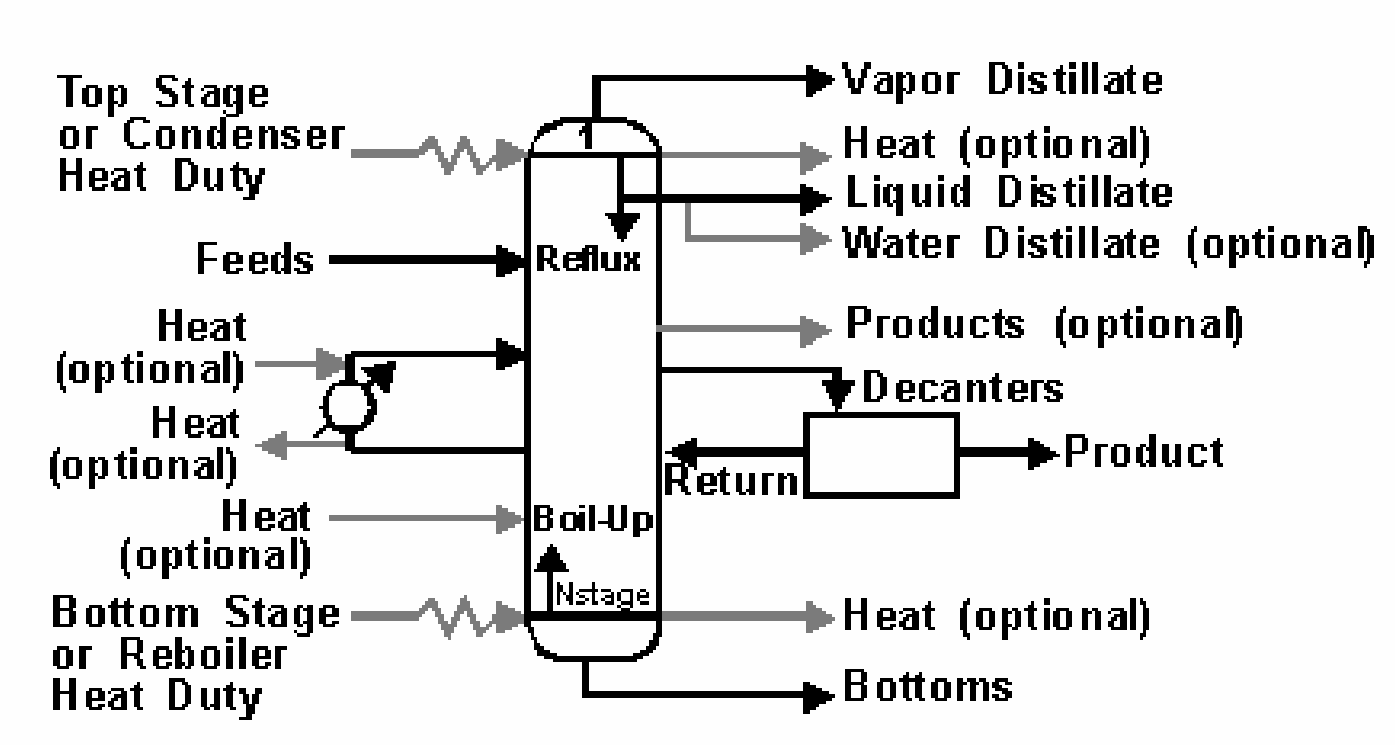
دبی جریان بالا و پایین، گرمای ریبویلر و کندانسور،

نسبت Boil up و نسبت جریان محصول به خوراک

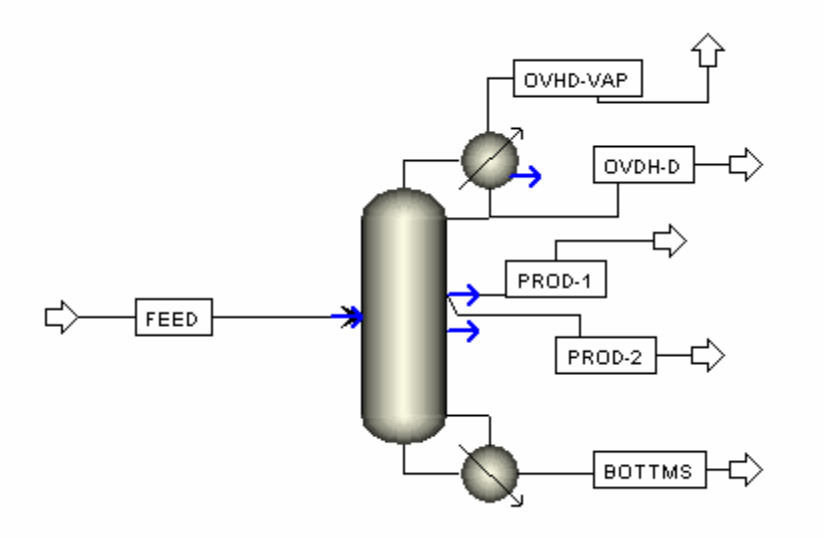
www.DownloadSoftware.iR

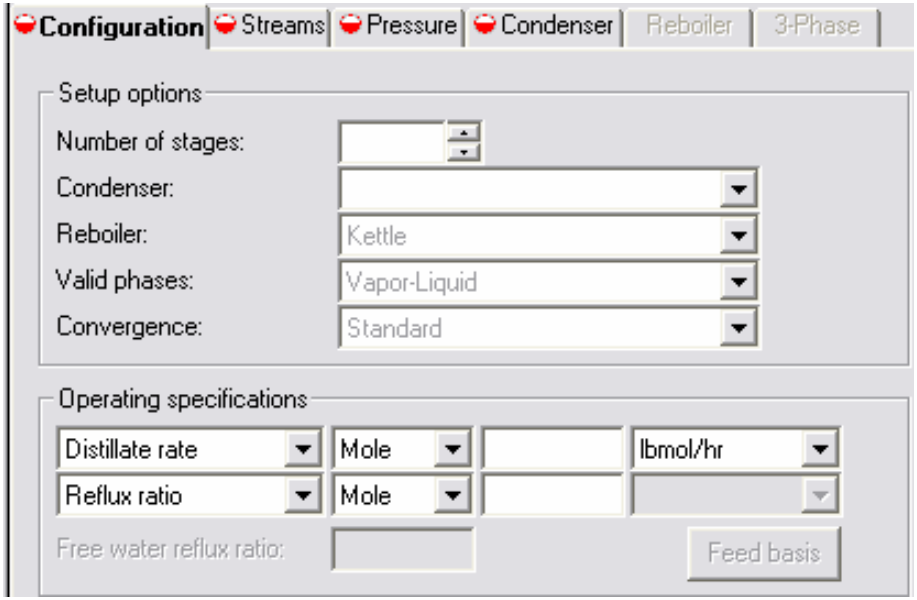
Flowsheet Connectivity for RadFrac

نکته مهم:همیشه در برقراري جريانها در صفحه دقت نماييد!!!



www.DownloadSoftware.iR





www.DownloadSoftware.iR

Feed Stream Conventions

Configuration | Streams | Pressure | Condenser | Reboiler | 3-Phase

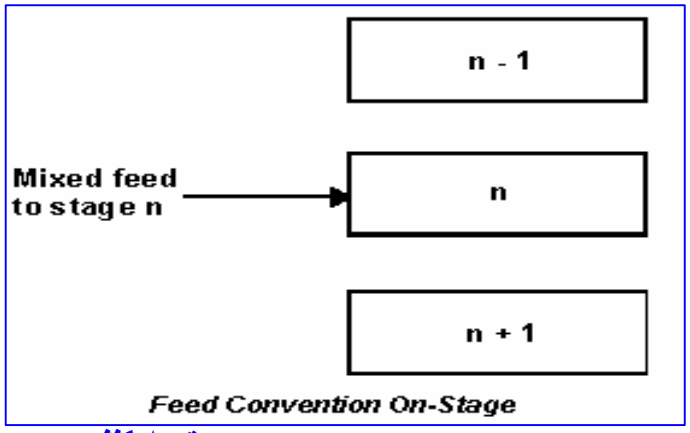
Feed streams

	Name	Stage	Convention
▶	FEED		Above-Stage

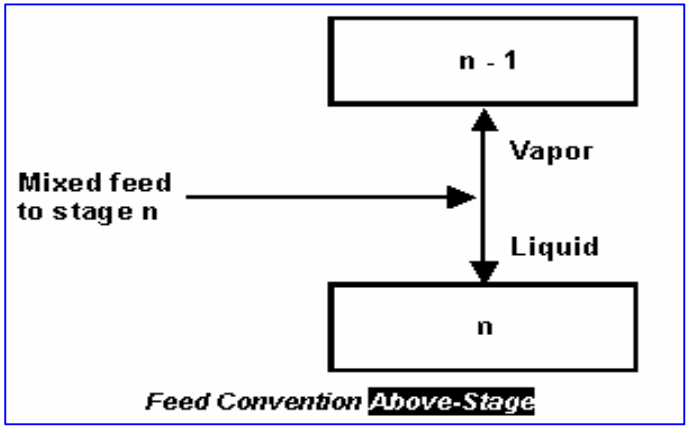
www.mblastsavior.blogfa.com

Product streams

	Name	Stage	Phase	Basis	Flow	Units	Flow ratio	Feed specs
	PROD-1			Mole		lbmol/hr		Feed basis
	PROD-2			Mole		lbmol/hr		Feed basis
	OVHD-VAP			Mole		lbmol/hr		Feed basis
	OVDH-D			Mole		lbmol/hr		Feed basis
	BOTTMS			Mole		lbmol/hr		Feed basis



Feed Convention On-Stage



Feed Convention Above-Stage

www.DownloadSoftware.iR

مثال۱ ۱: شبیه سازی برج RadFrac

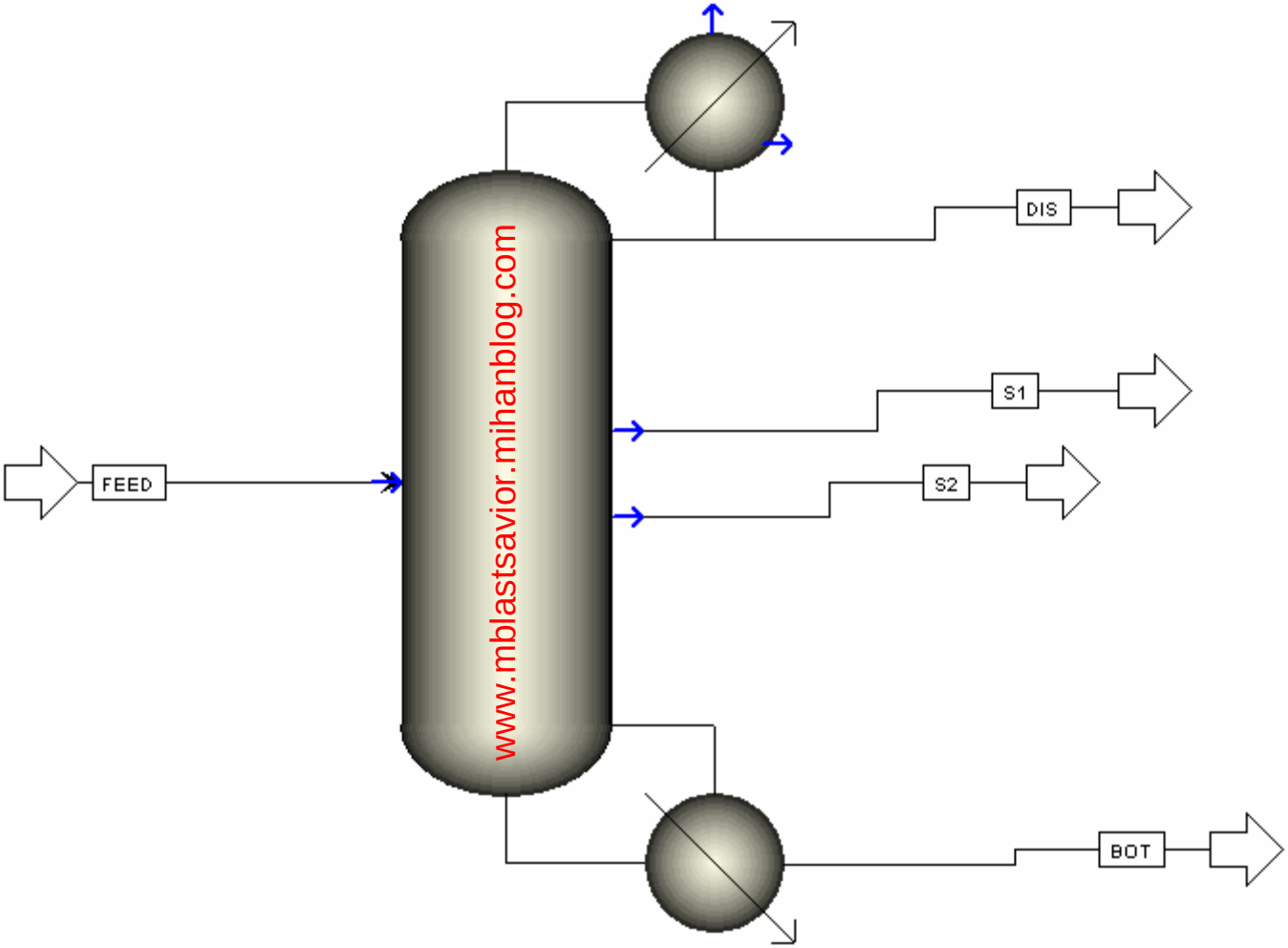
خوراک زیر وارد برجی با ۲۵ سینی تعادلی (سینی خوراک ۱۱) و نسبت جریان برگشتی ۵,۵ میشود و کندانسور کامل و ریبویلر Kettle میباشد. فشار کندانسور ۲۰ psi و افت فشار کل برج، 5 psi میباشد. نسبت دبی مولی محصول بالای برج به دبی مولی خوراک برابر با ۰،۳ میباشد. ۲ جریان جانبی از سینی های ۶ و ۱۶ گرفته میشود. دبی این ۲ جریان یکسان و برابر با 1.896 lbmol/hr میباشد.

Base method:chao-seader

T (°F)	۱۲۰	n-C5	۲۲۰
P (Psia)	۲۵	n-C6	۱۱۰
		n-C7	۱۶۰
Flow	(lbmol/hr)	n-C8	۵۰
		n-C9	۴۰۰

www.DownloadSoftware.iR

مثال ۱۱ (ادامه)



www.DownloadSoftware.iR

مثال ۱۲: شبیه سازی برج RadFrac

خوراک زیر وارد برجی با ١٤ سینی تعادلی (با احتساب کندانسور و ریبویلر) و سینی خوراک ۷ میشود. در این برج عمده اتان و پروپان از ترکیبات سنگین خارج شده و از کندانسور بالای برج به صورت بخار خارج میشود بطوریکه با تغییر RR دبی مولی پروپان در بالای برج lbmol/hr ۱۹۱ شود. کندانسور Partial-Vapor و ریبویلر Kettleمیباشد. نسبت دبی مولی جریان محصول بالای برج به خوراک برابر ۰،۲۲۶ میباشد. از حدس اولیه ۶،۰۶ میتوان برای RR استفاده نمود. مطلوبست شبیه سازی این برج. افت فشار کل برج، 2 psi میباشد

نمودار تغییرات دما را برای هر سینی رسم نمایید

Basemethod:rk-soave

T (°F)	225	C1	30
P (Psia)	250	C3	200
		n-C4	370
Flow	(lbmol/hr)	n-C5	350
		n-C6	50

www.DownloadSoftware.iR

مثال۱۳: شبیه سازی برج جداسازی اتیلن DSTWU

خوراک زیر وارد برجی با کندانسور کامل با فشار 17.8 bar و ریبویلر با فشار 18.2 bar می شود. ریکاوری اتیلن در بالای برج 95. است و سنگین ترین ترکیب در بالای برج اتان با ریکاوری 03. است. مطلوبست شبیه سازی برج.

نمودار تغییرات فشار را برای هر سینی رسم نمایید

RR:3.1

Base method:Peng-Rob

Vapor fraction	0	H2	0.0014
P (bar)	18	CH4	0.00162
		C2H6	0.24003
Flow	(lbmol/hr) 100	C2H4	0.75746
		C3H6	0.0075

www.DownloadSoftware.iR

مثال ۱٤: شبیه سازی برج جداسازی اتیلن Distl

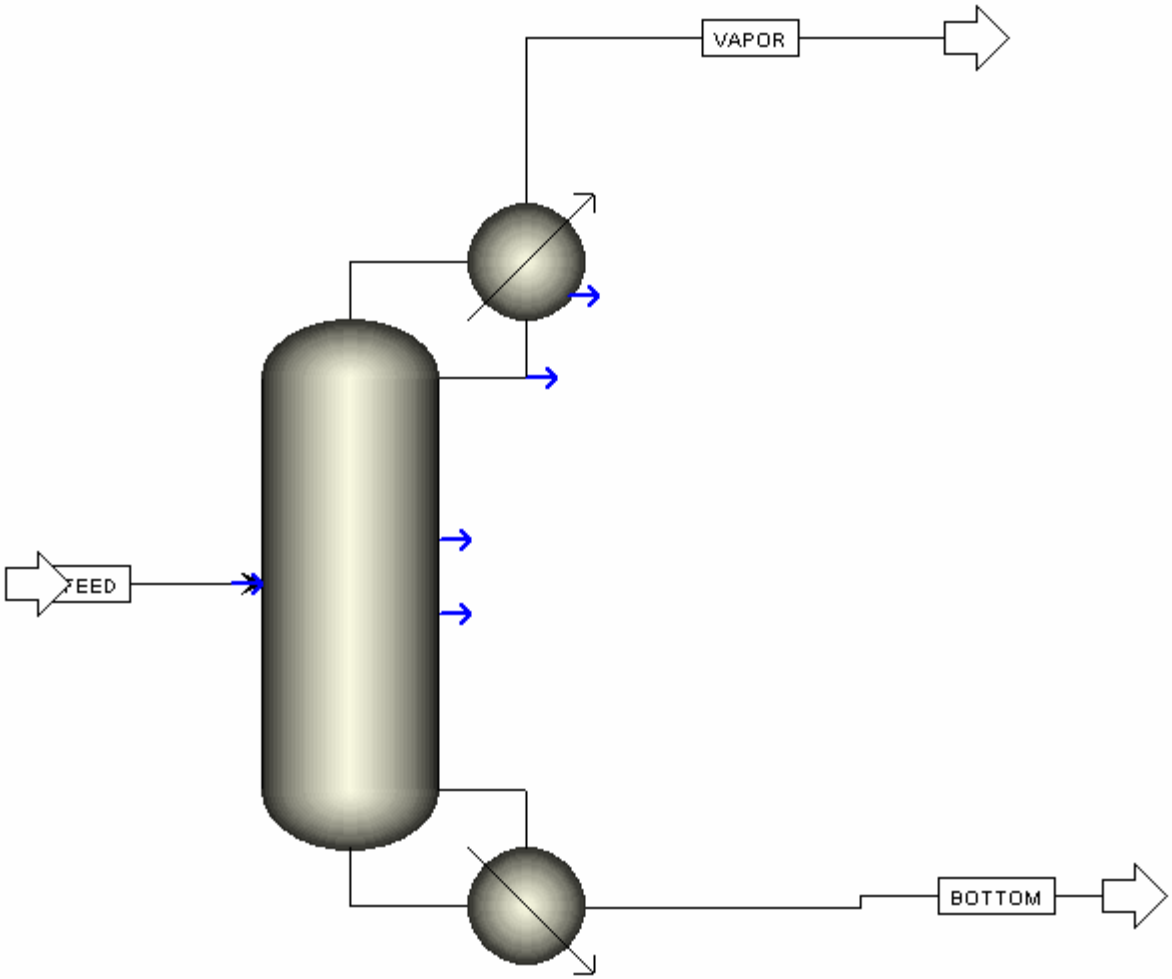
خوراک زیر وارد برجی با ۳۲ سینی تعادلی (با احتساب کندانسور و ریبویلر) و سینی خوراک ۱۸ میشود. در این برج عمده اتیلن از ترکیبات سنگین خارج شده و از کندانسور بالای برج به صورت مایع خارج میشود دبی مولی محصول بالای برج ۷۲،۸ lbmol/hr شود. کندانسور Partial-Vapor و ریبویلر Kettle میباشد. کسر مولی اتیلن محصول بالای برج برابر ۰،۹۹ میباشد. از حدس اولیه ۳،۱ میتوان برای RR استفاده نمود. مطلوبست شبیه سازی این برج. افت فشار کل برج، 0.2 bar میباشد

نمودار تغییرات غلظت اتیلن را برای هر سینی رسم نمایید

Basemethod:Rk-soave

Vapor fraction	0	H2	0.0014
P (bar)	18	CH4	0.00162
		C2H6	0.24003
Flow	(lbmol/hr) 100	C2H4	0.75746
		C3H6	0.0075

www.DownloadSoftware.iR



www.DownloadSoftware.iR

SCFrac

هدف و نحوه عملکرد:

۱. طراحی برجهای تقطیر پیچیده با یک خوراک ورودی و هر تعداد محصول خروجی

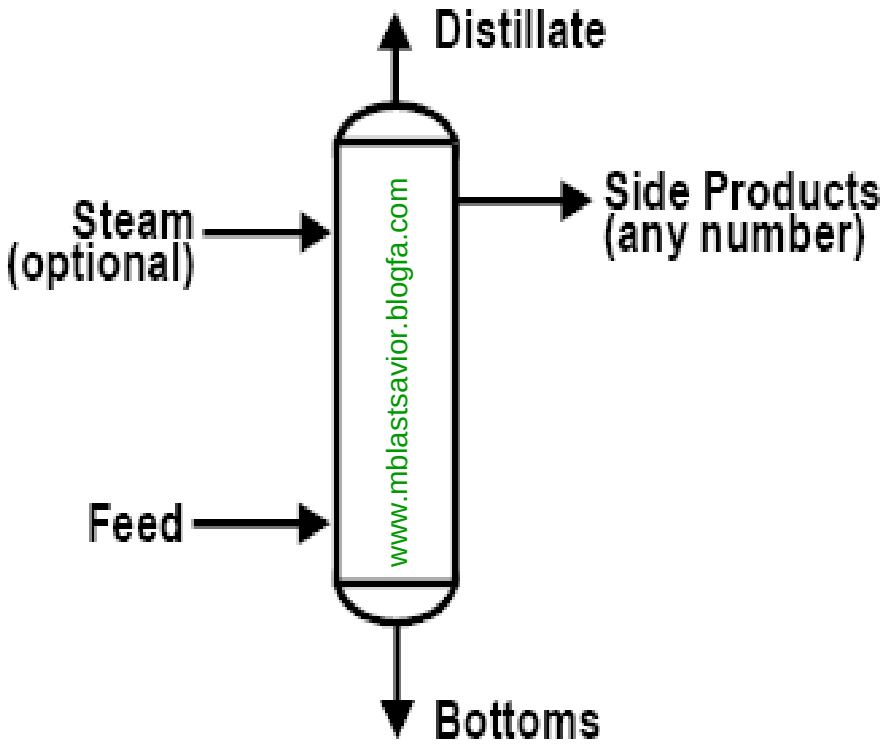
۲. طراحی بر اساس دبی جریان مایع و فراریت ثابت در هر قسمت از برج

۳. طراحی Shortcut برج تقطیر

۴. تقسیم برج با n محصول به n-1 قسمت و تعیین پارامترهای زیر برای هر قسمت:

- فشار جریان محصول
- تخمین دبی محصول یا نسبت محصول به خوراک

www.DownloadSoftware.iR



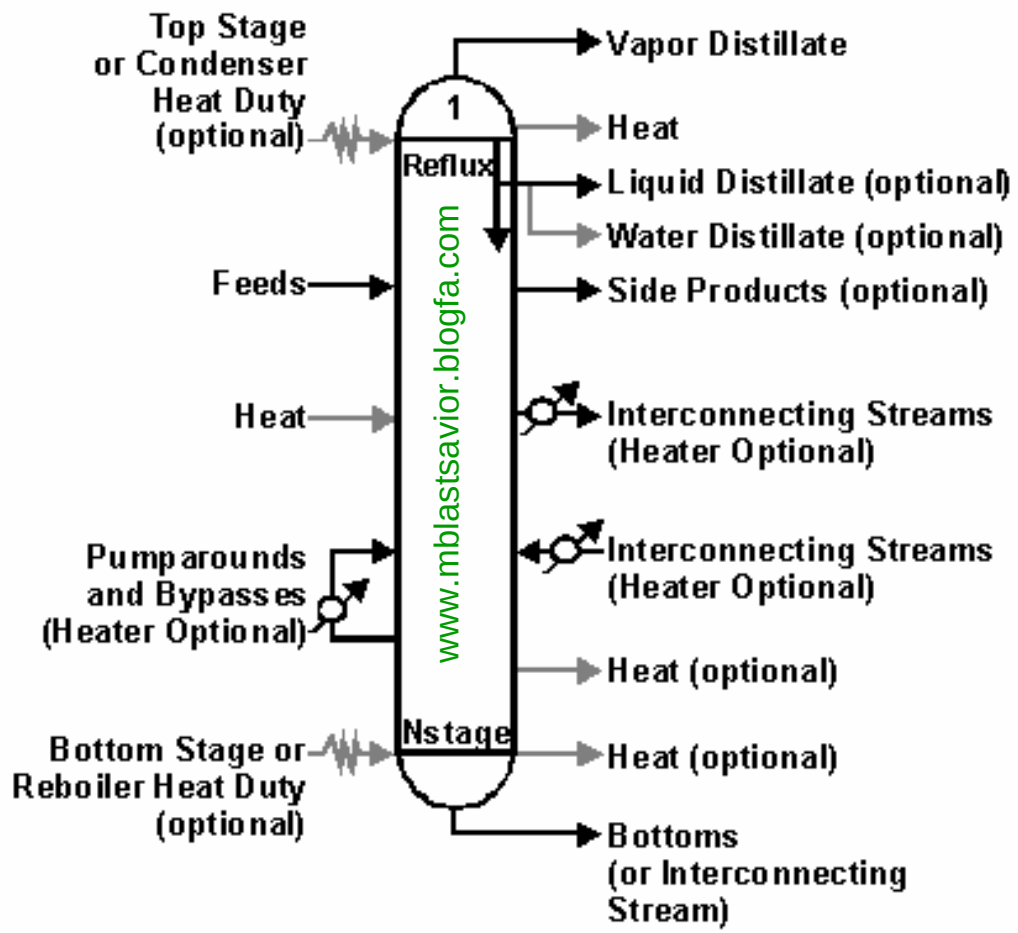
www.DownloadSoftware.iR

MultiFrac

- یک مدل دقیق برای شبیه سازی برجهای جداسازی چندین مرحله ای
- کاربردهای عمده:
  - برجهای شامل گرم شدن مراحل برج (Petlyuk Tower)
  - برجهای جداسازی هوا
  - ترکیب برجهای جذب و دفع
  - برجهای واحد اتیلن
- Flowsheet Connectivity for Extract

www.DownloadSoftware.iR

Flowsheet Connectivity for MultiFrac



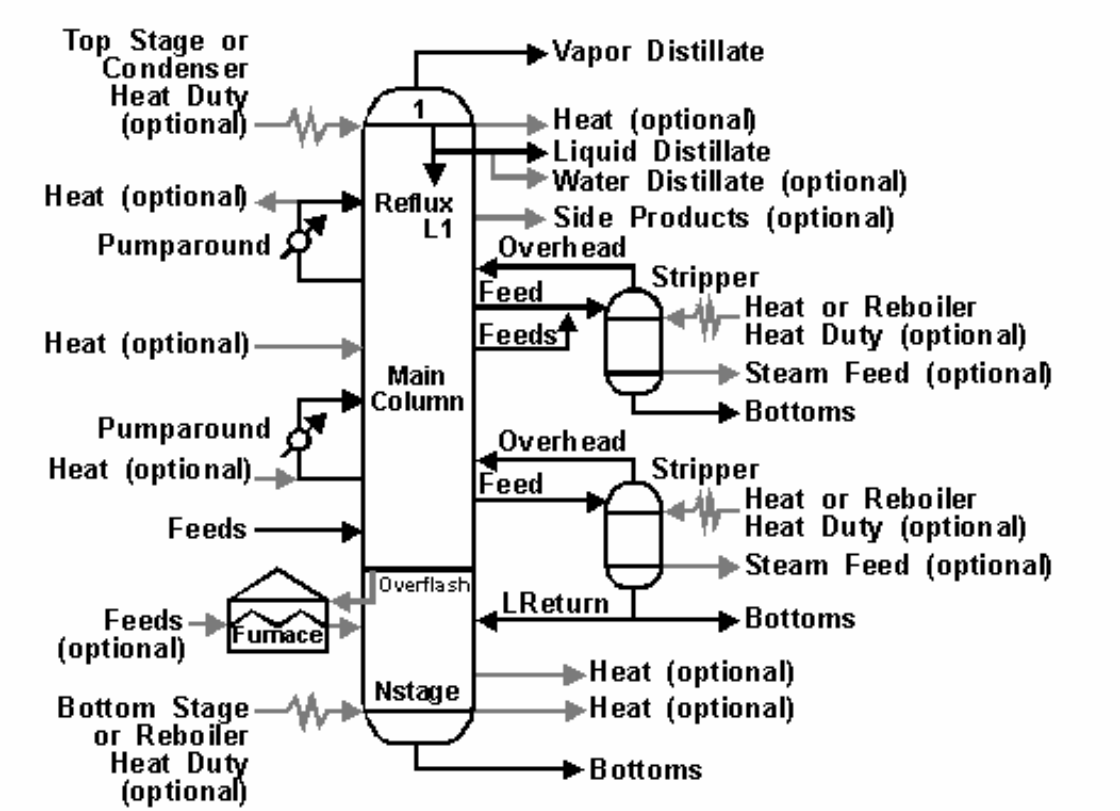
www.DownloadSoftware.iR

PetroFrac

- یک مدل دقیق برای شبیه سازی برجهای نفتی
- عمدتاٌ شامل یک کوره، چندین Pump Around و چند Side Stripper
- ویژگی اصلی: وجود انواع کوره در Block
- بررسی این برجها در مبحث محیطهای نفتی انجام خواهد شد.
- Flowsheet Connectivity for Extract

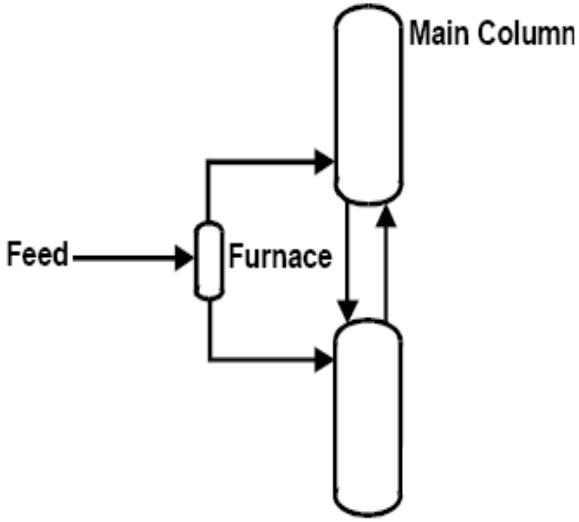
www.DownloadSoftware.iR

Flowsheet Connectivity for PetroFrac

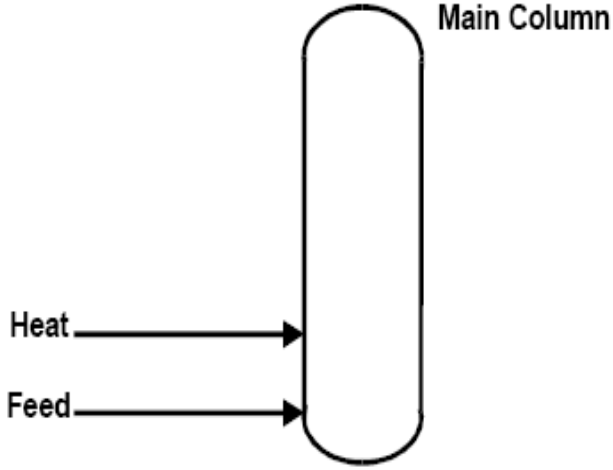


www.DownloadSoftware.iR

انواع کوره ها در PetroFrac



Furnace Modeled as a Single Stage Flash

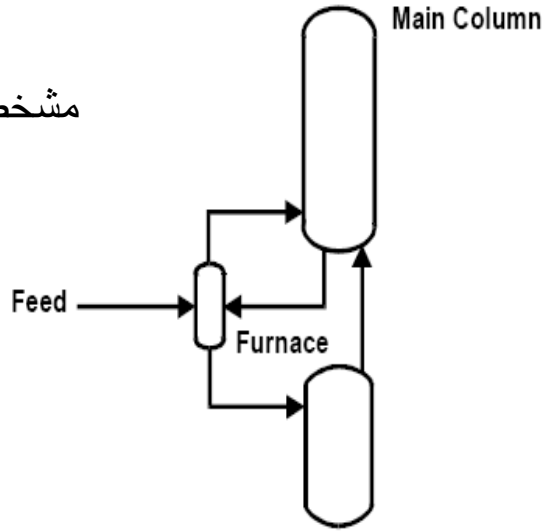


Furnace Modeled as a Stage Heat Duty

مشخصه لازم:میزان گرما

مشخصه لازم:میزان گرما و فشار

یا دما و فشار



Furnace Modeled as a Single Stage Flash with Overflash Bypass

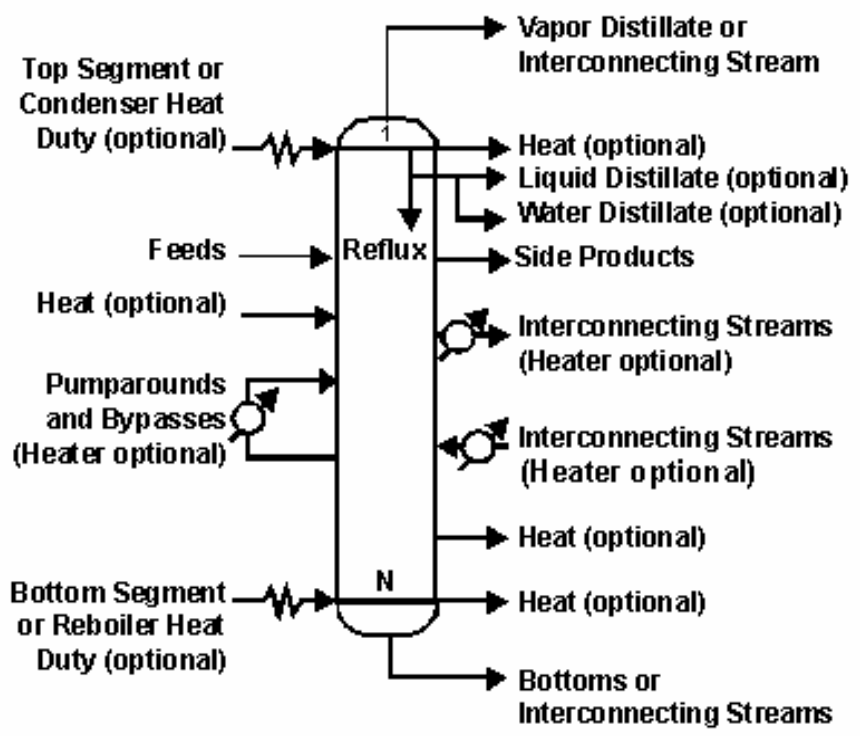
www.DownloadSoftware.iR

RateFrac

- یک مدل دقیق برای شبیه سازی انواع برجهای سینی دار و پرشده
- استفاده از روشهای حل برج برای محاسبه بازده
- استفاده از ویژگیهای سیال و مکانیکال داخل برج برای محاسبه ضرایب انتقال جرم
- امکان گزارش بازده
- Flowsheet Connectivity for Extract

www.DownloadSoftware.iR

Flowsheet Connectivity for RateFrac



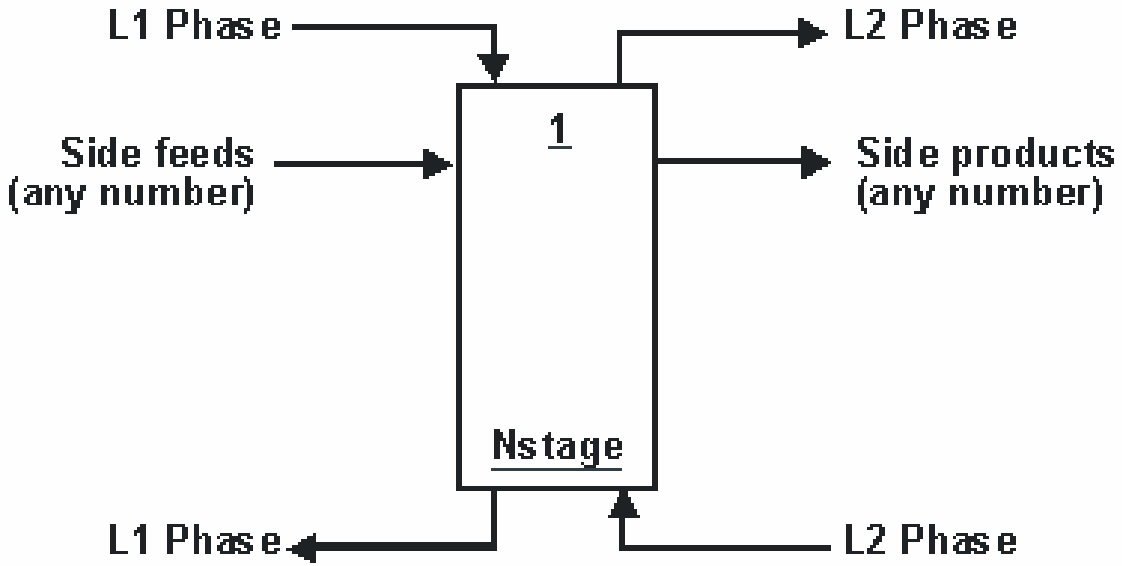
www.DownloadSoftware.iR

Extract

- مورد استفاده در فرآیندهای استخراج مایع-مایع
- قابلیت توزیع مواد بین دو فاز مایع با مدلهای اکتیویته یا رابطه توزیع وابسته به دما (KLL)
- قابلیت کار در ۳ حالت آدیاباتیک، با پروفایل مشخص دما در طول مراحل، با یک پروفایل مشخص حرارت در طول مراحل
- انتخاب ترکیبات اصلی در هر فاز با Key Component
- تعیین فشار برای حداقل یک مرحله
- Flowsheet Connectivity for Extract

www.DownloadSoftware.iR

Flowsheet Connectivity for Extract



Material Streams

inlet	One material stream to the first (top) stage, rich in the first liquid phase (L1) One material stream to the last (bottom) stage, rich in the second liquid phase (L2) One material stream per intermediate stage (optional)
outlet	One material stream for L1 from the last stage One material stream for L2 from the first stage Up to two side product streams per stage, one for L1 and one for L2 (optional)

www.DownloadSoftware.iR

SCFrac (ادامه)

- **تعیین 2(n-1) مشخصه از میان پارامترهای زیر:**

۱. ایندکس جداسازی در هر قسمت (تعداد سینی ها در Total Reflux)

۲. دبی یا ریکاوری مواد در جریان محصول نسبت به ورودی آن در خوراک

۳. مقدار یک خاصیت در جریان محصول با استفاده از Property Set

۴. تفاوت در خواص جریانات محصول

۵. نسبت خواص یکسان برای جریانهای محصول متفاوت

www.DownloadSoftware.iR

Reactions

www.DownloadSoftware.iR

About Reactions and Chemistry

There are two types of reaction systems and Aspen Plus uses different methods for simulating them:

Type of reaction system	Description	Use this Data Browser Form
Electrolytes solution chemistry	Reactions involving the formation of ionic species	Chemistry
Non-electrolyte reactions	Rate-controlled or equilibrium limited. For reactors and reactive distillation modeling.	Reactions

www.DownloadSoftware.iR

(1)Powerlaw reactions

(واكنشهاي توانـي)

www.DownloadSoftware.iR

1.Equilibrium Reactions (for RCSTR only)

$$\ln Keq = A + B/T + C*\ln(T) + D*T$$

Where:

Keq = Equilibrium constant

T = Temperature in Kelvin

A, B, C, D = User-supplied coefficients

The definition of *Keq* depends on the basis you select in the Keq Basis list.

www.DownloadSoftware.iR

Keq Basis	Equilibrium Constant Definition
Mole gamma (default)	$Keq = \Pi (xi\ \gamma i)\upsilon i$ (liquid only)
Molal gamma	$Keq = \Pi (mi\ \gamma i)\upsilon i$ (electrolytes, liquid only)
Mole fraction	$Keq = \Pi (xi)\upsilon i$
Mass fraction	$Keq = \Pi (xi^m)\upsilon i$
Molarity	$Keq = \Pi (Ci)\upsilon i$
Molality	$Keq = \Pi (mi)\upsilon i$ (liquid only)
Fugacity	$Keq = \Pi (fi)\upsilon i$
Partial pressure	$Keq = \Pi (pi)\upsilon i$ (vapor only)
Mass concentration	$Keq = \Pi (Ci^m)\upsilon i$

Where:

Keq	=	Equilibrium constant
x	=	Component mole fraction
x^m	=	Component mass fraction
C	=	Molarity (kgmole/m^3)
m	=	Molality (gmole/kg-H2O)
γ	=	Activity coefficient
f	=	Component fugacity (N/m^2)
p	=	Partial pressure (N/m^2)
C^m	=	Mass concentration (kg/m^3)
υ	=	Stoichiometric coefficient (positive for products, negative for reactants)

www.DownloadSoftware.iR

If you choose Compute Keq From Gibbs Energies, you do not need to enter coefficients for the equilibrium constant.

Aspen Plus will compute the Keq from the reference state Gibbs free energy of the components.

www.DownloadSoftware.iR

2.Rate-Controlled Reactions

kinetic type reactions (واکنشهاي کينتيکي)

www.DownloadSoftware.iR

[Ci] Basis	Power Law Expression (To is not specified)	Power Law Expression (To is specified)
Molarity (default)	$r = kT^n e^{-E/RT} \prod (C_i)^{\alpha_i}$	$r = k(T/T_o)^n e^{(-E/R)[1/T - 1/T_o]} \prod (C_i)^{\alpha_i}$
Molality (electrolytes only)	$r = kT^n e^{-E/RT} \prod (m_i)^{\alpha_i}$	$r = k(T/T_o)^n e^{(-E/R)[1/T - 1/T_o]} \prod (m_i)^{\alpha_i}$
Mole fraction	$r = kT^n e^{-E/RT} \prod (x_i)^{\alpha_i}$	$r = k(T/T_o)^n e^{(-E/R)[1/T - 1/T_o]} \prod (x_i)^{\alpha_i}$
Mass fraction	$r = kT^n e^{-E/RT} \prod (x_i^m)^{\alpha_i}$	$r = k(T/T_o)^n e^{(-E/R)[1/T - 1/T_o]} \prod (x_i^m)^{\alpha_i}$
Partial pressure (vapor only)	$r = kT^n e^{-E/RT} \prod (p_i)^{\alpha_i}$	$r = k(T/T_o)^n e^{(-E/R)[1/T - 1/T_o]} \prod (p_i)^{\alpha_i}$
Mass concentration	$r = kT^n e^{-E/RT} \prod (C_i^m)^{\alpha_i}$	$r = k(T/T_o)^n e^{(-E/R)[1/T - 1/T_o]} \prod (C_i^m)^{\alpha_i}$

Where:

r	=	Rate of reaction
k	=	Pre-exponential factor
T	=	Temperature in degrees Kelvin
To	=	Reference temperature in degrees Kelvin
n	=	Temperature exponent
E	=	Activation energy
R	=	Universal gas law constant
x	=	Mole fraction
x^m	=	Mass fraction
C	=	Molarity (kgmole/m^3)
m	=	Molality (gmole/kg-H2O)
C^m	=	Mass concentration (kg/m^3)
p	=	Partial pressure (N/m^2)
α	=	Concentration exponent
i	=	Component index

www.DownloadSoftware.iR

The units of the reaction rate and the pre-exponential factor depend

on the:

- Order of the reaction
- Concentration basis selected in the [Ci] Basis list box

www.DownloadSoftware.iR

The units for the pre-exponential factor are as follows:

When [Ci] Basis is	Units are: (To is not specified)	Units are: (To is specified)
Molarity	$\dfrac{\text{kgmole} - \text{K}^{-n}}{\text{sec} - (\text{holdup unit})\left(\dfrac{\text{kgmole}}{\text{m}^3}\right)^{\Sigma\alpha_i}}$	$\dfrac{\text{kgmole}}{\text{sec} - (\text{holdup unit})\left(\dfrac{\text{kgmole}}{\text{m}^3}\right)^{\Sigma\alpha_i}}$
Molality	$\dfrac{\text{kgmole} - \text{K}^{-n}}{\text{sec} - (\text{holdup unit})\left(\dfrac{\text{gmole}}{\text{kg H}_2\text{O}}\right)^{\Sigma\alpha_i}}$	$\dfrac{\text{kgmole}}{\text{sec} - (\text{holdup unit})\left(\dfrac{\text{gmole}}{\text{kg H}_2\text{O}}\right)^{\Sigma\alpha_i}}$
Mole fraction or Mass fraction	$\dfrac{\text{kgmole} - \text{K}^{-n}}{\text{sec} - (\text{holdup unit})}$	$\dfrac{\text{kgmole}}{\text{sec} - (\text{holdup unit})}$
Partial pressure	$\dfrac{\text{kgmole} - \text{K}^{-n}}{\text{sec} - (\text{holdup unit})\left(\dfrac{\text{N}}{\text{m}^2}\right)^{\Sigma\alpha_i}}$	$\dfrac{\text{kgmole}}{\text{sec} - (\text{holdup unit})\left(\dfrac{\text{N}}{\text{m}^2}\right)^{\Sigma\alpha_i}}$
Mass concentration	$\dfrac{\text{kgmole} - \text{K}^{-n}}{\text{sec} - (\text{holdup unit})\left(\dfrac{\text{kg}}{\text{m}^3}\right)^{\Sigma\alpha_i}}$	$\dfrac{\text{kgmole}}{\text{sec} - (\text{holdup unit})\left(\dfrac{\text{kg}}{\text{m}^3}\right)^{\Sigma\alpha_i}}$

www.DownloadSoftware.iR

(2)Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson (LHHW)

واكنشهاي كاتاليستي(جذب مواد اوليه - واكنش- جدا شدن محصولات)

www.DownloadSoftware.iR

Rate-Controlled Reactions for LHHW

For rate-controlled reactions, the LHHW rate expression can be written as:

$$\gamma = \frac{(\text{kinetic factor})(\text{driving force expression})}{(\text{adsorption expression})}$$

Where:

واکنش

Kinetic factor (if *To* is specified) = $k\left(\frac{T}{T_o}\right)^n e^{(-E_a/R)[1/T-1/To]}$

Kinetic factor (if *To* is not specified) = $kT^n e^{-E_a/RT}$

جدا شدن محصولات

Driving force expression = $K_1\left(\prod C_i^{v_i}\right) - K_2\left(\prod C_j^{v_j}\right)$

جذب مواد اولیه

Adsorption expression = $\left\{\Sigma K_i\left(\prod C_j^{v_j}\right)\right\}^m$

Where:

r	=	Rate of reaction
k	=	Pre-exponential factor
T	=	Temperature in Kelvin
T_o	=	Reference temperature in Kelvin
n	=	Temperature exponent
E_a	=	Activation energy
R	=	Universal gas law constant
C	=	Component concentration
m	=	Adsorption expression exponent
K_1, K_2, K_i	=	Equilibrium constants
υ	=	Concentration exponent
i, j	=	Component index

www.DownloadSoftware.iR

مثال ۱۵:(واکنش کاتالیستي)

واکنش 2CHCL3+2H20+O2=>2CO2+6HCL بر روي سطح کاتالیستي

R=KCa/(1+KpCp+KaCa) g/cc.s a=CHCL3 , p=HCL

K=.372e9*exp(-21700(cal/mol.k) /RT) 1/s

Kp=.597e7*exp(-2440(cal/mol.k)/RT) cc/mol

Ka=.123e7*exp(-5330(cal/mol.k)/RT) cc/mol

R=1.987 cal/mol.k

مطلوبست تعریف معادله به شکل لانگمیر

www.DownloadSoftware.iR

Reactive Distillation

REAC-DIST (تقطير واكنشي)

To specify reactions for (تقطير واكنشي) reactive distillation in the distillation models, RadFrac, BatchFrac, and RateFrac, use the Reactions

1. Equilibrium Reactions(مشابه واكنشهاي تواني)
2. Rate Controlled Reactions (مشابه واكنشهاي تواني)

www.DownloadSoftware.iR

Fractional Conversion Reactions (for RadFrac only)

- $Conv = A + B/T + C*ln(T) + D*T$

www.DownloadSoftware.iR

Salt Precipitation Reactions (for RadFrac only)

$$\ln Keq = A + B/T + C*\ln(T) + D*T$$

www.DownloadSoftware.iR

Reactors

www.DownloadSoftware.iR

Model	Description	Purpose	Use For
RStoic	Stoichiometric reactor	Models stoichiometric reactor with specified reaction extent or conversion	Reactors where reaction kinetics are unknown or unimportant but stoichiometry and extent of reaction are known
RYield	Yield reactor	Models reactor with specified yield	Reactors where stoichiometry and kinetics are unknown or unimportant but a yield distribution is known
REquil	Equilibrium reactor	Performs chemical and phase equilibrium by stoichiometric calculations	Reactors with simultaneous chemical equilibrium and phase equilibrium
RGibbs	Equilibrium reactor with Gibbs energy minimization	Performs chemical and phase equilibrium by Gibbs energy minimization	Reactors with phase equilibrium or simultaneous phase and chemical equilibrium. Calculating phase equilibrium for solid solutions and vapor-liquid-solid systems.
RCSTR	Continuous stirred tank reactor	Models continuous stirred tank reactor	One-, two, or three-phase stirred tank reactors with rate-controlled and equilibrium reactions in any phase based on known stoichiometry and kinetics
RPlug	Plug flow reactor	Models plug flow reactor	One-, two-, or three-phase plug flow reactors with rate-controlled reactions in any phase based on known stoichiometry and kinetics
RBatch	Batch reactor	Models batch or semi-batch reactor	One-, two-, or three-phase batch and semi-batch reactors with rate-controlled reactions in any phase based on known stoichiometry and kinetics

www.DownloadSoftware.iR

خلاصه

RSTOICH:استوكيومتري مشخص و سينتيک نامشخص

Ryield:استوكيومتري نامشخص و سينتيک نامشخص

RGIBBS:استوكيومتري نامشخص و سينتيک نامشخص

تعادلي: REQUIL:بر اساس حل همزمان استوكيومتري و تعادل شيميايي

RGIBBS:بر اساس مينيمم كردن انرژي آزاد گيبس

سينتيک مشخص: RCSTR، RPLUG، RBATCH

POWERLAW، LHHW

www.DownloadSoftware.iR

RCSTR, RPlug, and RBatch are kinetic reactor models. Use the Reactions Reactions form to define the reaction stoichiometry and data for these models.

- Molar extent =product(mol/h)/stoich coeff

www.DownloadSoftware.iR

RSTOICH

راکتور گرماي واکنش را از طريق گرماي تشکيل مواد در بانک اطلاعاتي خود محاسبه مي کند

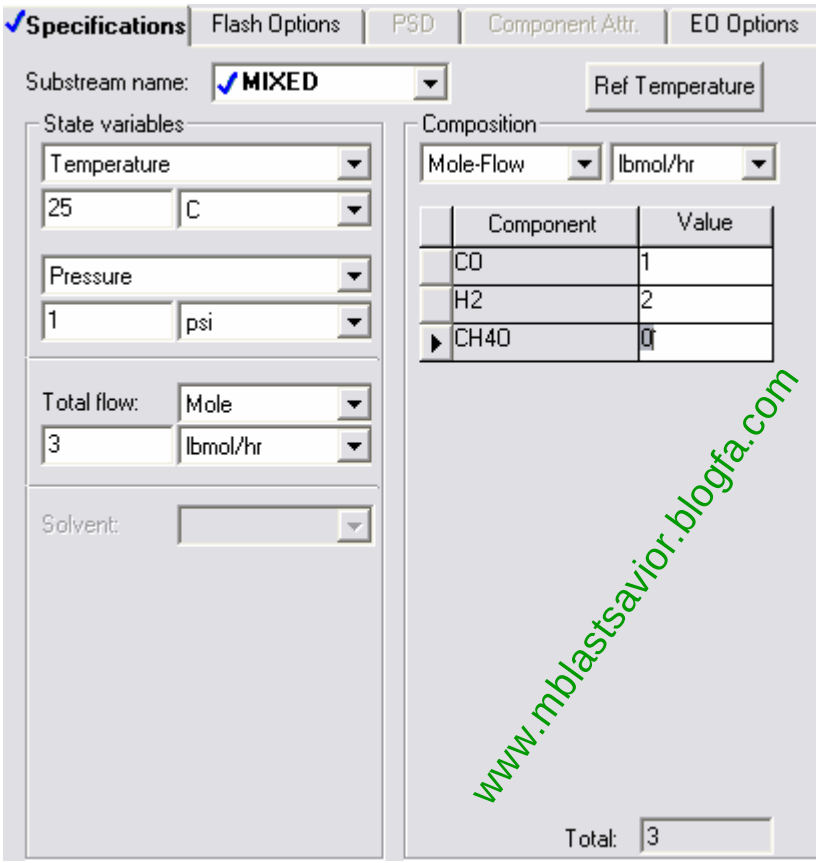
www.DownloadSoftware.iR

مثال ۱۶:Stoichiometric

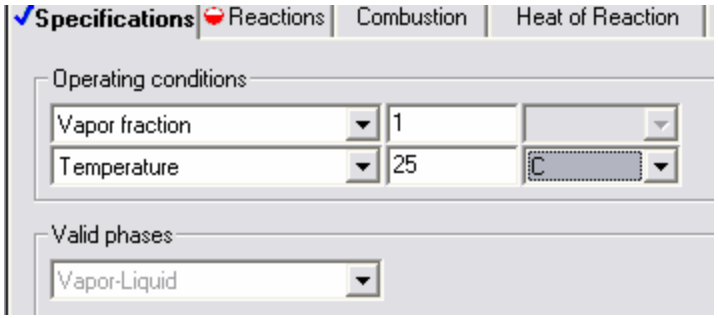
واکنش تولید متانول از مونوکسید کربن و هیدروژن (CO+2H2=>CH3OH) در یک راکتور استوکیومتریک.میزان تبدیل CO صد درصد.واکنش در فاز بخار و در دماي 25Cصورت مي گيرد.ساير اطلاعات واکنش از قبيل سرعت واکنش معلوم نيست.

FEED

Base method:PSRK

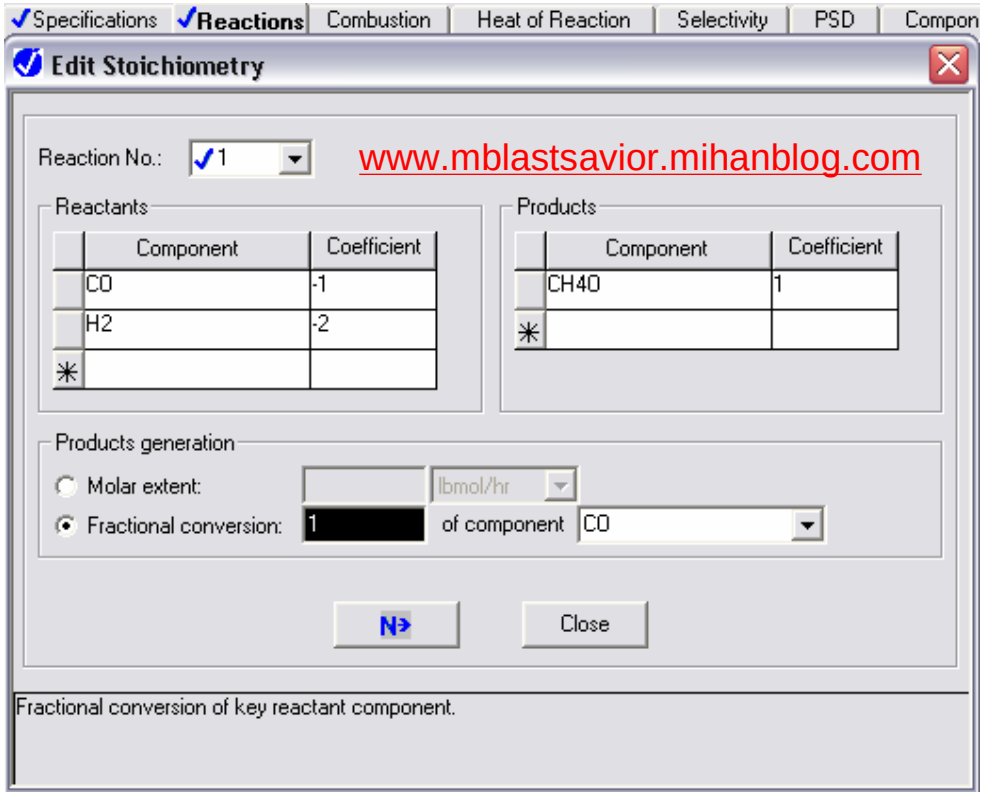


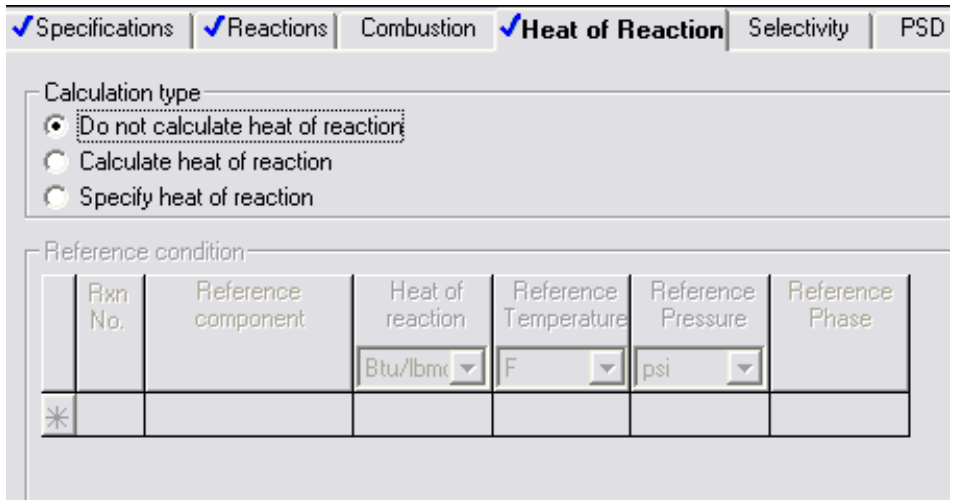
Reactor



www.mblastsavior.blogfa.com

www.DownloadSoftware.iR





واکنش ها ابتدايي فرض مي شوند

www.DownloadSoftware.iR

گزینش پذیري محصولات Selectivity

$$S_{P,A} = \frac{\left[\frac{\Delta P}{\Delta A}\right]_{Real}}{\left[\frac{\Delta P}{\Delta A}\right]_{Ideal}}$$

Where:

ΔP = Change in number of moles of component P due to reaction

ΔA = Change in number of moles of component A due to reaction

In the numerator, *real* represents changes that actually occur in the reactor. Aspen Plus obtains this value from the mass balance between the inlet and outlet.

In the denominator, *ideal* represents changes according to an idealized reaction scheme. This scheme assumes that no reactions are present, except for the reaction that produces the selected component from the reference component. Therefore, the denominator indicates how many moles of P are produced per mole of A consumed in an ideal stoichiometric equation, or:

www.DownloadSoftware.iR

$$\left[\frac{\Delta P}{\Delta A}\right]_{Ideal} = \frac{\upsilon_P}{\upsilon_A}$$

where υ_P and υ_A are stoichiometric coefficients.

This example shows how RStoic calculates selectivity:

$a1\ \mathrm{A} + b1\ \mathrm{B} \rightarrow c1\ \mathrm{C} + d1\ \mathrm{D}$

$c2\ \mathrm{C} + e2\ \mathrm{E} \rightarrow p2\ \mathrm{P}$

$a3\ \mathrm{A} + f3\ \mathrm{F} \rightarrow q3\ \mathrm{Q}$

The selectivity of P to A is:

$$S_{P,A} = \left[\frac{Moles\ of\ P\ produced}{Moles\ of\ A\ consumed}\right] / \left[\frac{c1 * p2}{a1 * c2}\right]$$

In most cases, selectivity ranges between 0 and 1. However, if the selected component is also produced from components other than the reference component, selectivity may be greater than 1. If the selected component is consumed in other reactions, selectivity may be less than 0.

www.DownloadSoftware.iR

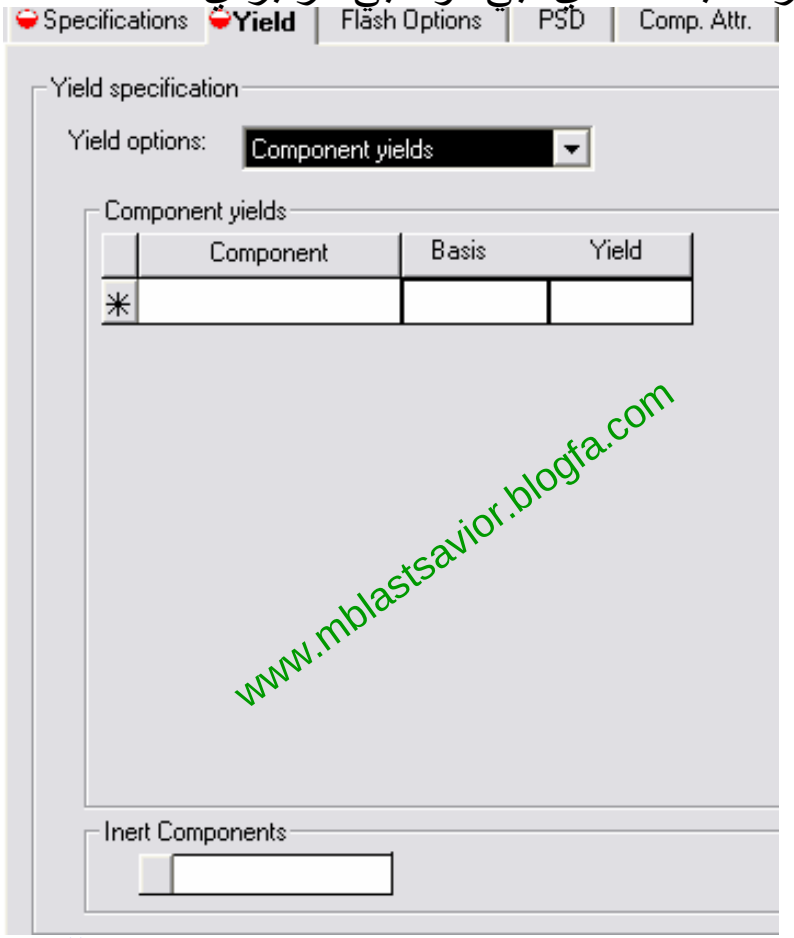
RYield Reference

Use RYield to model a reactor when:

- Reaction stoichiometry is unknown or unimportant
- Reaction kinetics are unknown or unimportant
- Yield distribution is known

بايد تبديل به ازاي كل دبي جرمي خوراک به استثناي دبي مواد بي اثر براي محصولات معين شود

براي سيستمهاي تک،دو و سه فازي



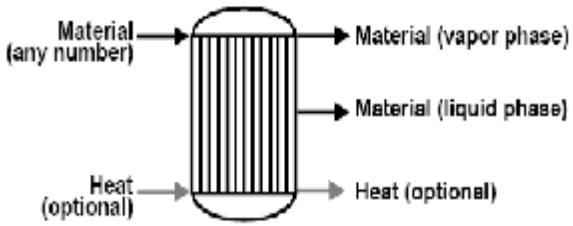
www.mblastsavior.blogfa.com

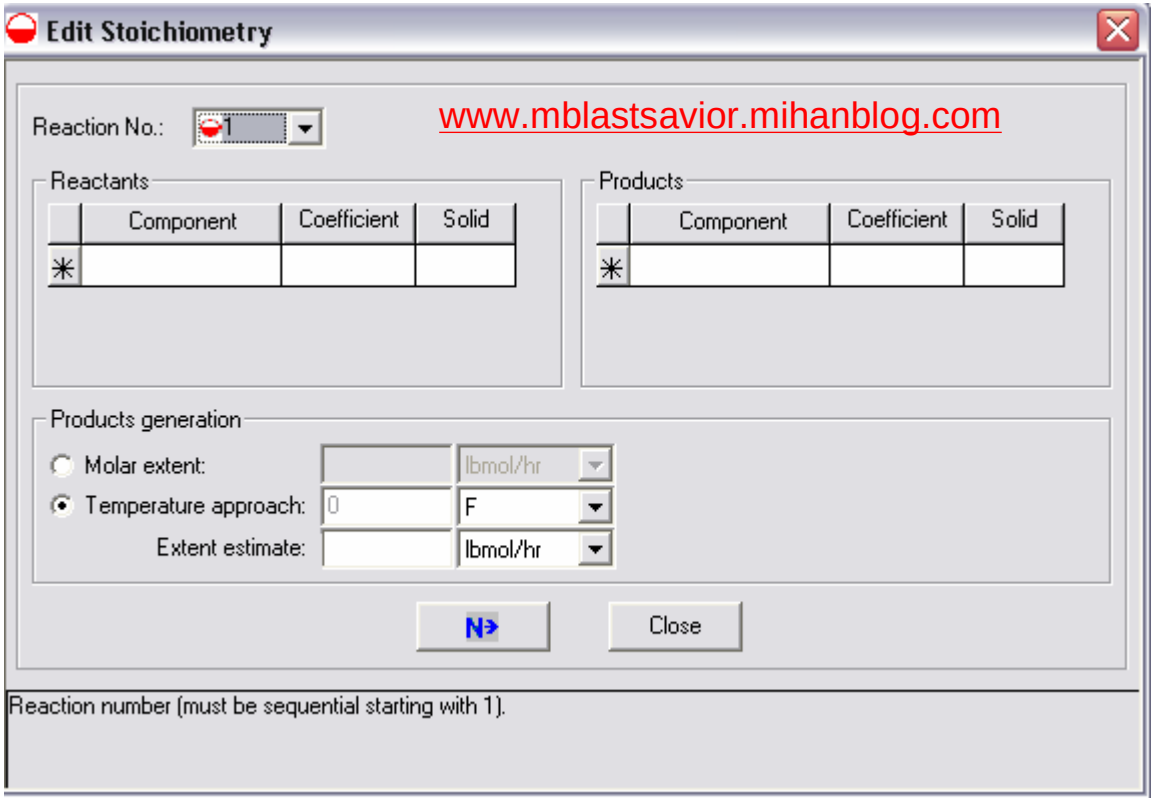
www.DownloadSoftware.iR

REquil Reference

Use REquil to model a reactor when:

- Reaction stoichiometry is known and
- Some or all reactions reach chemical equilibrium





www.DownloadSoftware.iR

You must specify the reaction stoichiometry and the reactor conditions. If no additional specifications are given, REquil assumes that the reactions will reach equilibrium.
REquil calculates equilibrium constants from the Gibbs energy.
You can restrict the equilibrium by specifying one of the following:

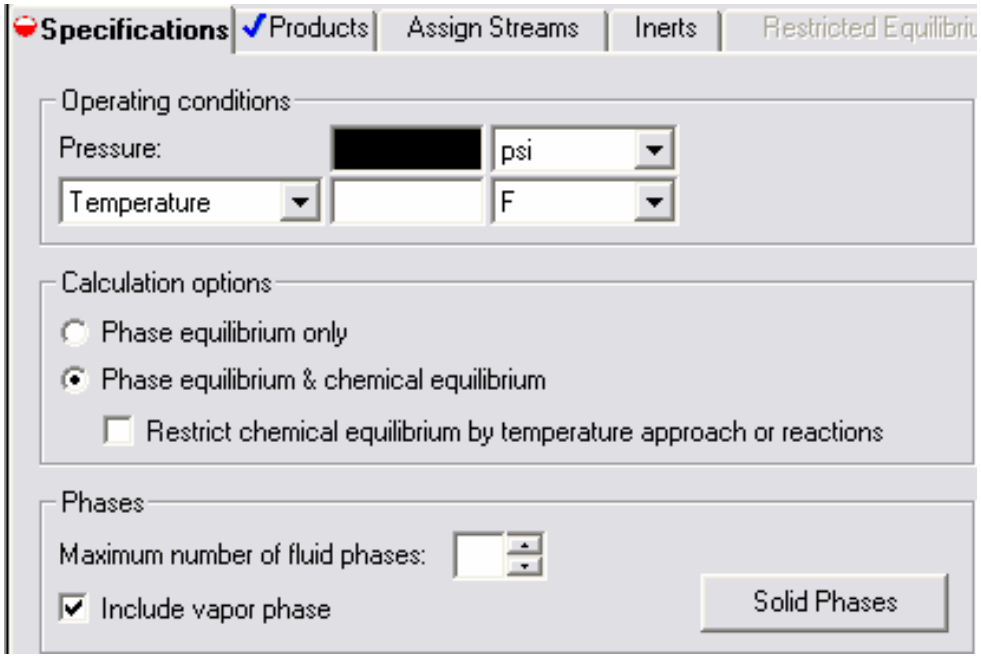
- The molar extent for any reaction
- A temperature approach to chemical equilibrium (for any reaction)

If you specify temperature approach, ΔT, REquil evaluates the chemical equilibrium constant at $T + \Delta T$, where T is the reactor temperature (specified or calculated).
REquil performs single-phase property calculations or two-phase flash calculations nested inside a chemical equilibrium loop.
REquil cannot perform three-phase calculations.

www.DownloadSoftware.iR

RGibbs Reference

مینیمم کردن انرژي آزاد گیبس



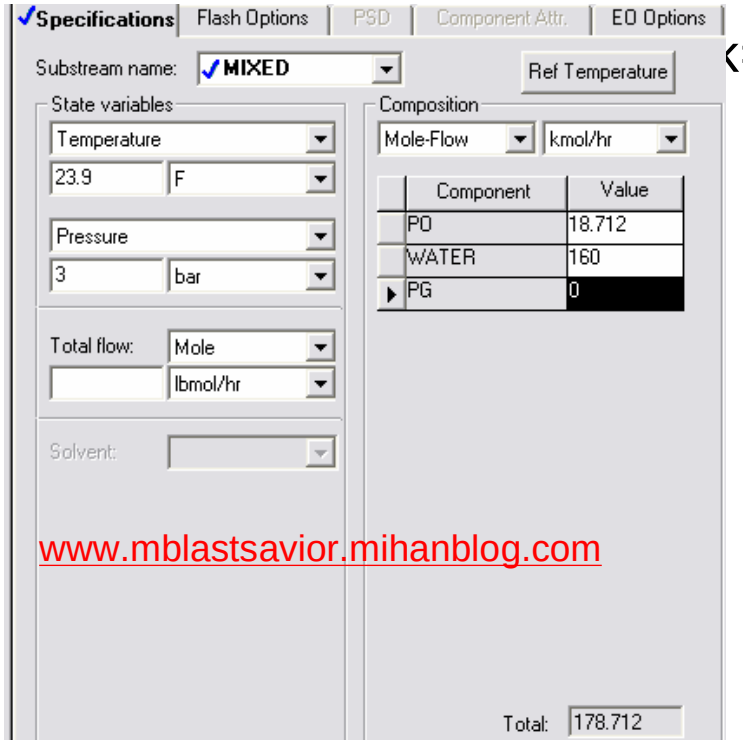
www.DownloadSoftware.iR

مثال ۱۷:CSTR

واکنش تولید پروپان دي ال از پروپیلن اکسید و آب در راکتور CSTR

(PO+H2P=>PG)

FEED

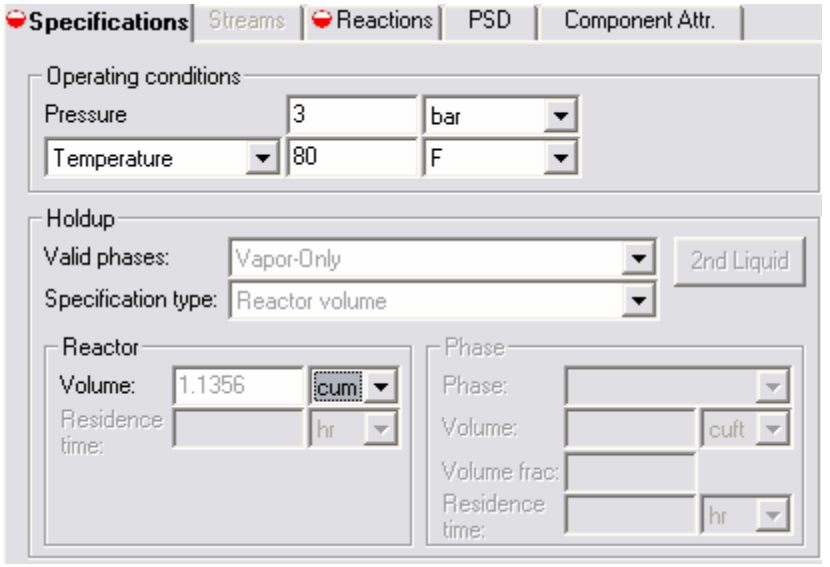


www.mblastsavior.mihanblog.com

$k=9{,}15e22\ n=o\ E=1556e5\ j/kmol$ $-r=kC_{po}^{2}$

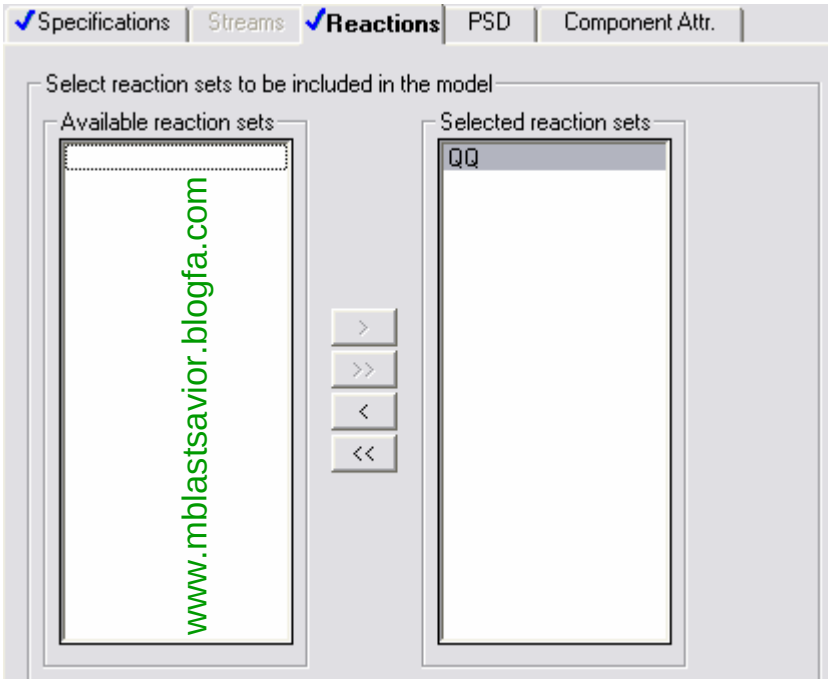
Base method:wilson

Reactor

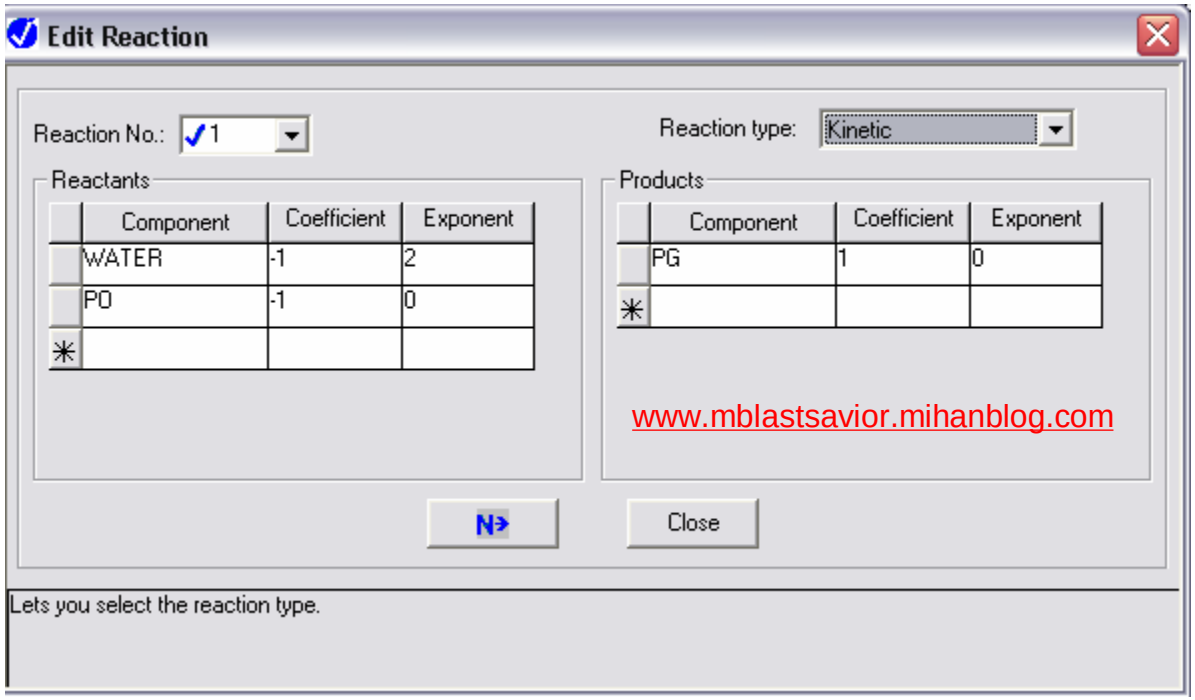


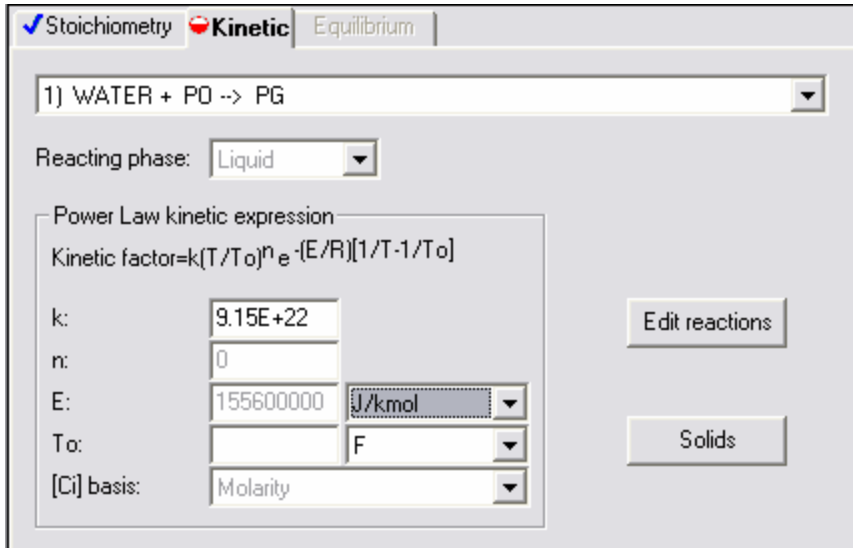
www.DownloadSoftware.iR

Reactor



www.DownloadSoftware.iR





Reaction

www.DownloadSoftware.iR

مثال ۱۸ (راکتور PFR)

واکنش تولید بنزن از تولوئن(H2+toluene=>methane+benzene) در یک راکتور PFR انجام مي گيرد.قطر راکتور 10tf وطول نامشخص.

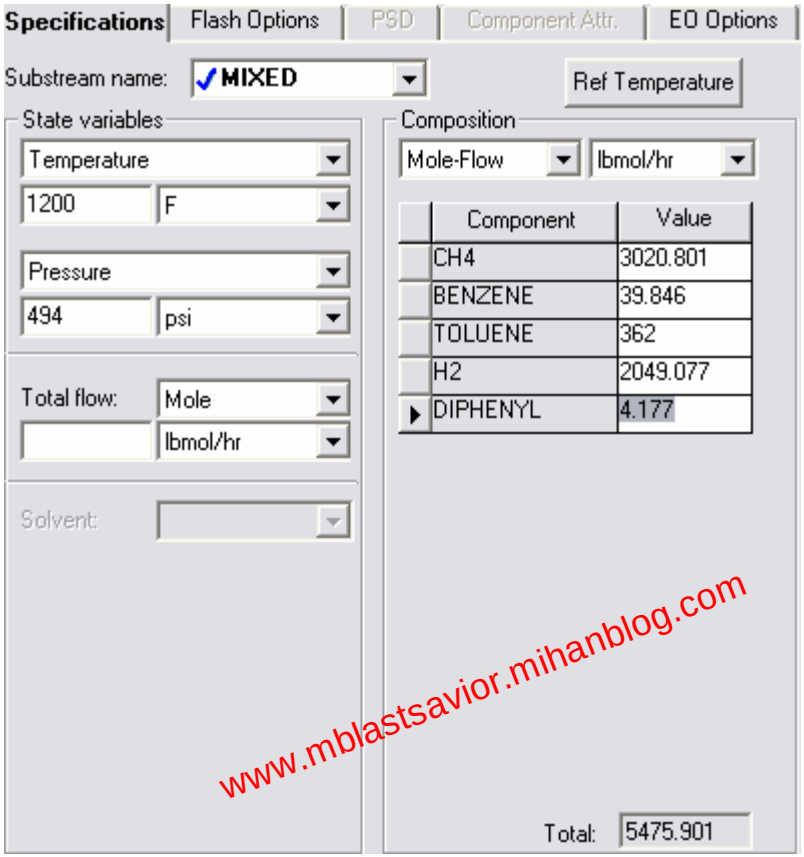
مطلوبست محاسبه طول به نحوي که ميزان تبديل تولوئن ۷۵% باشد.(افت فشار کل 5 psi)

$R=K*C_{H20}\ ^{\wedge}.5*C_{toluene}$

K=6.3e10*exp(-52000(cal/mol)/RT)

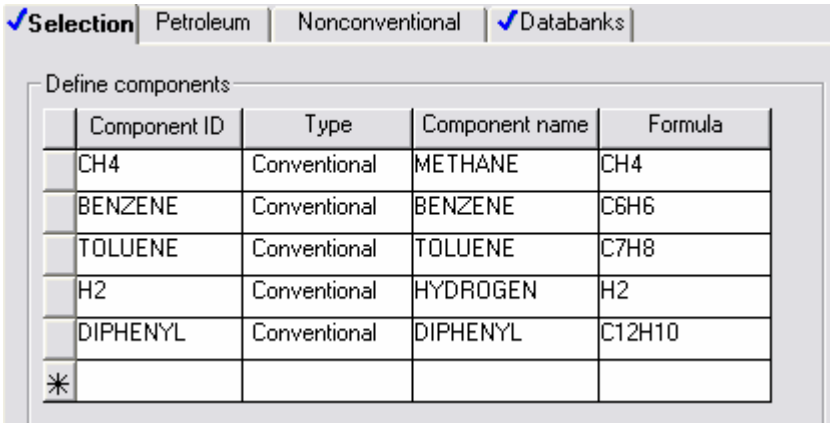
Base method:Peng-ROB

FEED

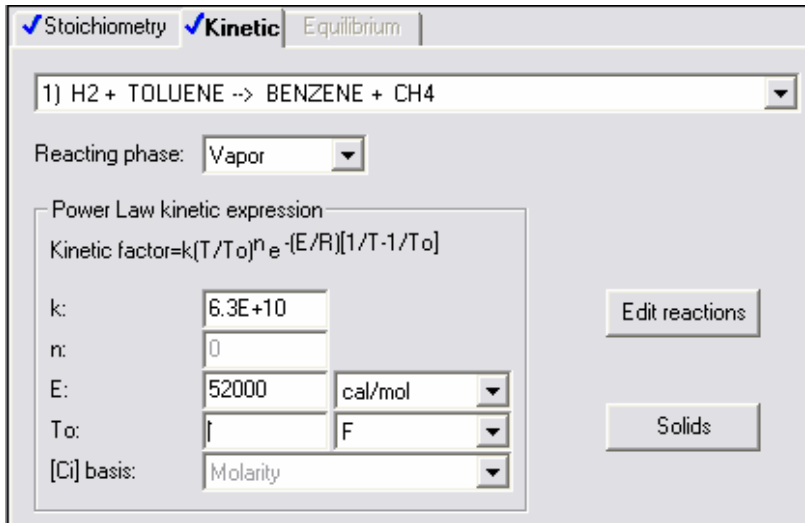


www.mblastsavior.mihanblog.com

Component



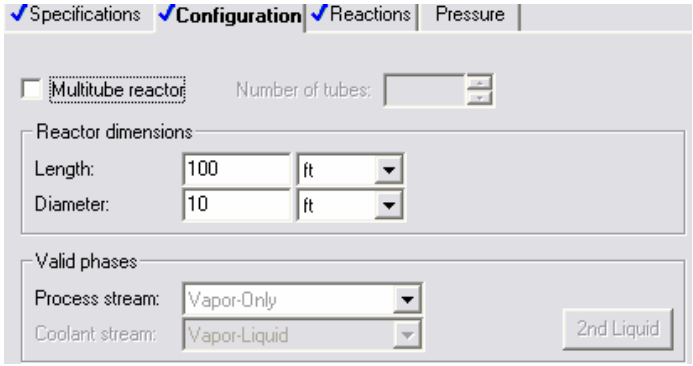
www.DownloadSoftware.iR



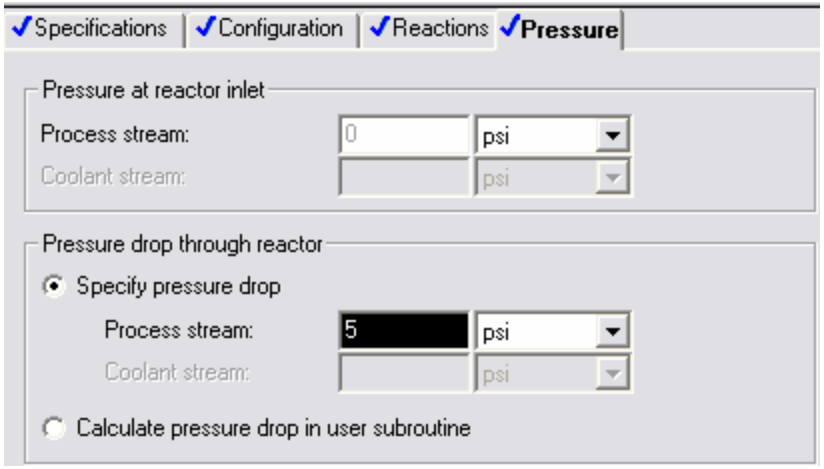
Reaction

www.DownloadSoftware.iR

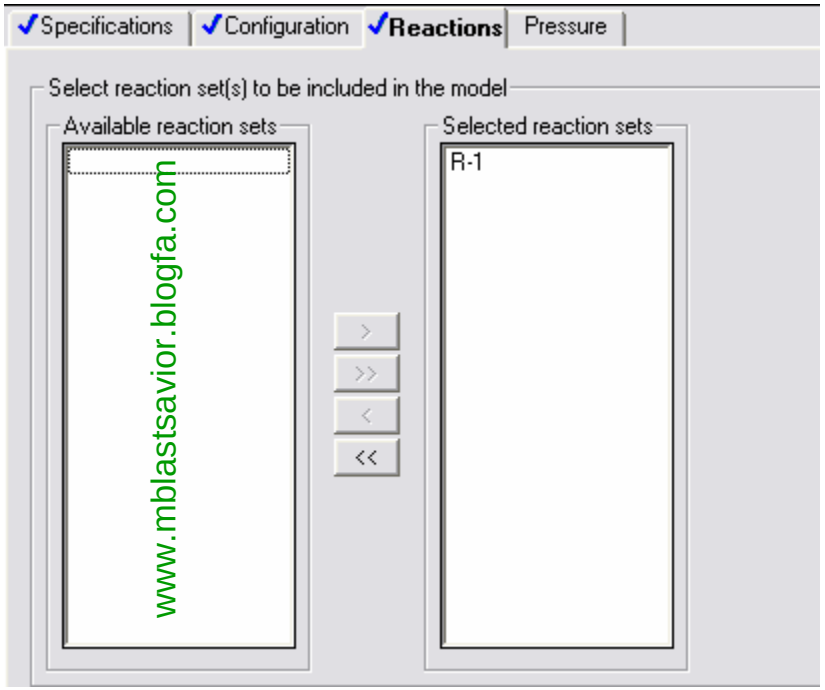
Reactor



Reactor



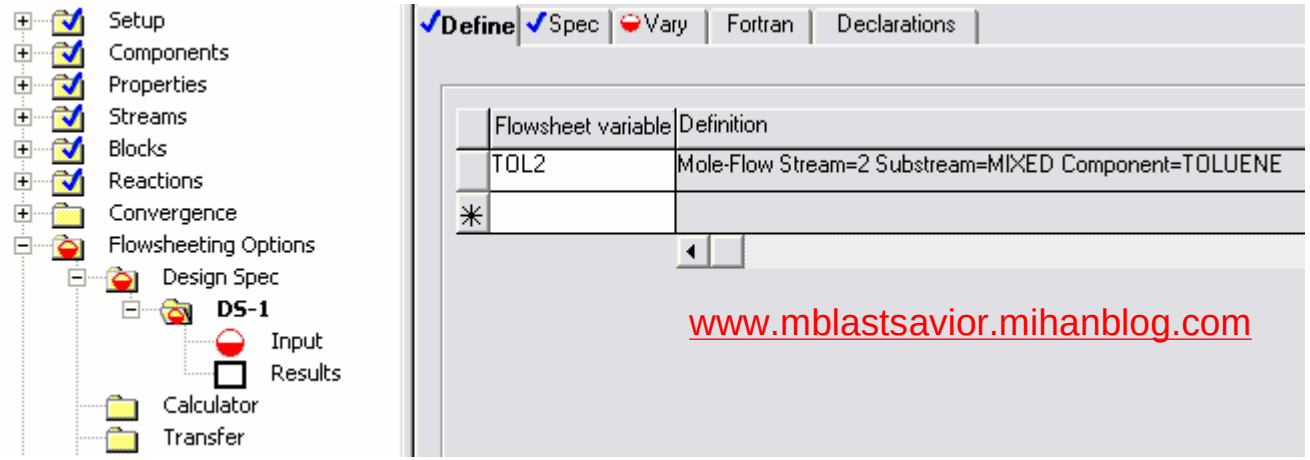
Reactor

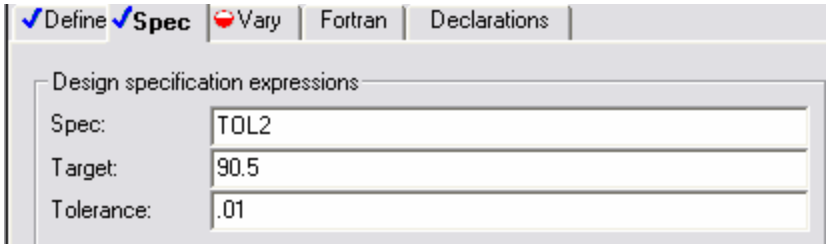


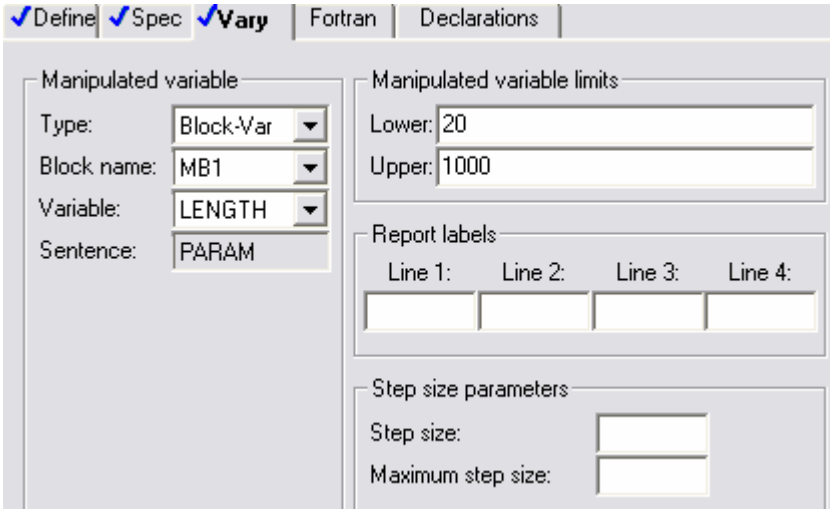
Reactor

www.DownloadSoftware.iR

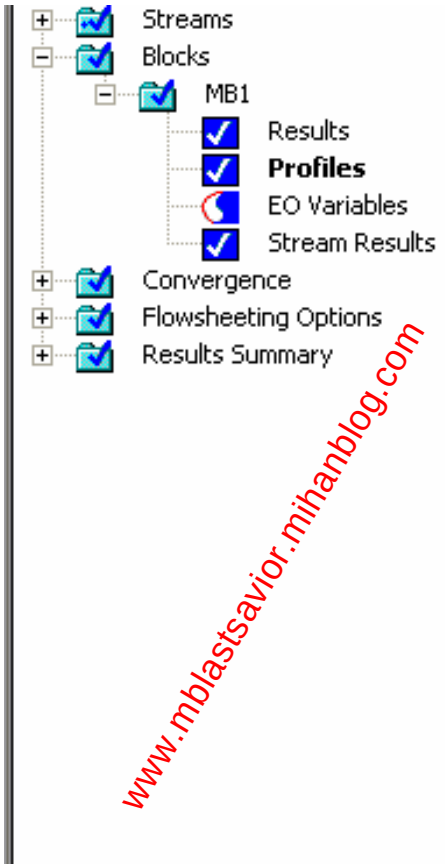
Design Spec







www.DownloadSoftware.iR



www.mblastsavior.mihanblog.com

Process Stream | Coolant Stream | Properties | User Variables | Comp

Process stream profiles

View: Summary Substream: MIXED

Reactor length (ft)	Pressure (psi)	Temperature (F)	Molar vapor fraction	Residence time (hr)
0	494	1199.99999	1	0
4.79836697	493.5	1207.10787	1	0.00188597
9.59673393	493	1214.3187	1	0.00376227
14.3951009	492.5	1221.57407	1	0.00562872
19.1934679	492	1228.78437	1	0.00748540
23.9918348	491.5	1235.84434	1	0.00933248
28.7902018	491	1242.63881	1	0.01117028
33.5885688	490.5	1249.05382	1	0.01299921
38.3869357	490	1254.9871	1	0.01481979
43.1853027	489.5	1260.35221	1	0.01663260
47.9836697	489	1265.0954	1	0.01843833

www.DownloadSoftware.iR

تخمین خواص

(Property Estimation)

www.DownloadSoftware.iR

تحلیل خواص توسط معادله ترمودینامیکی (Property Analysis)

اهداف:

- بررسی خواص محاسبه شده توسط معادله ترمودینامیکی
- بررسی میزان اطمینان به نتایج شبیه سازی

کاربردها:

- خواص ترکیبات خالص
- خواص سیستم های دو جزیی
- رسم منحنی های Residue
- تحلیل سایر کمیت ها (در صورت عدم وجود کمیت در نرم افزار)
- تحلیل خواص جریان (مانند PV، PT، PT، Bubble/Dew)

www.DownloadSoftware.iR

What Property Parameters Can Aspen Plus Estimate?

Property Estimation in Aspen Plus can estimate many of the property parameters required by physical property models, including:

- Pure component thermodynamic and transport property model parameters
- Binary parameters for the Wilson, NRTL, and UNIQUAC activity coefficient models

www.DownloadSoftware.iR

تخمین خواص توسط سایر اطلاعات ورودی کاربر
(Property Estimation)

اهداف:

- تخمین پارامترهای مدلهای ترمودینامیکی و خواص ترکیبات خالص (در صورت عدم وجود در بانک اطلاعات)

کاربردها:

- پارامترهای مدلهای ترمودینامیکی
- پارامترهای مدلهای انتقالی
- ضرایب دوجزیی (بعضی از معادلات)(wilson,NRTL,UNIQUAC)

www.DownloadSoftware.iR

تخمین خواص توسط سایر اطلاعات ورودی کاربر (Property Estimation) (ادامه)

مهمترین اطلاعات مورد نیاز برای تخمین خواص:

- ساختار مولکولی
- دمای جوش نرمالNBP
- دما، فشار و حجم بحرانی

ذکر چند نمونه:

- محاسبه ویسکوزیته با استفاده از MW,TC,PC & Structure با روش REICHENBERG
- تخمین نقطه جوش با استفاده از Structure با روش JOBACK
- تخمین نقطه جوش با استفاده از TC,PC & PVبا روش MANI

www.DownloadSoftware.iR

Required Information for Parameter Estimation

The minimum information required for parameter estimation is:

- Normal boiling point temperature (TB)
- Molecular weight (MW)
- Molecular structure, preferably entered using the General method

Property Estimation uses normal boiling point and molecular weight to estimate many parameters. You can greatly reduce the propagation of errors in estimating other parameters by using the experimental value of TB. If you do not supply TB and MW but you enter the general molecular structure, Property Estimation can estimate TB and MW.

To obtain the best possible estimates for all parameters, enter all the experimental data that is available.

www.DownloadSoftware.iR

تخمین خواص توسط سایر اطلاعات ورودی کاربر (Property Estimation) (ادامه)

- چگونگی تعریف ساختار مولکولی برای نرم افزار
  - روش General
  - روش Functional Group
- مشخص کردن پارامترهای مورد نظر برای تخمین
- تخمین خواص مواد خالص
- تخمین خواص وابسته به دما
- تخمین ضرایب دوجزیی
- مقایسه نتایج تخمین با داده های آزمایشگاهی

www.DownloadSoftware.iR

Property Names and Estimation Methods for Pure Component Constants

Description	Parameter	Method	Information Required †
Molecular weight	MW	FORMULA	Structure
Normal boiling point	TB	JOBACK	Structure
		OGATA-TSUCHIDA	Structure
		GANI	Structure
		MANI	TC, PC, Vapor pressure data
Critical temperature	TC	JOBACK	Structure, TB
		LYDERSEN	Structure, TB
		FEDORS	Structure
		AMBROSE	Structure, TB
		SIMPLE	MW, TB
		GANI	Structure
		MANI	TC, PC, Vapor pressure data
Critical pressure	PC	JOBACK	Structure
		LYDERSEN	Structure, MW
		AMBROSE	Structure, MW
		GANI	Structure
Critical volume	VC	JOBACK	Structure
		LYDERSEN	Structure
		AMBROSE	Structure
		RIEDEL	TB, TC, PC
		FEDORS	Structure
		GANI	Structure
Critical compressibility factor	ZC	DEFINITION	TC, PC, VC
Standard heat of formation	DHFORM	BENSON	Structure
		JOBACK	Structure
		BENSONR8	Structure
		GANI	Structure
Standard Gibbs free energy of formation	DGFORM	JOBACK	Structure
		BENSON	Structure
		GANI	Structure

www.DownloadSoftware.iR

Standard Gibbs free energy of formation	DGFORM	JOBACK BENSON GANI	Structure Structure Structure
Acentric factor	OMEGA	DEFINITION LEE-KESLER	TC, PC, PL TB, TC, PC
Solubility parameter	DELTA	DEFINITION	TB, TC, PC, DHVL, VL
UNIQUAC R	UNIQUAC R	BONDI	Structure
UNIQUAC Q	UNIQUAC Q	BONDI	Structure
Parachor	PARC	PARACHOR	Structure
Solid enthalpy of formation at 25 C	DHSFRM	MOSTAFA	Structure
Solid Gibbs energy of formation at 25 C	DGSFRM	MOSTAFA	Structure
Aqueous infinite dilution Gibbs energy of formation for the Helgeson model	DGAQHG	AQU-DATA THERMO AQU-EST1 AQU-EST2	DGAQFM DGAQFM, S025C DGAQFM S025C
Aqueous infinite dilution enthalpy of formation for the Helgeson model	DHAQHG	AQU-DATA THERMO AQU-EST1 AQU-EST2	DGAQFM DGAQFM, S025C DGAQFM S025C
Entropy at 25 C for the Helgeson model	S25HG	AQU-DATA THERMO AQU-EST1 AQU-EST2	S025C DGAQFM, DHAQFM DGAQFM DHAQFM
Helgeson OMEGA heat capacity coefficient	OMEGHG	HELGESON	S25HG, CHARGE

www.DownloadSoftware.iR

Property Names and Estimation Methods for Temperature-Dependent Properties

Description	Parameter	Method	Information Required †
Ideal gas heat capacity	CPIG	DATA	Ideal gas heat capacity data
		BENSON	Structure
		JOBACK	Structure
		BENSONR8	Structure
Vapor pressure	PL	DATA	Vapor pressure data
		RIEDEL	TB, TC, PC
		LI-MA	Structure, TB
		MANI	TC, PC, Vapor pressure data
Enthalpy of vaporization	DHVL	DATA	Heat of vaporization data
		DEFINITION	TC, PC, PL
		VETERE	MW, TB
		GANI	Structure
		DUCROS	Structure
		LI-MA	Structure, TB
Liquid molar volume	VL	DATA	Liquid molar volume data
		GUNN-YAMADA	TC, PC, OMEGA
		LEBAS	Structure
Liquid viscosity	MUL	DATA	Liquid viscosity data
		ORRICK-ERBAR	Structure, MW, VL, TC, PC
		LETSOU-STIEL	MW, TC, PC, OMEGA
Vapor viscosity	MUV	DATA	Vapor viscosity data
		REICHENBERG	Structure, MW, TC, PC
Liquid thermal conductivity	KL	DATA	Liquid thermal conductivity data
		SATO-RIEDEL	MW, TB, TC
Vapor thermal conductivity	KV	DATA	Vapor thermal conductivity data
Surface tension	SIGMA	DATA	Surface tension data
		BROCK-BIRD	TB, TC, PC
		MCLEOD-SUGDEN	TB, TC, PC, VL, PARC

www.DownloadSoftware.iR

Description	Parameter	Method	Information Required †
Solid heat capacity	CPS	DATA MOSTAFA	Solid heat capacity data Structure
Helgeson C heat capacity coefficient	CHGPAR	HG-AQU HG-CRIS HG-EST	OMEGHG, CPAQ0 OMEGHG, S25HG, CHARGE, IONTYP OMEGHG, S25HG
Liquid heat capacity	CPL	DATA RUZICKA	Liquid heat capacity data Structure

In Flowsheet, Property Analysis, Properties PLUS, or Data Regression runs, Aspen Plus estimates missing binary parameters only if you request them on the Properties Estimation Input Binary sheet. If infinite dilution activity coefficients are estimated or supplied on the Properties Data Mixture form at only one temperature, then the parameters in brackets [ ] are set to zero.

www.DownloadSoftware.iR

Property Names and Estimation Methods for Binary Parameters

Description	Parameter	Method	Information Required †
Wilson parameters	WILSON/2 [WILSON/1]	DATA	Data
		UNIFAC	Structure
		UNIF-LL	Structure
		UNIF- LBY	Structure
		UNIF- DMD	Structure
		UNIF-R4	Structure
NRTL parameters	NRTL/2 [NRTL/1]	DATA	Data
		UNIFAC	Structure
		UNIF-LL	Structure
		UNIF- LBY	Structure
		UNIF- DMD	Structure
		UNIF-R4	Structure
UNIQUAC parameters	UNIQ/2 [UNIQ/1]	DATA	Data
		UNIFAC	Structure, GMUQR, GMUQQ
		UNIF-LL	Structure, GMUQR, GMUQQ
		UNIF- LBY	Structure, GMUQR, GMUQQ
		UNIF- DMD	Structure, GMUQR, GMUQQ
		UNIF-R4	Structure, GMUQR, GMUQQ

www.DownloadSoftware.iR

Defining Molecular Structure Using the General Method

When you use the general method to describe the atoms and bonds in a compound, Aspen Plus automatically generates the required functional groups for the estimation methods used in a particular run.

To use the general method:

1 Sketch the structure of the molecule on paper.

2 Assign a number to each atom, omitting hydrogen. The numbers must be consecutive, starting from 1.

3 From the Data menu, click Properties.

4 In the left pane of the Data Browser, click Molecular Structure.

5 From the Molecular Structure Object Manager, select a component ID for which you want to specify the molecular structure. then click Edit.

In this field	Enter
Number	Unique number identifying an atom in the molecule. This should be the atom number that you assigned in your preliminary drawing.
Type	Atom type (for example, carbon or oxygen)
Bond type	Type of bond that connects a pair of atoms (for example, single or double)

Atom numbers and atom types appear on the correspondence list at the bottom of the form.

www.DownloadSoftware.iR

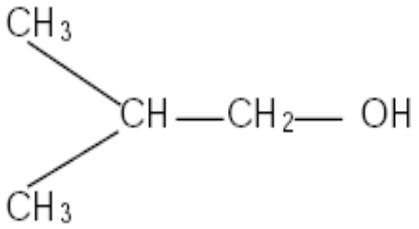
Special Bond Type	Description
Benzene ring	Benzene ring
Sat. 5-member ring	Saturated 5-member ring
Sat. 6-member ring	Saturated 6-member ring
Sat. 7-member ring	Saturated 7-member ring
Sat. hydrocarbon chain	Saturated hydrocarbon chain

When you use these special bond types, the atom numbers assigned to the members of the carbon ring or carbon chain must be consecutive.

مثال ۱۹

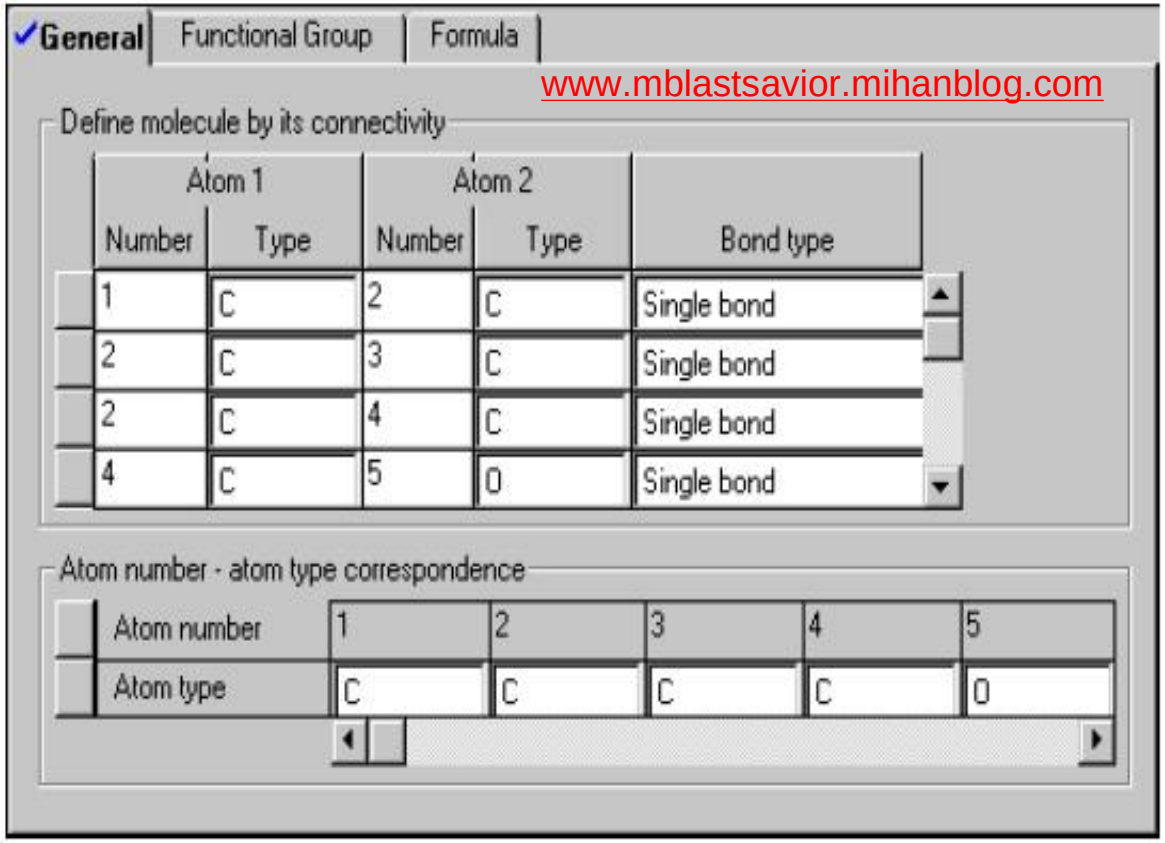
Example of Defining Molecular Structure Using the General Method

Define the molecular structure of isobutyl alcohol (C4H10O) using the general method.



Assign a number to each atom, omitting hydrogen.

www.DownloadSoftware.iR



www.DownloadSoftware.iR

Defining Molecular Structure Using Method-Specific Functional Groups

Use the Properties Molecular Structure Functional Group sheet to enter method-specific functional groups. For each group-contribution method, specify:

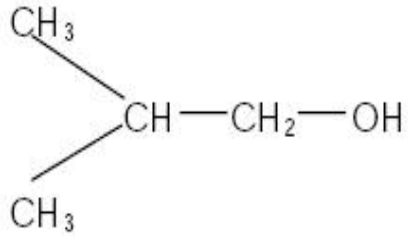
- Functional groups
- Number of times each group occurs in the compound

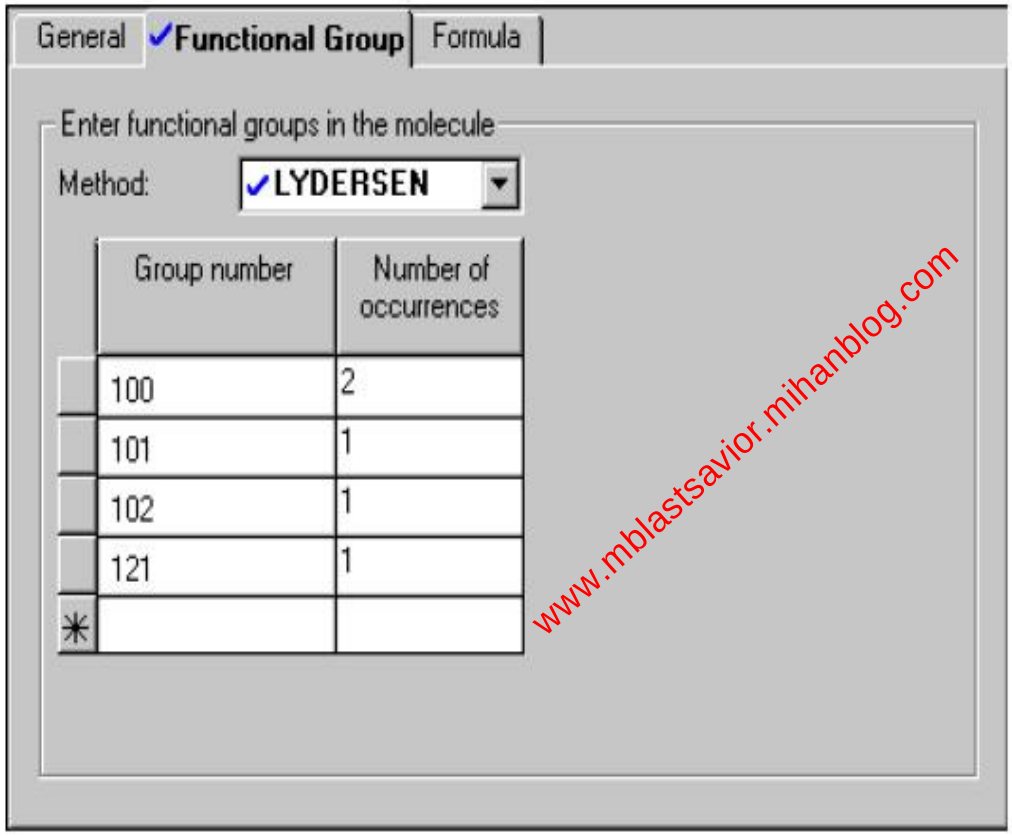
www.DownloadSoftware.iR

Example of Defining Molecular Structure Using Method-Specific Functional Groups

The structure of isobutyl alcohol is defined using the Lydersen method. The Lydersen functional groups are -CH3, >CH2, >CH-, and -OH. The corresponding group numbers are 100, 101, 102, and 121, respectively.

مثال ۲۰





www.mblastsavior.mihanblog.com

www.DownloadSoftware.iR

Identifying Parameters to be Estimated

Option	Estimates
Do not estimate any parameters	Nothing. This is the default.
Estimate all missing parameters	All missing required parameters and any parameters you request on the Pure Component, T-Dependent, Binary, and UNIFAC Group sheets
Estimate only the selected parameters	Only the types of parameters you specify on the Setup sheet. Specific estimations must be specified on the sheets identified by your parameter types selection on this sheet.

The Estimate All Missing Parameters option is strongly recommended unless you:

- Know exactly what parameters are missing and want to estimate only those parameters
- Want to evaluate the estimation methods only for certain parameters

www.DownloadSoftware.iR

Form	What is Specified
Pure Component	Parameter names and estimation methods for pure component constants
T-Dependent	Parameter names and estimation methods for temperature-dependent parameters
Binary	Parameter names and estimation methods for binary parameters
UNIFAC Group	Parameter names for UNIFAC group parameters

When using Property Estimation in Flowsheet, Property Analysis, Data Regression, or Properties Plus run types, if you manually request the estimation of specific parameters using the sheets in the table above, these estimated values are used preferentially over any values available in a databank or on a Properties Parameters form.

You can specify more than one estimation method for a parameter. This allows you to compare the estimates predicted by different methods.

When you specify multiple estimation methods for a parameter required in a Flowsheet, Property Analysis, Data Regression, or Properties Plus run type, the simulation uses the value estimated by the first estimation method selected.

www.DownloadSoftware.iR

مثال ۲۱

Property Estimation

- **تعریف ساختار مولکول ایزوبوتیل الکل و تخمین** TC **با روشهای** Lydersen، Joback **و** Ambrose

- **تخمین فشار بخار برای دامنه ۰ تا ۱۰۰ درجه سانتی گراد با اطلاعات زیر:**

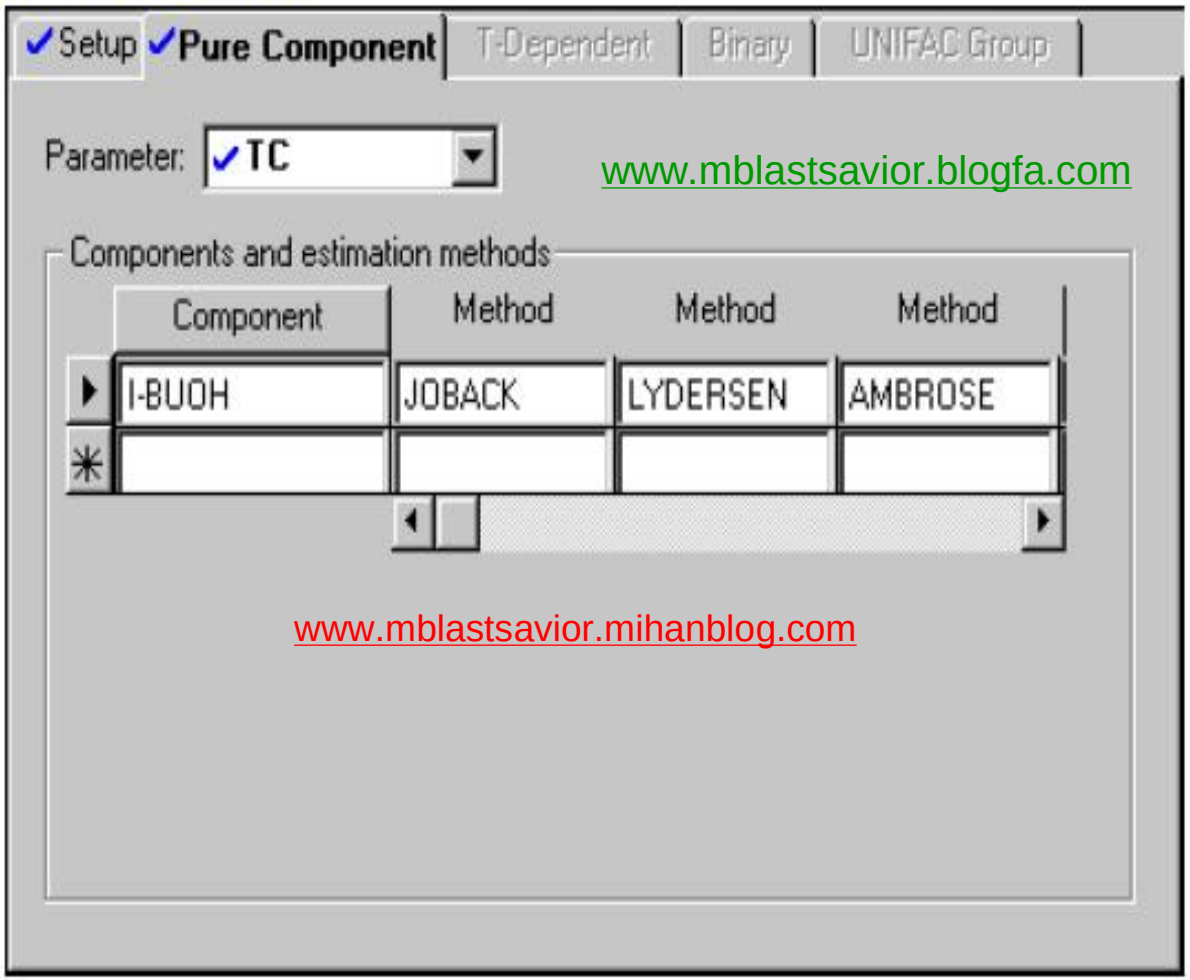
۲۰ °C	.1 psi
3۰ °C	.184 psi
40 °C	.36 psi
50 °C	.7 psi

- **تخمین پارامترهای دوجزیی** Wilson/2 **برای** C2H6-C3H8 در ۳۰°C

www.DownloadSoftware.iR

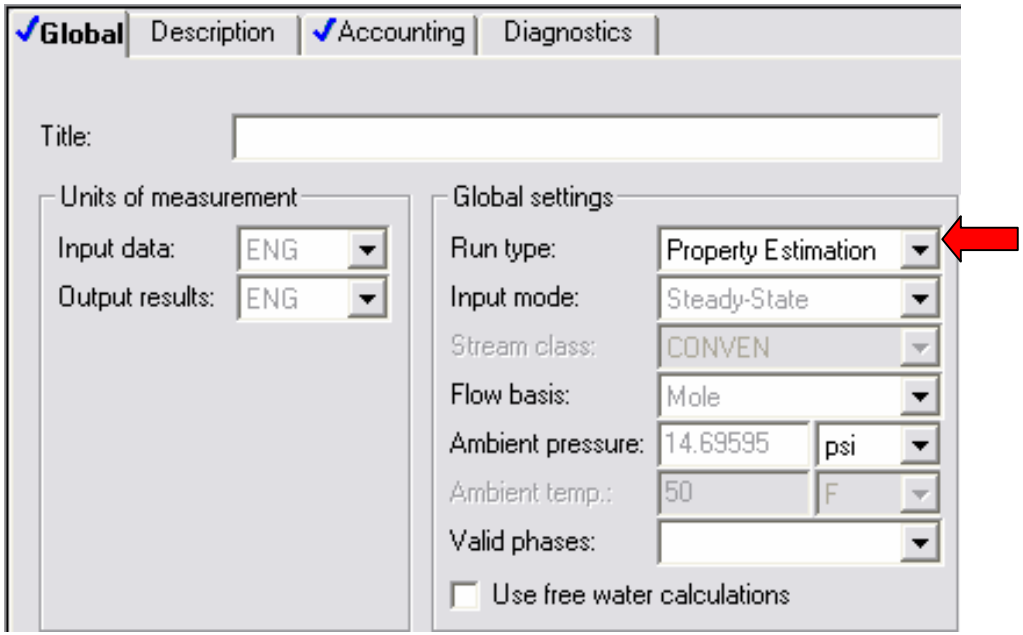
Example for Estimating Critical Temperature

This estimation problem is set up to evaluate the accuracy of three methods (Joback, Lydersen, and Ambrose) for estimating TC for isobutyl alcohol:



www.mblastsavior.blogfa.com
www.mblastsavior.mihanblog.com

www.DownloadSoftware.iR



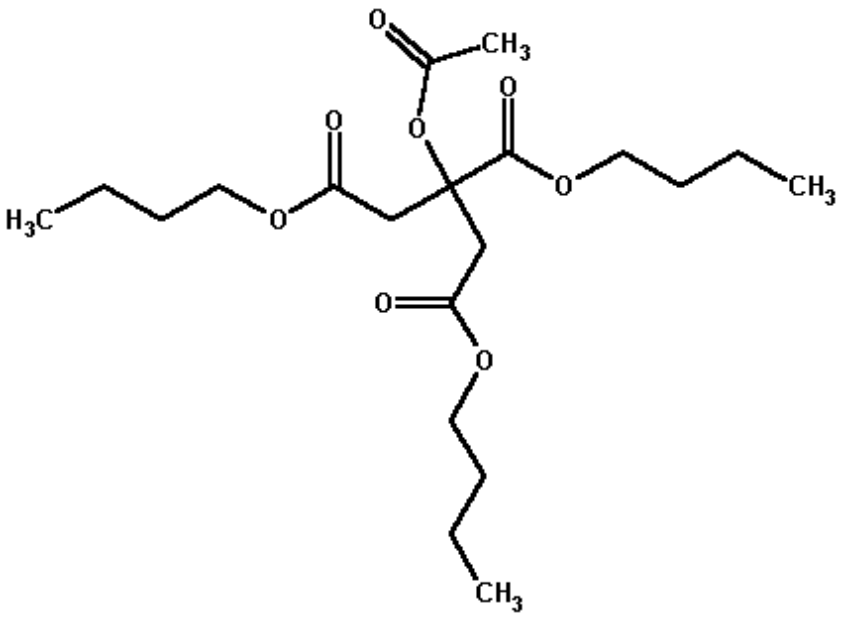
www.DownloadSoftware.iR

When you select	Then Aspen Plus
DATA in the Method field	Uses the experimental data you enter on the Properties Data Pure-Comp form to determine the correlation parameters by regression
DATA in the Method field, and Upper Temp. and Lower Temp.	Uses only the experimental data within the temperature ranges you specify
A method other than DATA	Uses the specified method to estimate the property over a range of temperatures (Upper Temp. and Lower Temp.). Aspen Plus determines the correlation parameters that best fit the estimated data
A method other than DATA and you check the Use Data check box	Combines the experimental data you enter on the Properties Data Pure-Comp form with the estimated values using the method you specified to determine the best correlation parameters

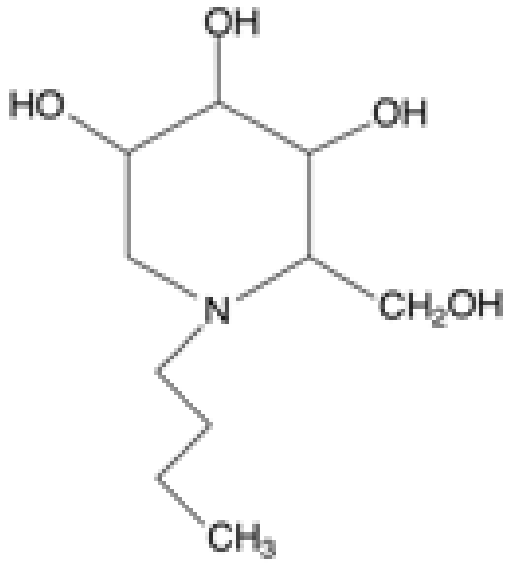
If you combine the experimental data and estimated values (by selecting the Use Data check box), you can assign a weight to the experimental data in the Weight field. The weight is relative to 1.0 for estimated values.

www.DownloadSoftware.iR

Property Estimation ذکر چند مثال

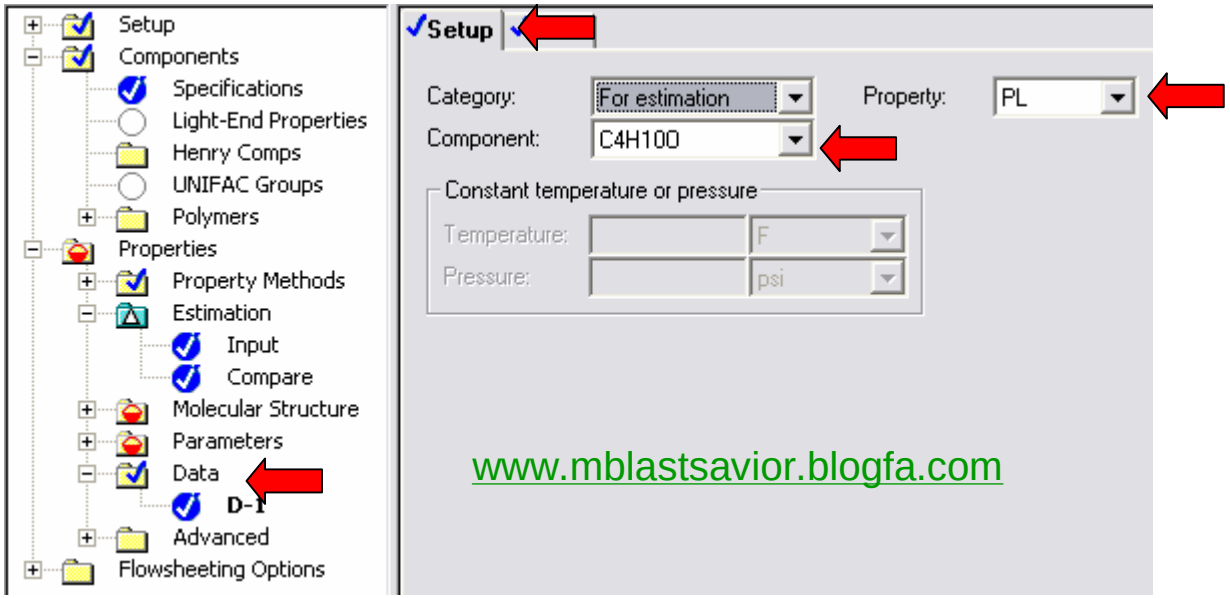


Acetyltri-n-butyl Citrate

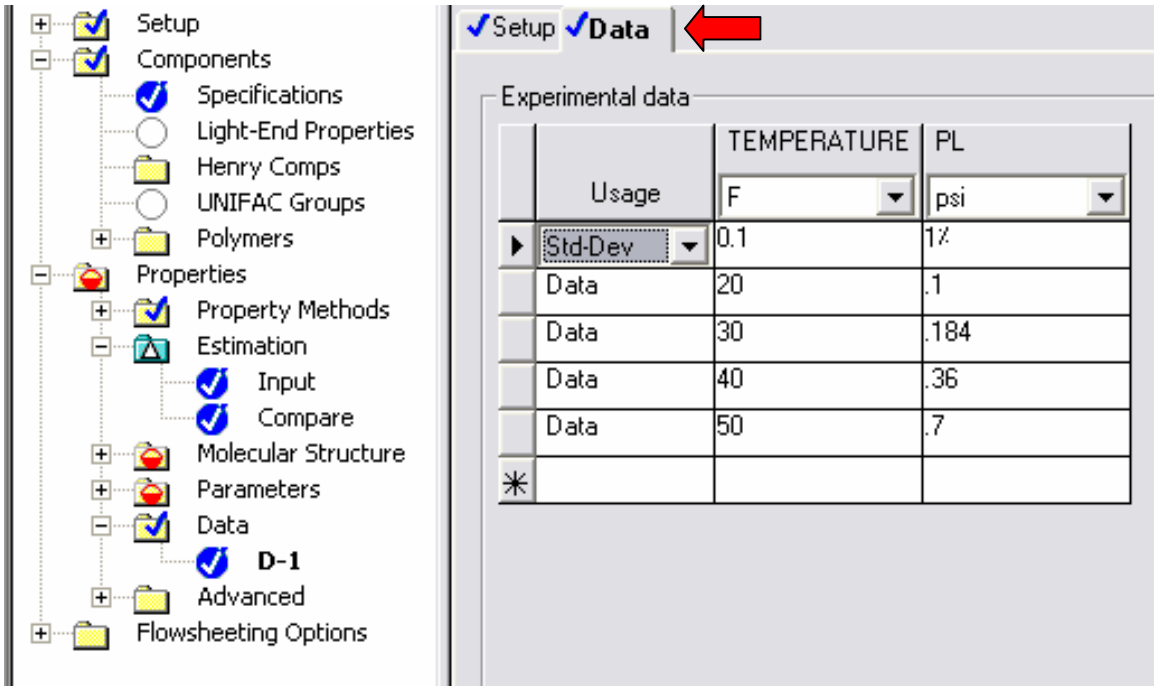


N-butyl deoxynojirimycin

www.DownloadSoftware.iR



www.mblastsavior.blogfa.com



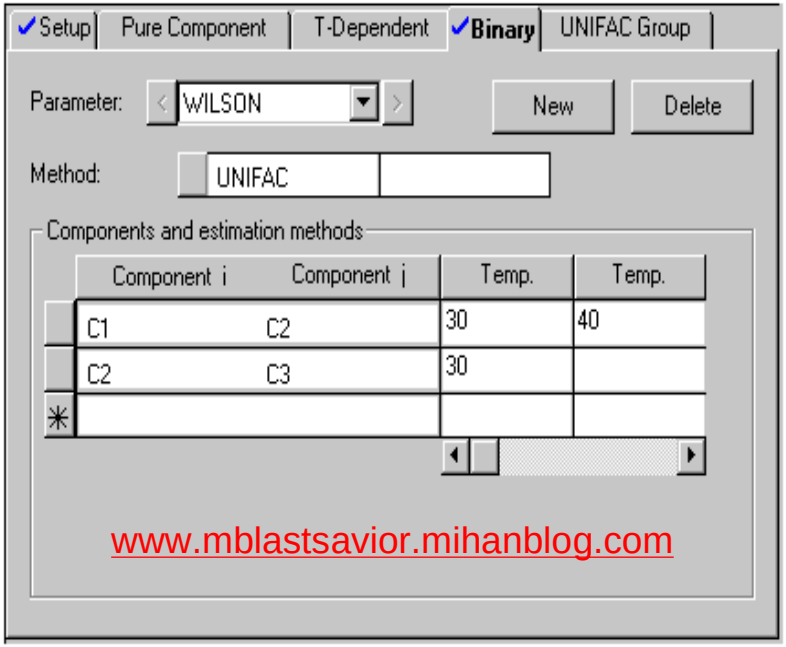
www.DownloadSoftware.iR

When you	Aspen Plus estimates
Enter no temperature value, or enter only one temperature value	Only the second element of the parameter (for example, WILSON/2 for Wilson)
Enter more than one temperature value	Elements one and two of the parameter (for example, WILSON/1, WILSON/2)

9 To request estimation of additional binary parameters, select a different parameter in the Parameter list box, and repeat steps 6, 7 and 8.

Example for Estimating Binary Parameters

Estimate Wilson binary parameters from infinite-dilution activity coefficients generated by UNIFAC. Estimate the infinite-dilution activity coefficients at 30 and 40°C for component pair C1-C2; and at 30°C for component pair C2-C3. For C1-C2, the WILSON/1 and WILSON/2 binary parameters are estimated because two temperatures are requested. For C2-C3, only the WILSON/2 parameter is estimated because only one temperature is requested.



www.mblastsavior.mihanblog.com

www.DownloadSoftware.iR

Comparing Estimated Parameters to Experimental Data

Use the Properties Estimation Compare form to compare estimated parameters to experimental data. You can also compare the estimated values of components to results for other components. This feature can help you select the best method for estimating parameters for a nondatabank component when only limited experimental data is available.

To evaluate the accuracy of estimation methods used for a parameter and to select the best methods for estimating parameters for a nondatabank component:

1. Identify databank components that are similar to the nondatabank component in terms of molecular structure or functional groups.
2. Request parameter estimation for these databank components using all methods available on the Estimation Input form.
3. Use the Estimation Compare form to compare the estimated parameters to the experimental data.

From the comparison you can determine the best method for each parameter. The best methods for the databank components should also be best for the nondatabank component.

To compare estimated parameters to experimental data:

1. From the Data menu, click Properties
2. In the left pane of the Data Browser Menu, double-click the Estimation subfolder.
3. Select the Compare form.
4. On the Compare Setup sheet, use the Components and UNIFAC Group IDs list boxes to enter components or groups to be compared with experimental data.

www.DownloadSoftware.iR

Saving Estimation Results Automatically

If you estimate parameters, by default the results are automatically written to Properties Parameters input forms.

This means that when you are satisfied with your estimation results, you can turn off Property Estimation because the estimated parameters have been preserved on the Parameters forms for use in subsequent simulation runs.

To turn off Property Estimation:

- On the Setup sheet of the Properties Estimation Input form, check Do Not Estimate Any Parameters.

Not Saving Estimation Results Automatically

If you do not want the estimation results to be written to the Parameters forms automatically:

1 From the Tools menu, click Options.

2 Click the Component Data tab.

3 Clear the Copy Regression and Estimation Results onto Parameters Forms checkbox.

www.DownloadSoftware.iR

رگرسیون داده های آزمایشگاهی

(Property Estimation)

www.DownloadSoftware.iR

رگرسیون داده های آزمایشگاهی
(Property Estimation)

اهداف:

- تهیه پارامترهای مناسبتر با اطلاعات آزمایشگاهی
- تفاوت آن با تخمین در این است که در تخمین پارامترها و ضرایب موردنظر در نرم افزار وجود ندارد.

کاربردها:

- خواص وابسته به دما در ترکیبات خالص
- ضرایب دوجزیی

www.DownloadSoftware.iR

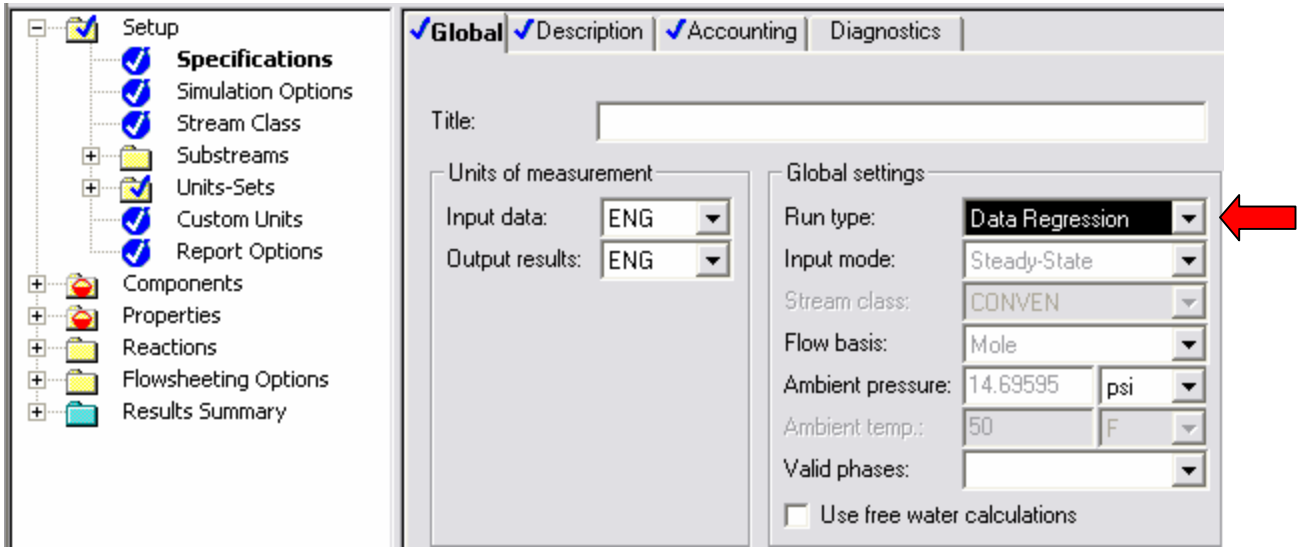
مثال ۲۲

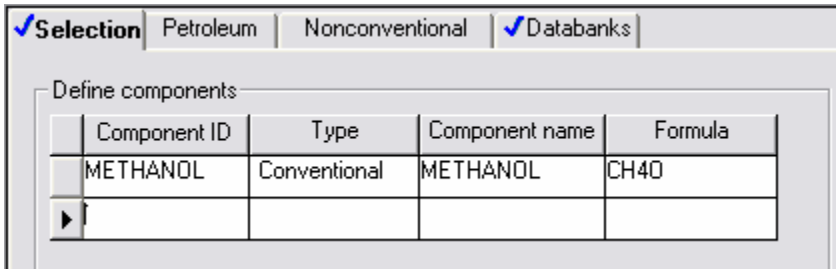
مثال Property Estimation

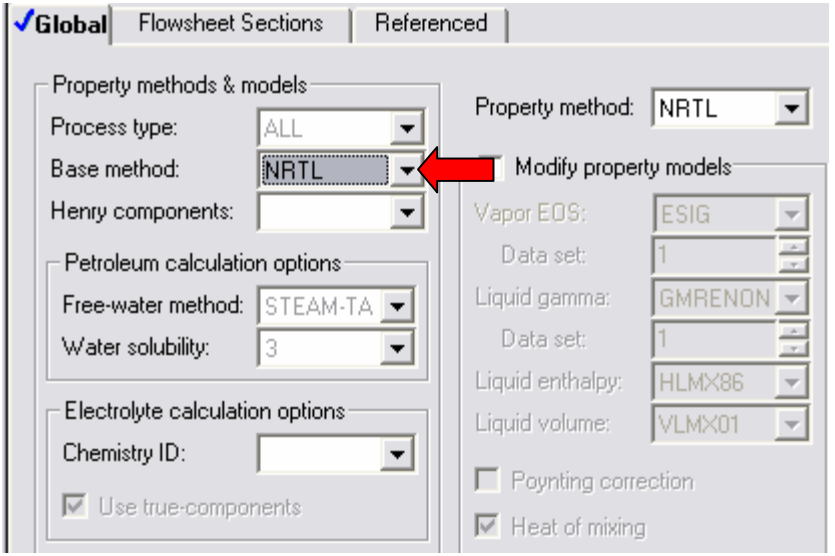
- با استفاده از اطلاعات آزمایشگاهی و با مدل NRTL، مقادیر کشش سطحی متانول را با روش SIGPDS تخمین بزنید. (فشار: 1 atm)

T	σ
200 K	27.1 N/m
250 K	25.1 N/m
300 K	22.1 N/m
350 K	17.9 N/m

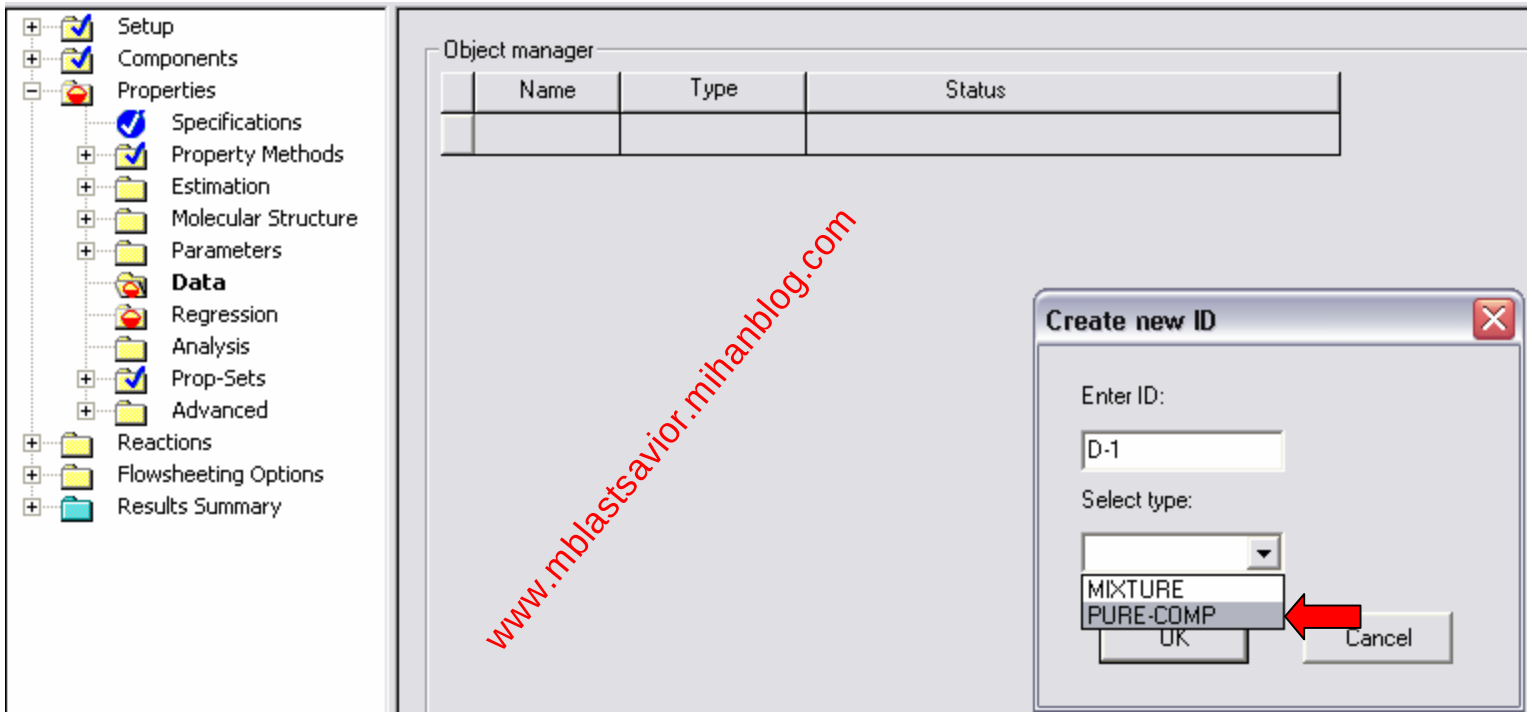
www.DownloadSoftware.iR

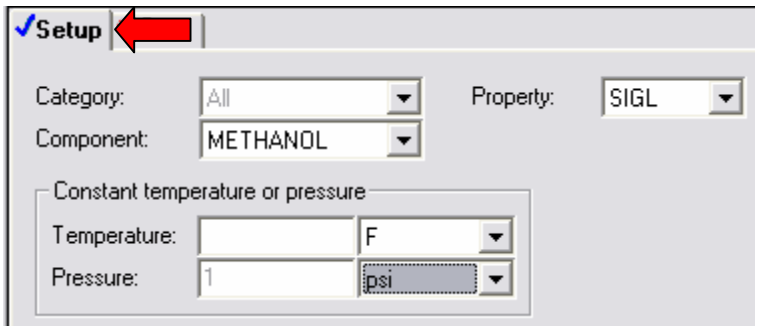


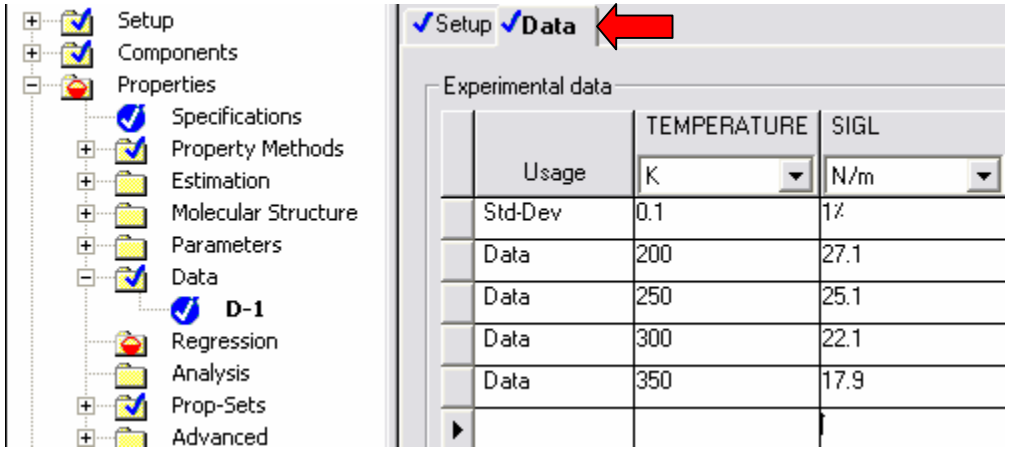




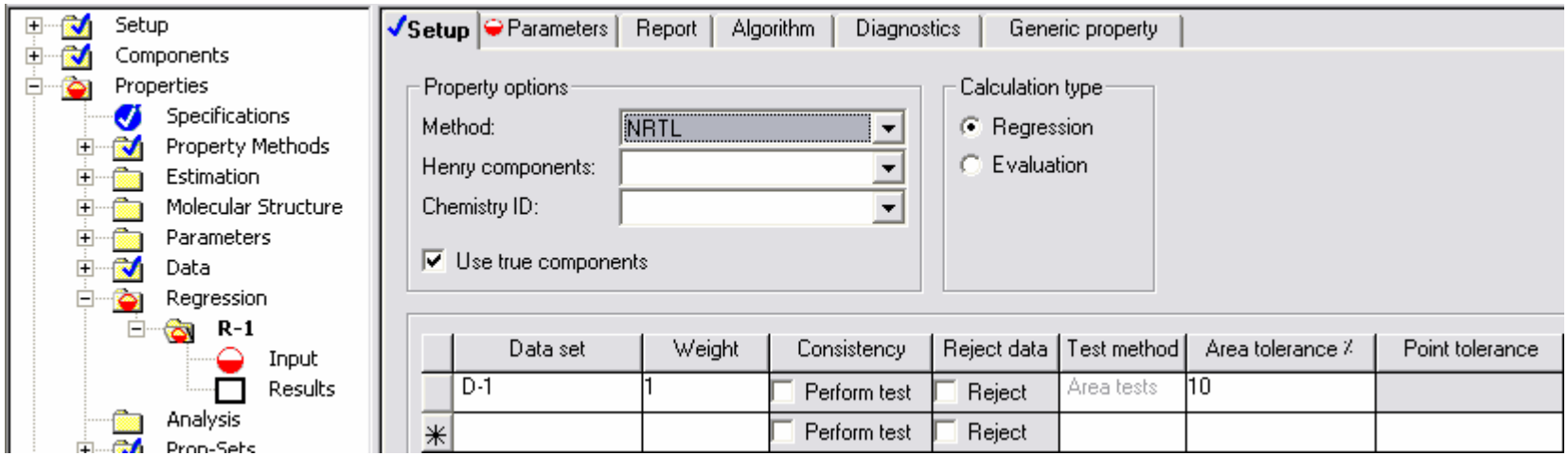
www.DownloadSoftware.iR

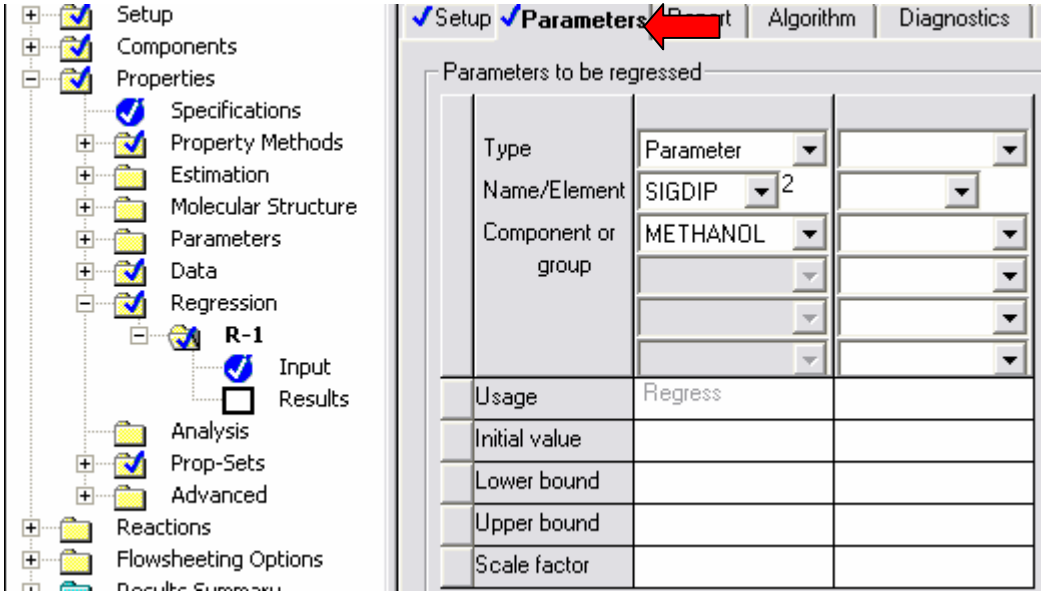




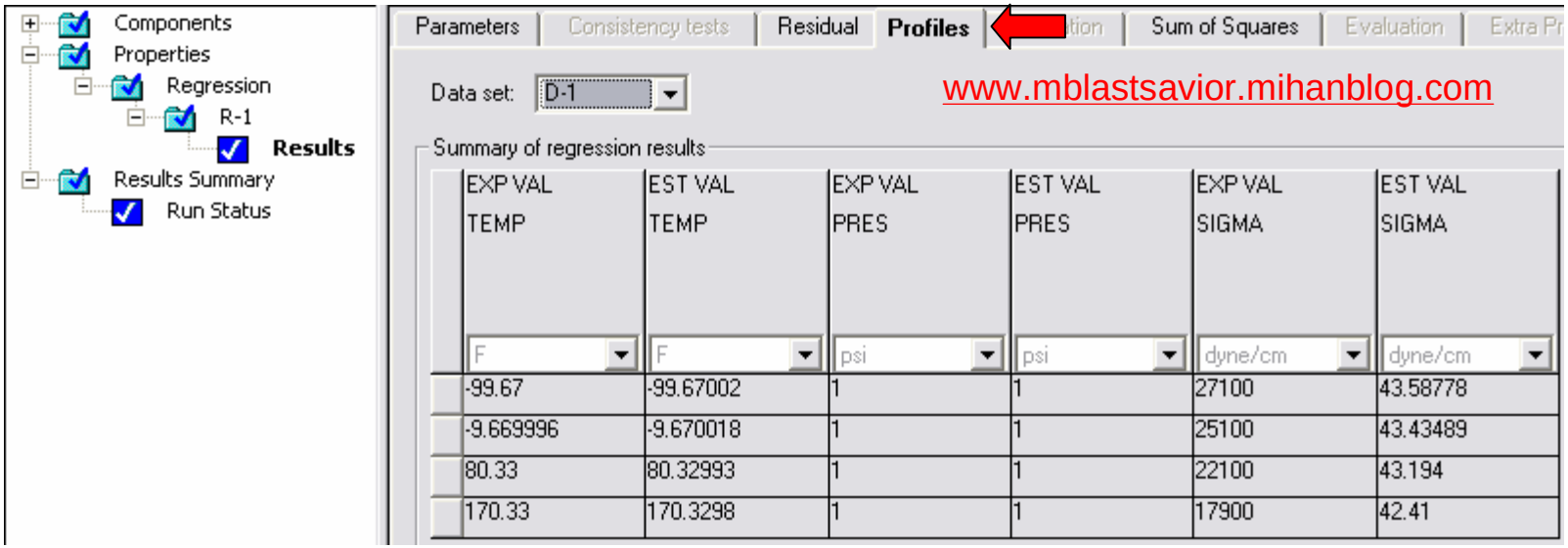


www.DownloadSoftware.iR





www.DownloadSoftware.iR



www.DownloadSoftware.iR

مثال ۲۳

Property Estimation مثال

Example of Regressing Vapor Liquid Equilibrium Data for Ethanol and Ethyl-Acetate

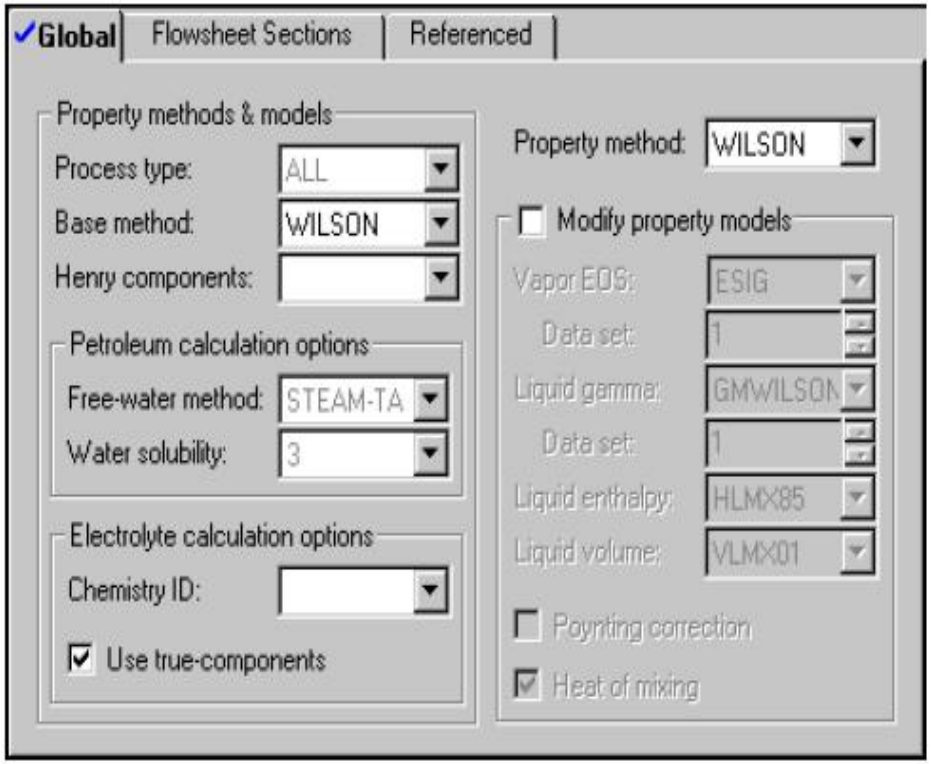
For an ethanol-ethyl acetate system, the following vapor liquid equilibrium data are available.

40C and 70C data of Martl, *Collect. Czech. Chem. Commun.* 37,266 (1972):

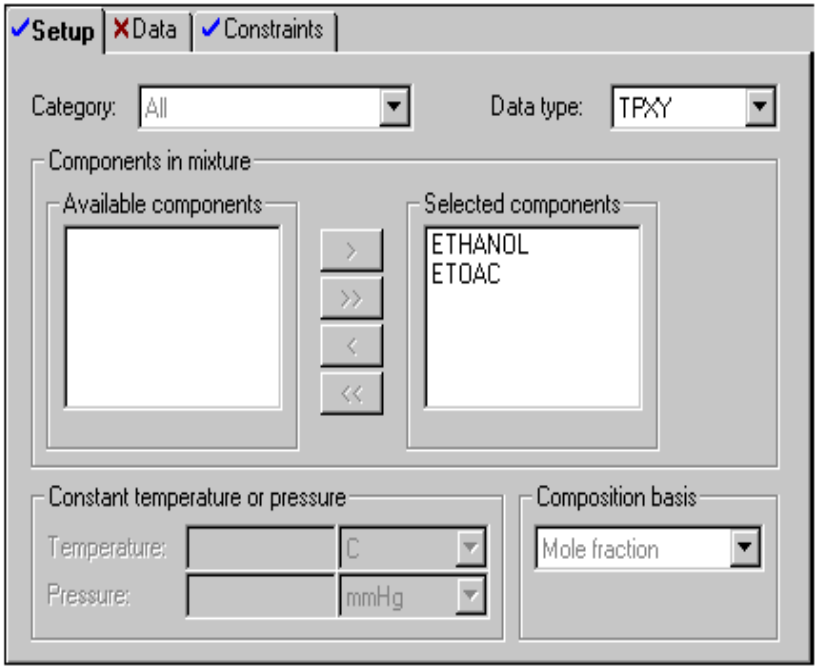
T=40C			T=70C		
P MMHG	X ETOAC	Y ETOAC	P MMHG	X ETOAC	Y ETOAC
136.600	0.00600	0.02200	548.600	0.00650	0.01750
150.900	0.04400	0.14400	559.400	0.01800	0.04600
163.100	0.08400	0.22700	633.600	0.13100	0.23700
183.000	0.18700	0.37000	664.600	0.21000	0.32100
191.900	0.24200	0.42800	680.400	0.26300	0.36700
199.700	0.32000	0.48400	703.800	0.38700	0.45400
208.300	0.45400	0.56000	710.000	0.45200	0.49300
210.200	0.49500	0.57400	712.200	0.48800	0.51700
211.800	0.55200	0.60700	711.200	0.62500	0.59700
213.200	0.66300	0.66400	706.400	0.69100	0.64100
212.100	0.74900	0.71600	697.800	0.75500	0.68100
204.600	0.88500	0.82900	679.200	0.82200	0.74700
200.600	0.92000	0.87100	651.600	0.90300	0.83900
195.300	0.96000	0.92800	635.400	0.93200	0.88800
			615.600	0.97500	0.94800

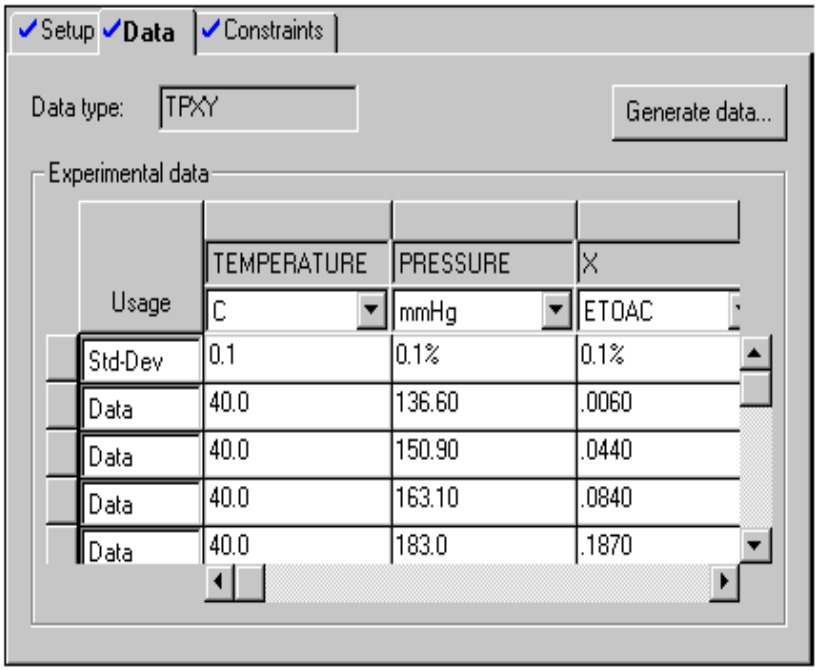
Atmospheric data of Ortega J. and Pena J.A., *J. Chem. Eng. Data*

www.DownloadSoftware.iR



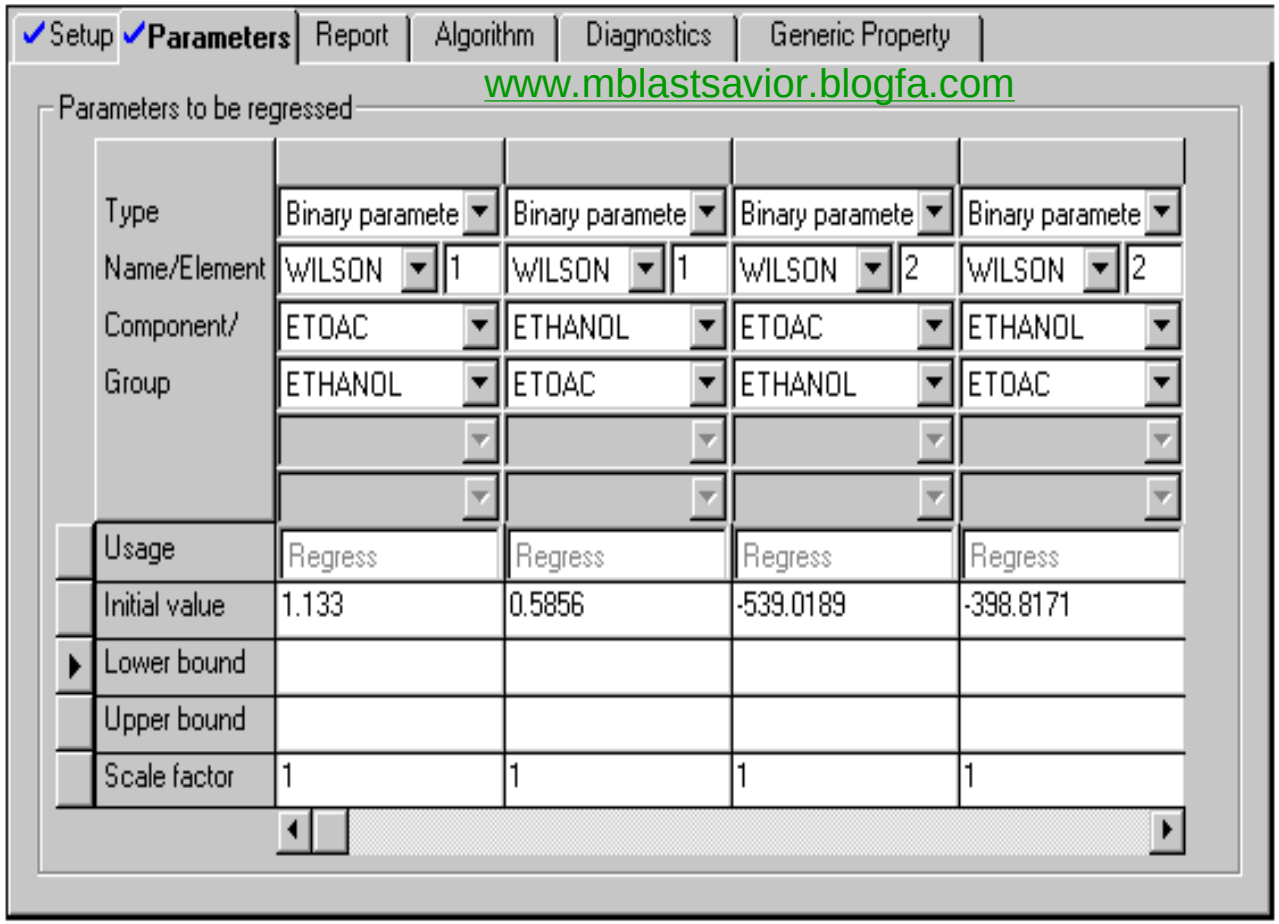
www.DownloadSoftware.iR



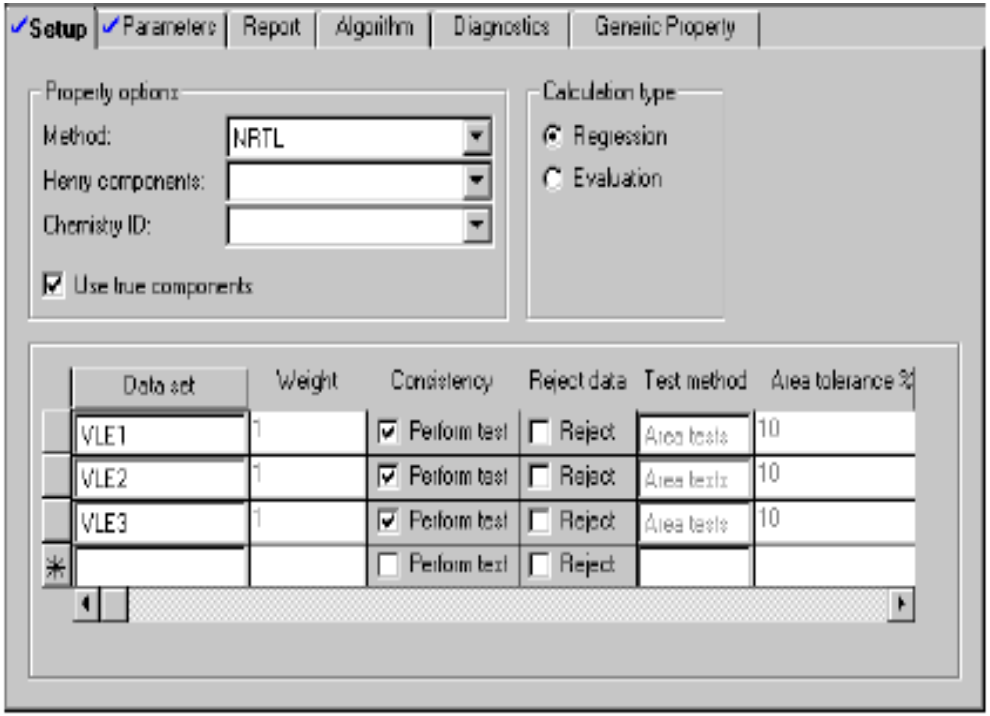


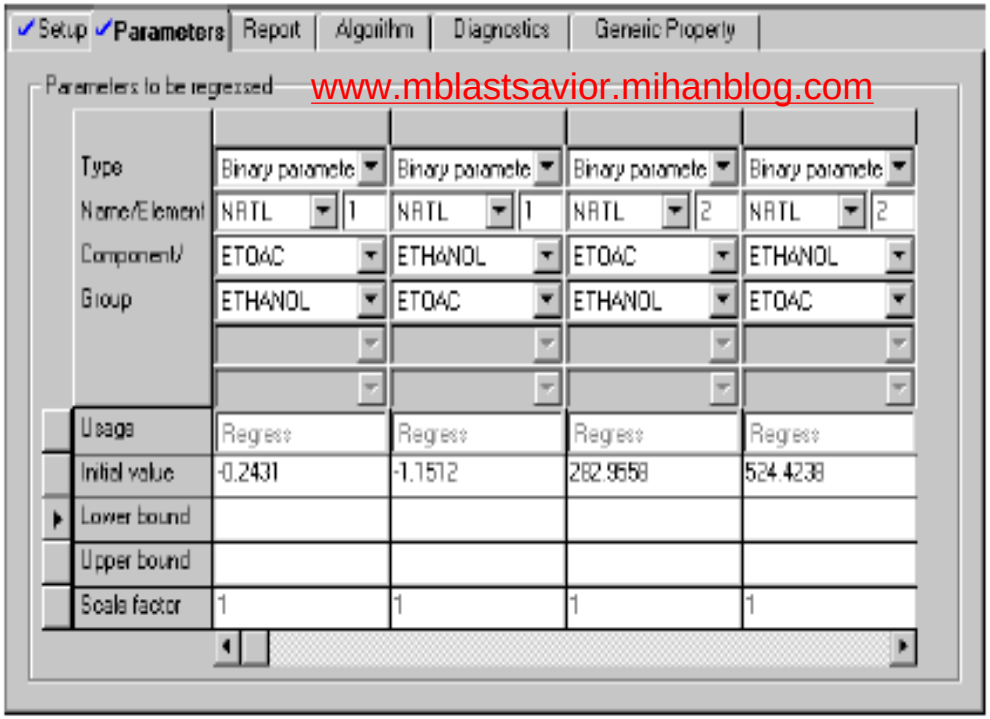
www.DownloadSoftware.iR

www.DownloadSoftware.iR

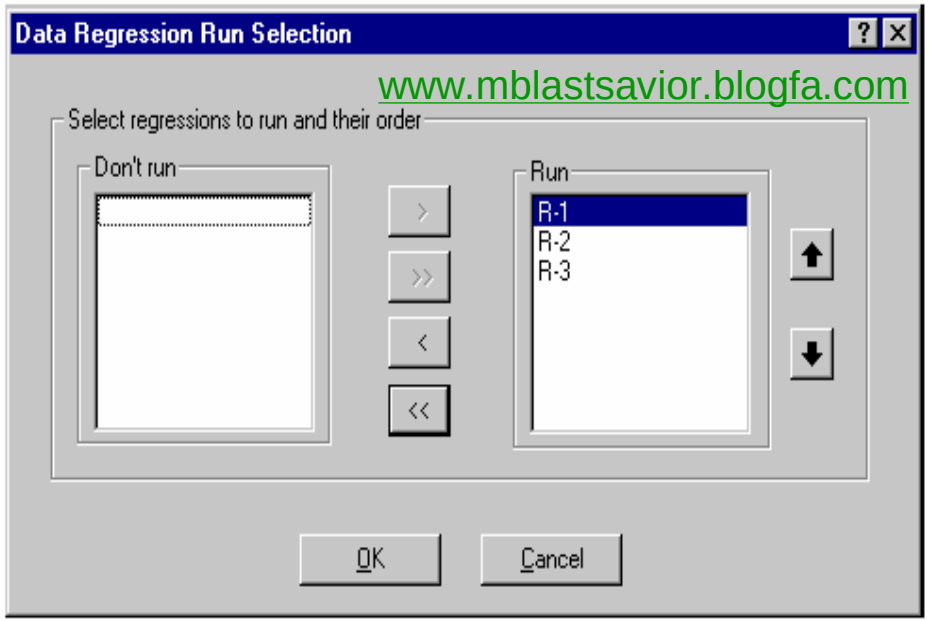


www.DownloadSoftware.iR





www.DownloadSoftware.iR



8 Examine the results on the Regression Results form.

Use the Regression Results Parameters sheet to examine the final parameter values

Parameters | Consistency tests | Residual | Profiles | Correlation | Sum of Squares | Evaluatio

Regressed parameters

	Parameter	Component i	Component j	Value (SI units)	Standard deviation
▶	WILSON/1	ETOAC	ETHANOL	-0.4530326	0.32191817
	WILSON/1	ETHANOL	ETOAC	1.63151004	0.31667556
	WILSON/2	ETOAC	ETHANOL	-40.9756	104.674273
	WILSON/2	ETHANOL	ETOAC	-698.44695	103.540273

www.mblastsavior.blogfa.com

DRS CONVERGED IN 6 ITERATIONS

Property method: WILSON (WILSON / IDEAL GAS)

www.DownloadSoftware.iR

Correlation | **Sum of Squares** | Evaluation | Extra Property

Regression results summary

Objective function:	MAXIMUM-LIKELIHOOD
Algorithm:	NEW BRITT-LUECKE
Initialization method:	DEMING
Weighted sum of squares:	22772.4515
Residual root mean square error:	16.4651332

Use the Regression Results Consistency Tests sheet to examine the results of thermodynamic consistency tests. All data groups passed the Redlich Kister area test.

Use the Regression Results Residual sheet to examine the residual for the fit of pressure, temperature, and composition.

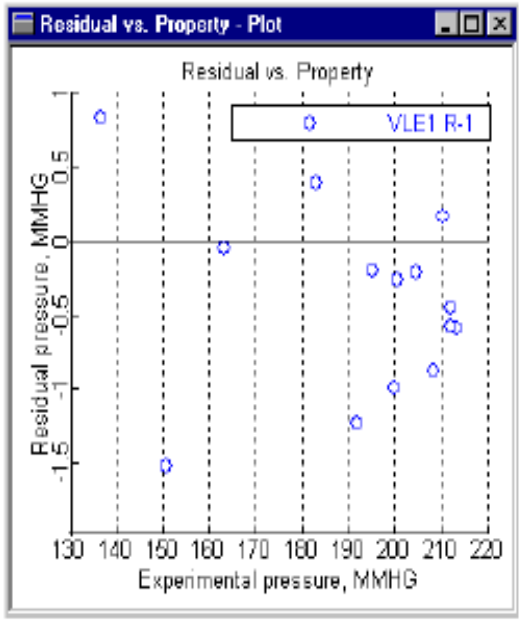
Residual | Profiles | Correlation | Sum of Squares | Evaluation | Extra Property

VLE1 | TEMP | Units: C | Deviations

Residual for property

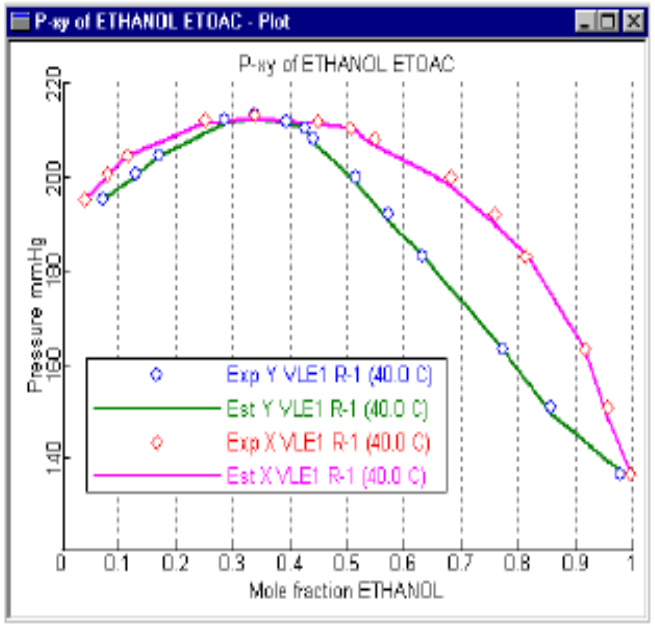
	Experimental	Regressed	Std. Dev.	Difference	%Difference
1	40	40.0233265	0.1	0.02332654	0.05831636
2	40	39.8086993	0.1	-0.1913007	-0.4782518
3	40	40.2140118	0.1	0.2140118	0.5350295
4	40	40.2385843	0.1	0.23858433	0.59646082
5	40	40.1241792	0.1	0.12417915	0.31044788
6	40	40.1785358	0.1	0.17853582	0.44633954

www.DownloadSoftware.iR



You can also plot the residual of other variables.

It is most useful to compare experimental data with calculated results. From the Plot menu, use the Plot Wizard to generate a P-xy plot for the first data group.



www.DownloadSoftware.iR

Atmospheric data of Ortega J. and Pena J.A., *J. Chem. Eng. Data* 31, 339 (1986):

T C	X ETOAC	Y ETOAC	T C	X ETOAC	Y ETOAC
78.450	0.00000	0.00000	71.850	0.44700	0.48700
77.400	0.02480	0.05770	71.800	0.46510	0.49340
77.200	0.03080	0.07060	71.750	0.47550	0.49950
76.800	0.04680	0.10070	71.700	0.51000	0.51090
76.600	0.05350	0.11140	71.700	0.56690	0.53120
76.400	0.06150	0.12450	71.750	0.59650	0.54520
76.200	0.06910	0.13910	71.800	0.62110	0.56520
76.100	0.07340	0.14470	71.900	0.64250	0.58310
75.900	0.08480	0.16330	72.000	0.66950	0.60400
75.600	0.10050	0.18680	72.100	0.68540	0.61690
75.400	0.10930	0.19710	72.300	0.71920	0.64750
75.100	0.12160	0.21380	72.500	0.74510	0.67250
75.000	0.12910	0.22340	72.800	0.77670	0.70200
74.800	0.14370	0.24020	73.000	0.79730	0.72270
74.700	0.14680	0.24470	73.200	0.81940	0.74490
74.500	0.16060	0.26200	73.500	0.83980	0.76610
74.300	0.16880	0.27120	73.700	0.85030	0.77730
74.200	0.17410	0.27800	73.900	0.86340	0.79140
74.100	0.17960	0.28360	74.100	0.87900	0.80740
74.000	0.19920	0.30360	74.300	0.89160	0.82160
73.800	0.20980	0.31430	74.700	0.91540	0.85040
73.700	0.21880	0.32340	75.100	0.93670	0.87980
73.300	0.24970	0.35170	75.300	0.94450	0.89190
73.000	0.27860	0.37810	75.500	0.95260	0.90380
72.700	0.30860	0.40020	75.700	0.96340	0.92080
72.400	0.33770	0.42210	76.000	0.97480	0.93480
72.300	0.35540	0.43310	76.200	0.98430	0.95260
72.000	0.40190	0.46110	76.400	0.99030	0.96860
71.950	0.41840	0.46910	77.150	1.00000	1.00000
71.900	0.42440	0.47300			

www.DownloadSoftware.iR

Assay Data Analysis and Pseudocomponent System (ADA/PCS)

www.DownloadSoftware.iR

The minimum assay data consists of a distillation curve and a bulk gravity value.

You can enter any number of petroleum property curves, such as:

- Sulfur content
- Metal content
- **Freeze point**
- Octane numbers

www.DownloadSoftware.iR

Oil Manager

To enter the Oil Characterization

environment, at least one fluid package must exist in the case.Hypothetical (pseudo) components must be compatible with the property method being used by the fluid package.

www.DownloadSoftware.iR

Oil Manager

The Oil Characterization environment provides a location where the characteristics of a petroleum fluid can be represented by using discrete hypothetical components. Physical, critical, thermodynamic and transport properties are determined for each hypothetical component

using correlations that you select. The fully defined hypocomponent can then be installed in a stream and used in any flowsheet.

www.DownloadSoftware.iR

True Boiling Point (TBP) Analysis

A TBP analysis is performed using a multi-stage batch fractionation apparatus operated at relatively high reflux ratios (15 - 100 theoretical stages with reflux ratios of 5 to 1 or greater). TBP distillations conducted at either atmospheric or vacuum conditions are accepted by the characterization procedure.

The petroleum fluid's bubble point is a multi-component equilibrium condition such that there is an incipient vapour phase forming. This would, in effect, be a single-stage of fractionation as opposed to the highly refluxed operation of a TBP analysis.

ASTM D86 and D1160 Distillations

ASTM D86 and D1160 distillations also employ batch fractionation apparatus, but they are conducted using non-refluxed Engler flasks. Two standard ASTM distillations are supported: ASTM-D86, used for light to medium petroleum fluids, and ASTM-D1160, carried out at varying vacuum conditions and used for heavier petroleum fluids. For ASTM D86 distillation, HYSYS can correct for barometric pressure or cracking effects.

www.DownloadSoftware.iR

ASTM D2887

ASTM D2887 is a simulated distillation curve generated from chromatographic data. The resulting boiling point curve is reported on a weight percent basis.

Equilibrium Flash Vaporization

An EFV curve is generated by a series of experiments conducted at constant pressure (1 atm). The results relate the temperature versus volume percent of liquid distilled, where the total vapour is in equilibrium with the unvaporized liquid.

Chromatographic Analysis

A Chromatographic analysis is a simulated distillation performed by passing a small amount of totally vaporized sample through a packed gas chromatograph column. The relative amounts of the sample that appear in each standard "chromatographic" hydrocarbon group (paraffinic, aromatic and naphthaline groups, ranging from C6 to C30) are then detected and reported.

www.DownloadSoftware.iR

Laboratory Data

The Watson (UOP) K factor is an approximate index of paraffinicity, with high values corresponding to high degrees of saturation:

$$K = \frac{(Mean\ Avg.\ BP)^{\frac{1}{3}}}{sp\ gr\ 60F / 60F}$$

where the mean average boiling point is in degrees Rankine.

Accurate volatility characteristics are vital when representing a petroleum fluid in your process simulation. HYSYS accepts five standard laboratory analytical assay procedures:

- True boiling point distillation (TBP)
- ASTM D86 and D1160 distillations (Separately or Combined)
- D2887 simulated distillation
- Equilibrium flash vapourization (EFV)
- Chromatographic analysis

The characterization procedure performs its calculations based on an internally calculated TBP curve. If you supply an ASTM or EFV distillation curve, it is converted to a TBP curve using standard methods described in the API data book. If you do not supply any distillation data, then an average TBP distillation curve is generated for you based on the overall molecular weight, density, and Watson (UOP) K factor of your fluid.

www.DownloadSoftware.iR

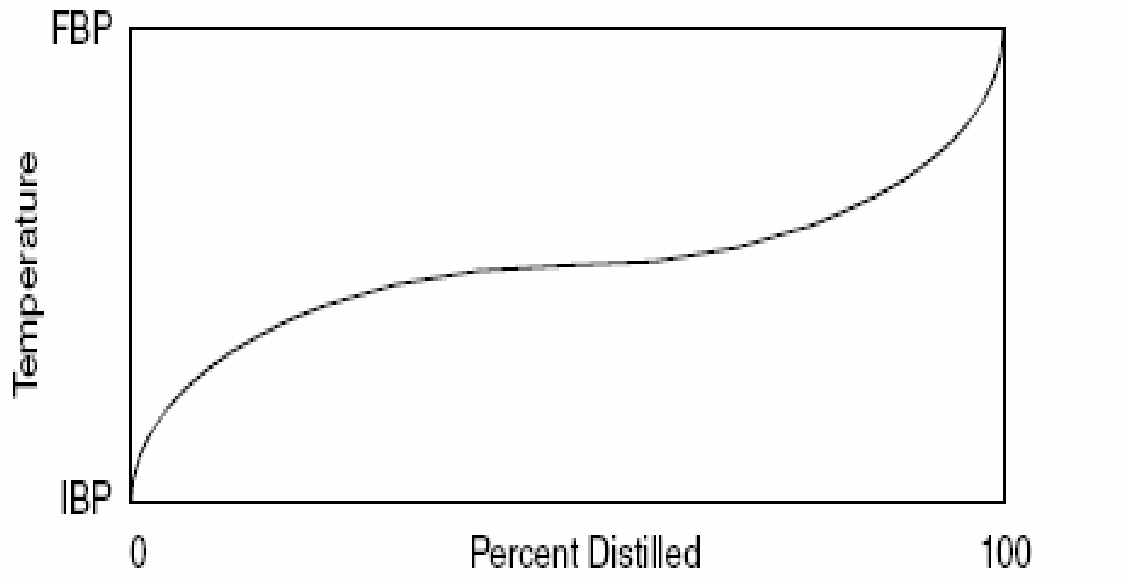
Generate a Full Set of Working Curves

To ensure accuracy, a true boiling point (TBP) curve and associated molecular weight, density, and viscosity property curves are required for the characterization calculations. HYSYS takes whatever input curves you have supplied, and interpolates and extrapolates them as necessary to complete the range from 0 to 100%. These full range curves are referred to as the working curves.

If you supply an ASTM D86, ASTM D1160, or EFV distillation curve as input, it is automatically converted to a TBP distillation curve. On the other hand, if you do not have any distillation data, supplying two of the three bulk properties (molecular weight, density, or Watson (UOP) K factor) allows HYSYS to calculate an *average*[1] TBP distillation curve.

www.DownloadSoftware.iR

A typical TBP curve is illustrated below



www.DownloadSoftware.iR

A typical TBP curve is illustrated below

HYSYS uses your Light Ends data to either define or replace the low boiling portion of your TBP, ASTM D86 or ASTM D1160 curve with discrete pure components. HYSYS does not require that you match the highest boiling point light-end with the lowest boiling point temperature on the TBP curve.

Using the sample Light Ends analysis shown here, HYSYS replaces the first portion of the TBP working curve to the assay percentage just past the boiling point of n-pentane (approximately 95°F or 36°C) or 11.3 vol% (the cumulative light ends total), whichever is greater. The new TBP curve would include the Light Ends Free portion of the original sample beginning at 0% distilled with the associated IBP representing the remaining portion of the original sample.

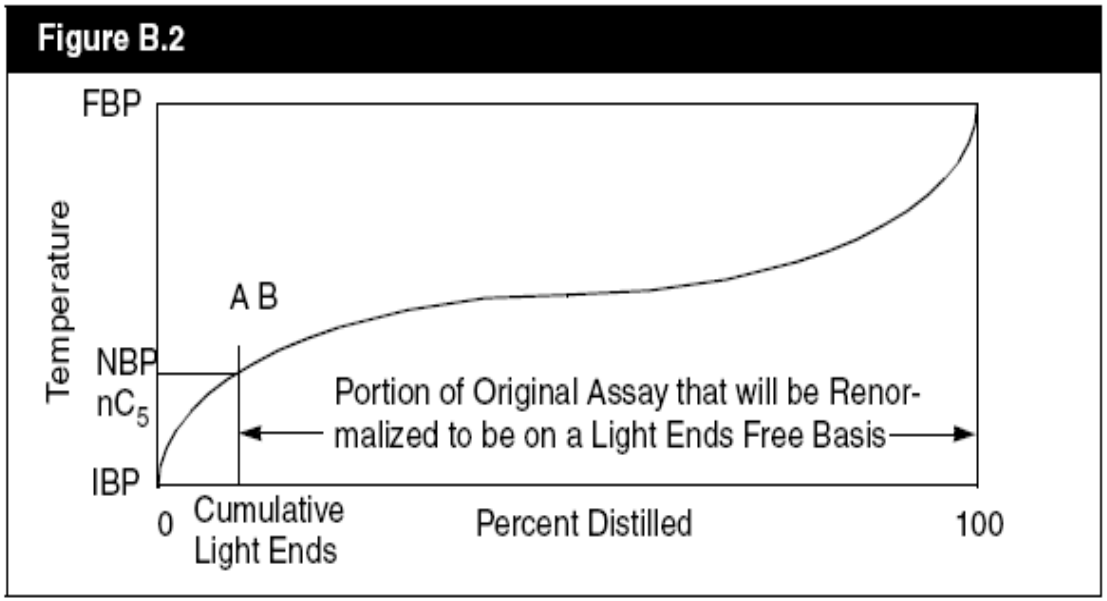
www.DownloadSoftware.iR

Three possible Light Ends/Assay situations can exist as depicted in the next three figures. In the following figures:

- Point A represents the boiling point of the heaviest light-end, n-Pentane in this example.
- Point B represents the temperature at which the total Light Ends percentage intersects the TBP working curve.

If points A and B coincide exactly as shown in Figure B.2, HYSYS assigns the TBP working curve's IBP equal to the boiling point of the heaviest light end and normalizes the remaining portion of the TBP curve with the light ends removed. All points that lie below point B on the curve are eliminated.

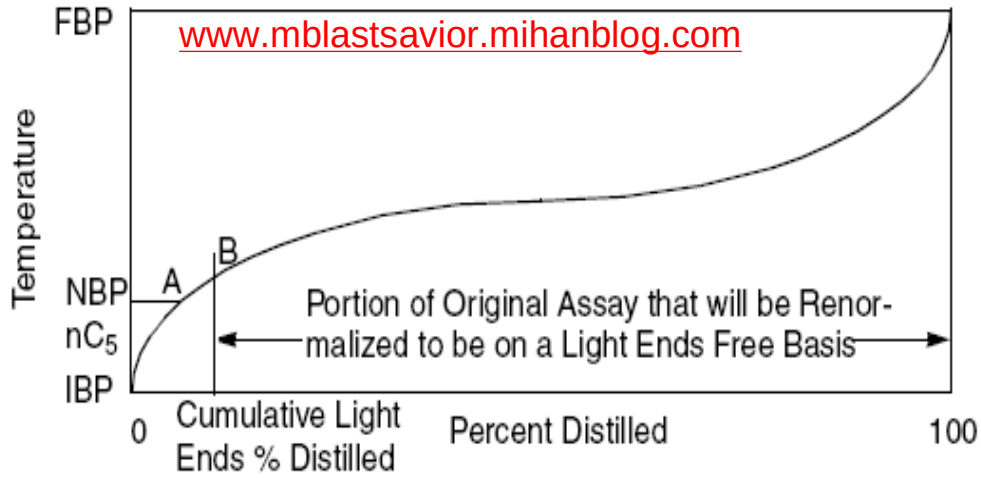
Figure B.2



www.DownloadSoftware.iR

Figure B.3 depicts the situation that may arise from inconsistent data or from a poor extrapolation of the IBP. These situations are corrected by assuming that the Light Ends analysis is correct and that the error exists in the internal TBP curve. In the following figure, Point A (boiling point of the heaviest light end component) lies below Point B (internal TBP curve temperature associated with your cumulative light ends percentage) on the internal TBP working curve. HYSYS replaces point B (the Light Ends free IBP) by a point that uses the cumulative light ends percentage and the normal boiling point of the heaviest light ends component. The Light Ends free portion of the curve is smoothed before normalizing.

Figure B.3



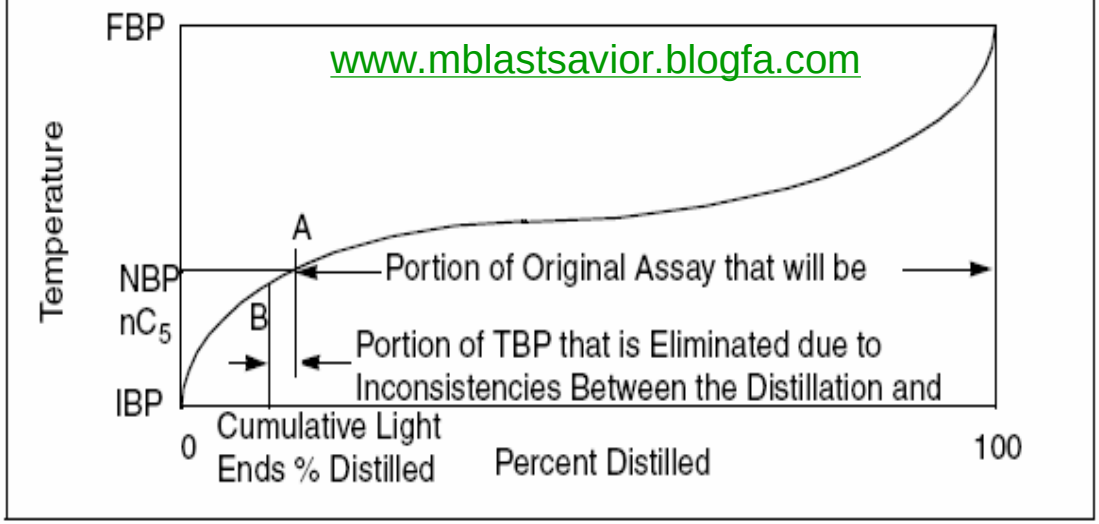
www.mblastsavior.mihanblog.com

www.DownloadSoftware.iR

The next figure shows the boiling point of the heaviest light-end occurring at an assay percentage greater than the cumulative Light Ends total. HYSYS corrects this situation by successively eliminating TBP working curve points from point B up to the first temperature point greater than the heaviest light end temperature (Point A).

For example, if in the following figure Point B represents 5% and Point A represents 7%, the new TBP curve (which is light ends free) is stretched, i.e., what was 93% of the assay (determined from point A) is now 95% of the assay. As in the previous case, Point A's temperature is assigned to the new TBP curves IBP, and the Light Ends free portion is smoothed and normalized.

Figure B.4

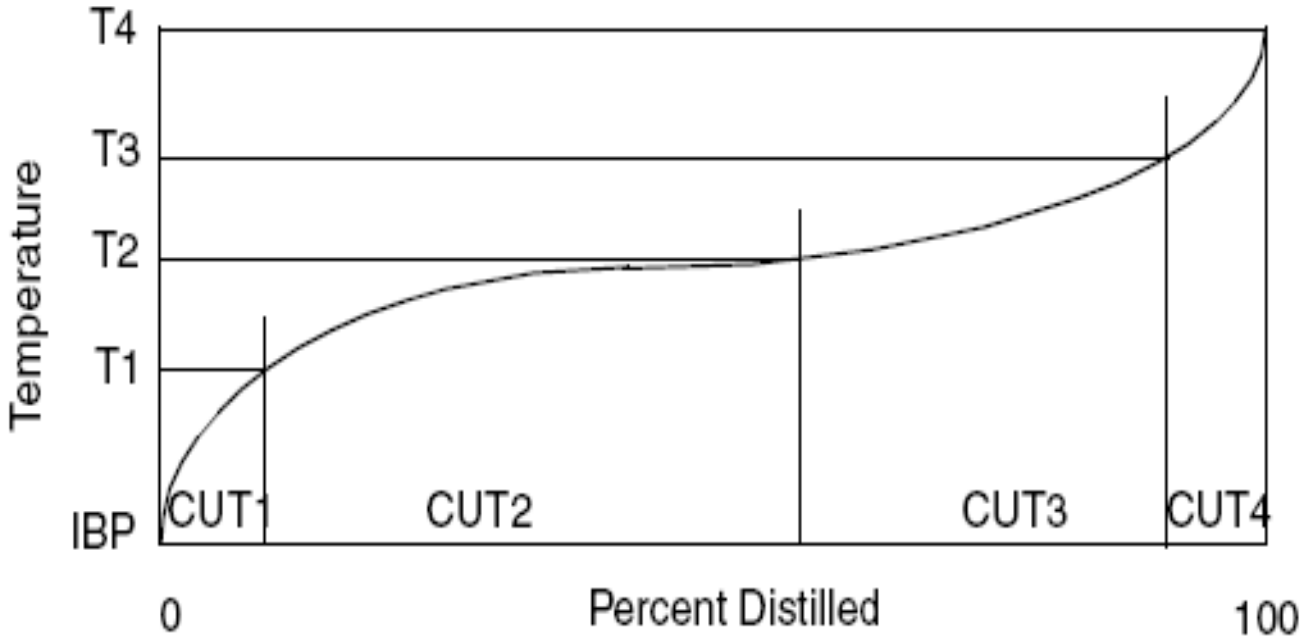


www.mblastsavior.blogfa.com

www.DownloadSoftware.iR

Determine TBP Cutpoint Temperatures

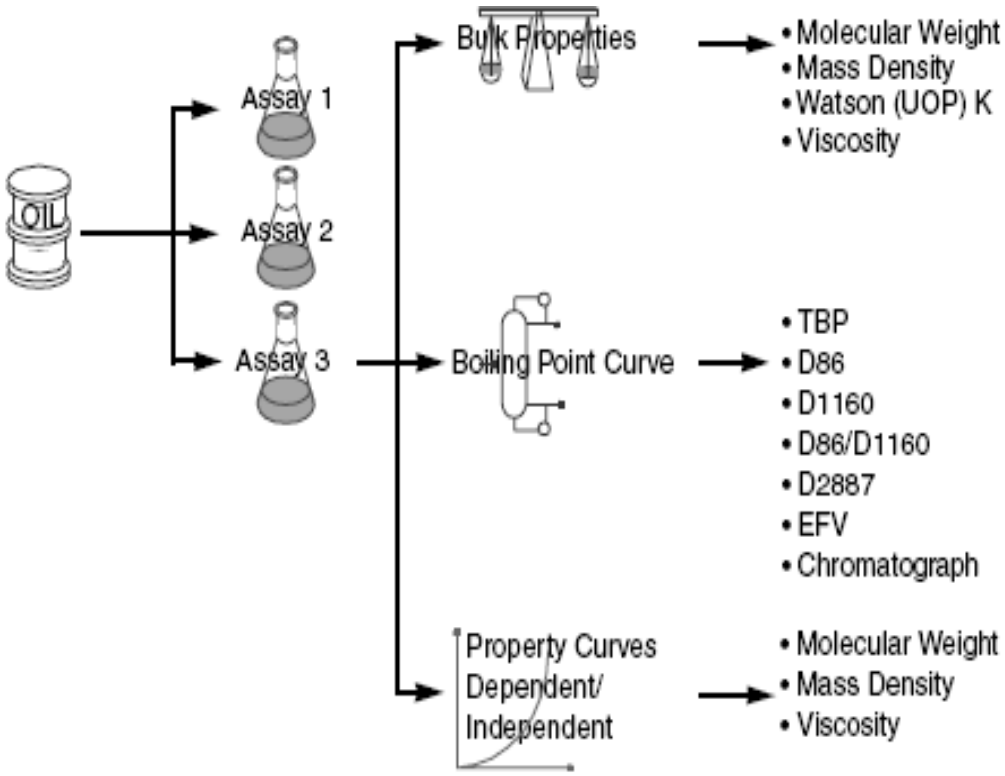
- In Figure four components are generated from the TBP curve using five TBP cutpoints of equal temperature increment.



www.DownloadSoftware.iR

After the cutpoints and the fraction of each hypocomponent are known, the average boiling point may be determined. This is the normal boiling point (NBP), which is calculated for each component by equalizing the areas between the TBP curve and a horizontal line representing the NBP temperature. This is shown in the figure below, with the grey areas representing the equalized areas. The average molecular weight, density, and viscosity of each hypocomponent are subsequently calculated from the corresponding smoothed working curves for molecular weight, density and viscosity.

www.DownloadSoftware.iR

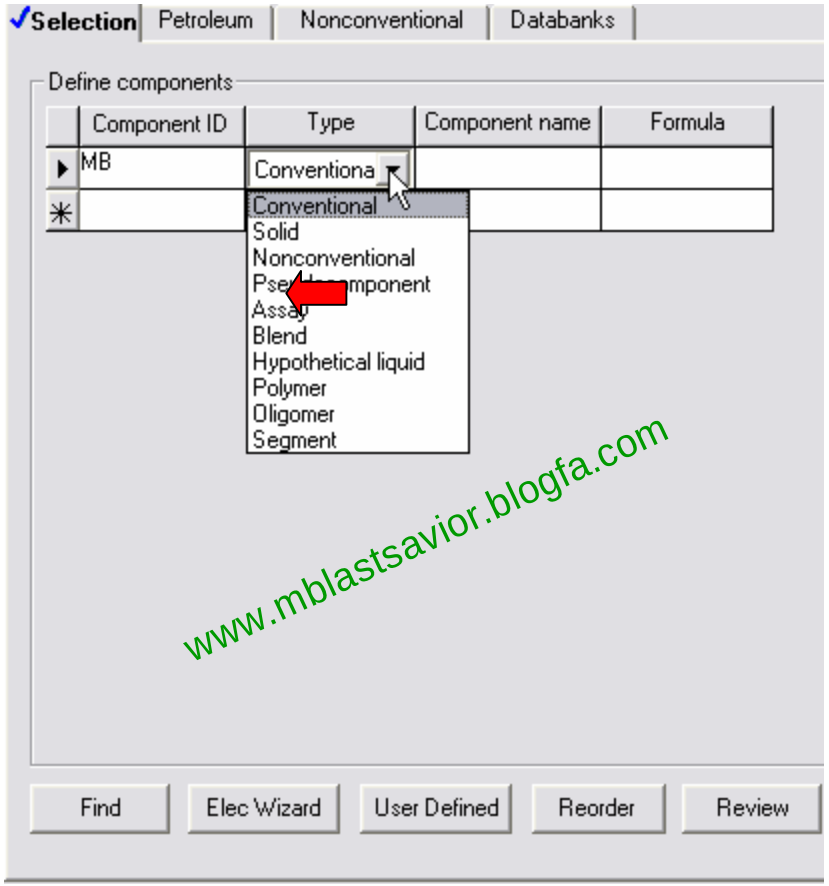


www.DownloadSoftware.iR

Creating Assays

You can define an assay using one of the following:

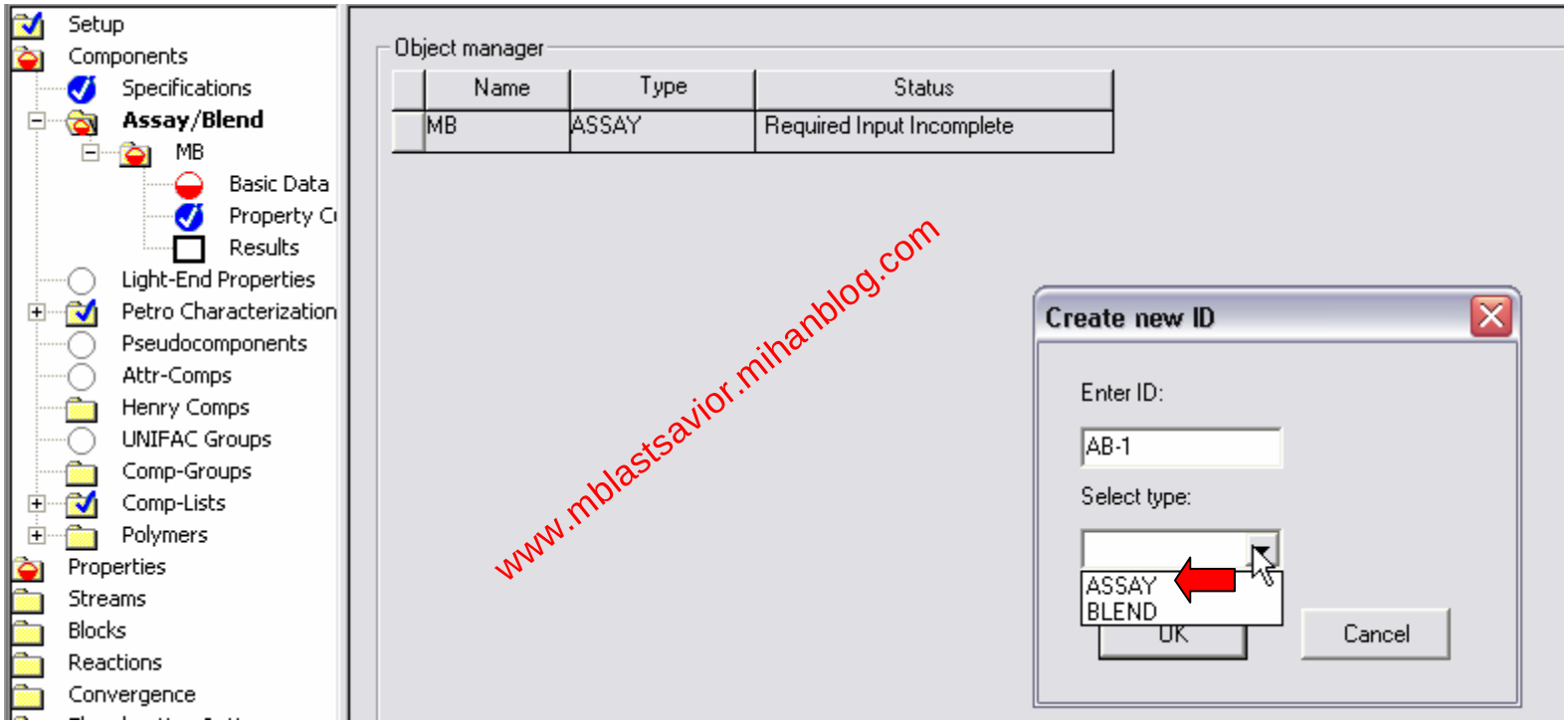
- Components Specifications Selection sheet
- Assay-Blend Object Manager



www.mblastsavior.blogfa.com

تهیه کننده : محمد بهزادی

www.DownloadSoftware.iR



www.DownloadSoftware.iR

Entering Assay Data

For each assay you must enter:

- At least four points on a distillation curve
- Either a bulk gravity or a gravity curve

www.DownloadSoftware.iR

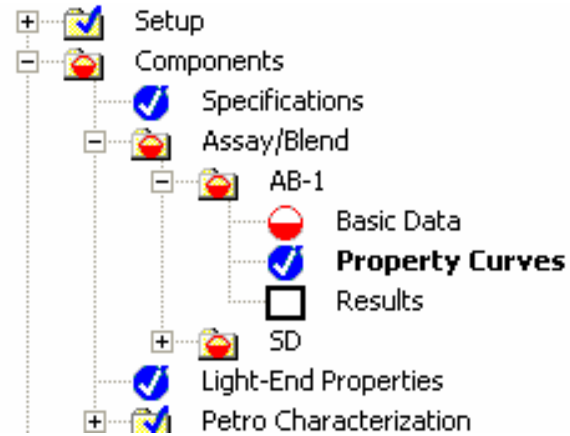
- If you do not enter a bulk gravity value on the Dist Curve sheet, you must enter a gravity curve using the Gravity/UOPK sheet.

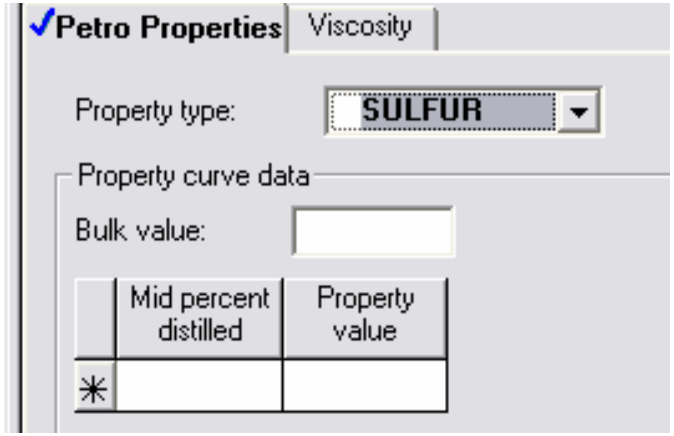
www.DownloadSoftware.iR

Petroleum Property Curves

Examples of petroleum properties include:

- Sulfur content
- Metal content
- Octane numbers





www.DownloadSoftware.iR

Viscosity Curves

Viscosity curves can be entered as either

absolute or kinematic viscosity values as a function of percent distilled for the assay

www.DownloadSoftware.iR

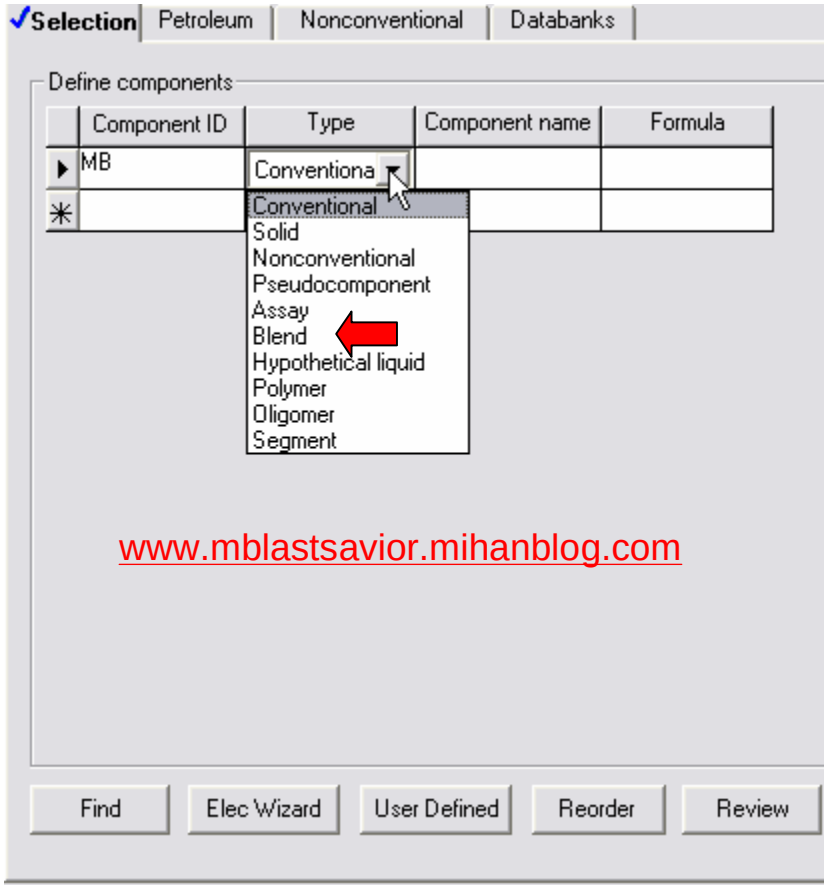
Creating a Blend

- Distillation curves
- Gravity curves
- Molecular weight curves
- Light-ends analysis
- Petroleum properties curves
- Viscosity curves

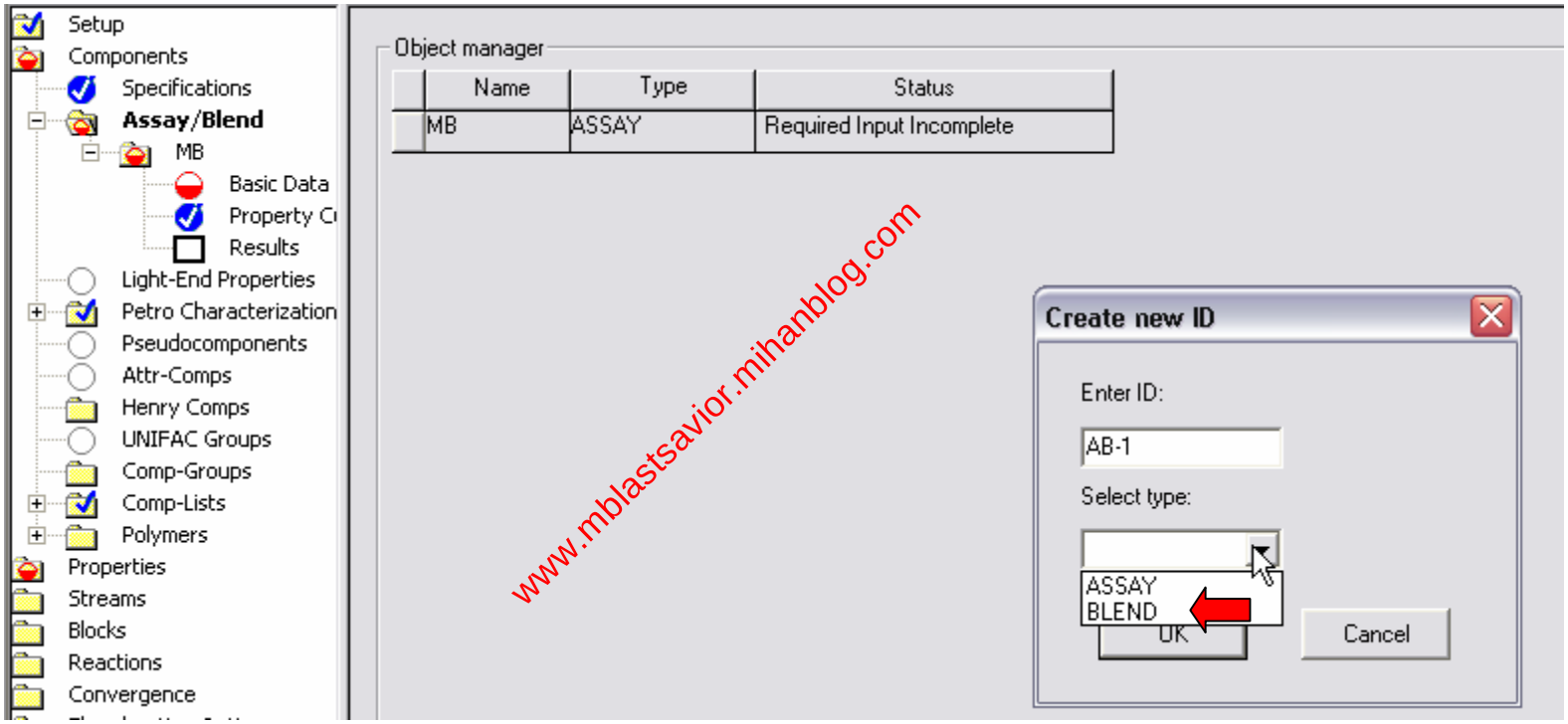
www.DownloadSoftware.iR

You can define a blend using either of the following:

- Components Specifications Selection sheet
- Assay-Blend Object Manager

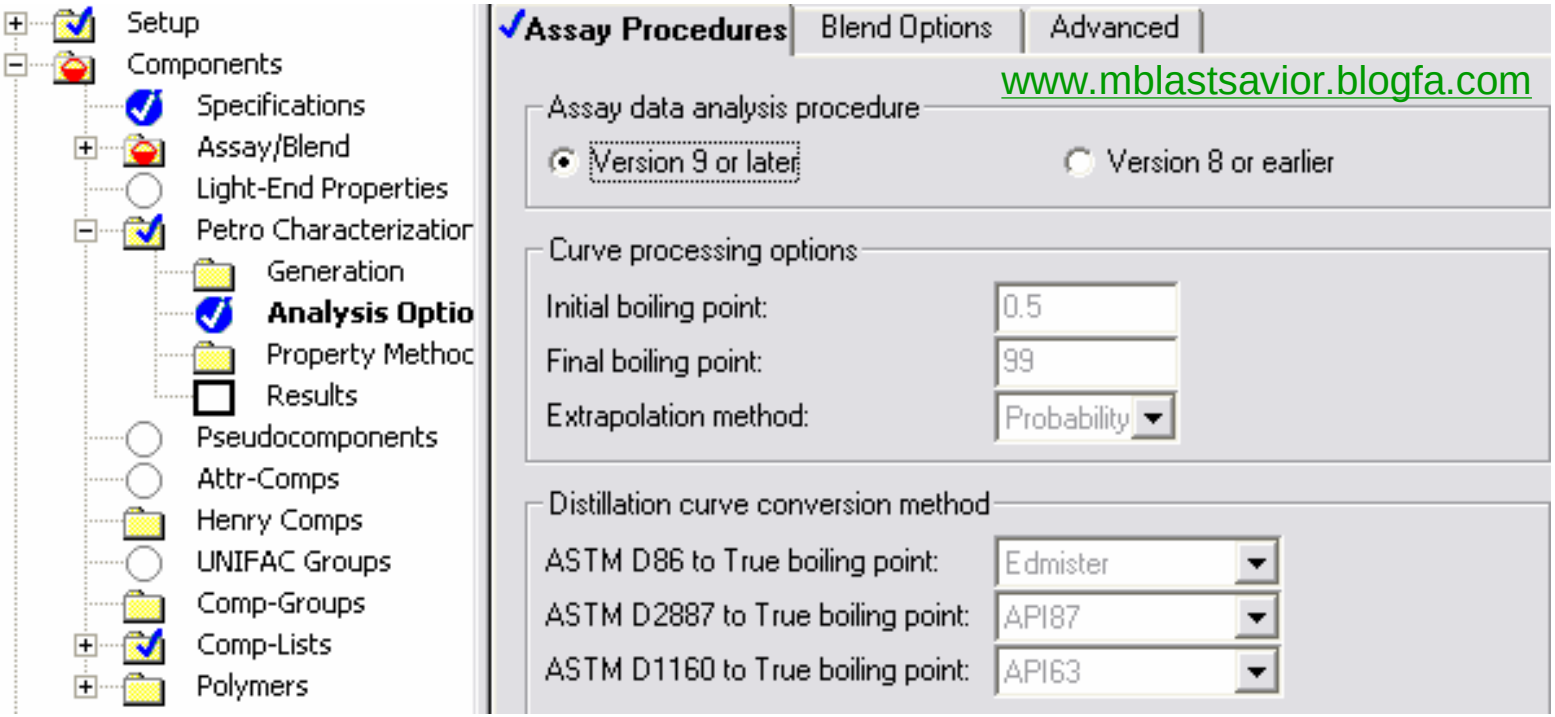


www.DownloadSoftware.iR



www.DownloadSoftware.iR

Assay Analysis Options



The defaults are appropriate for most applications.

www.DownloadSoftware.iR

Analysis Procedure frame:

Version 9 or later

– or –

Version 8 or earlier

Note: The Version 9 or later method is recommended.

www.DownloadSoftware.iR

In the Curve Processing Options frame, you can optionally modify any of the following specifications from their defaults:

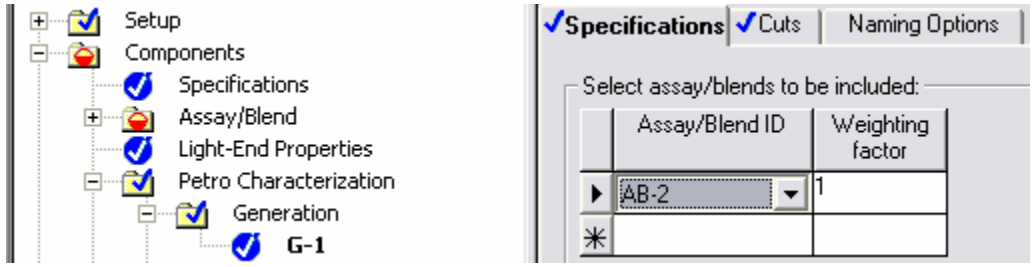
Specification	**Default**
• Initial boiling point	**0.5**
• Final boiling point	**99**
• Extrapolation method	**Probability**

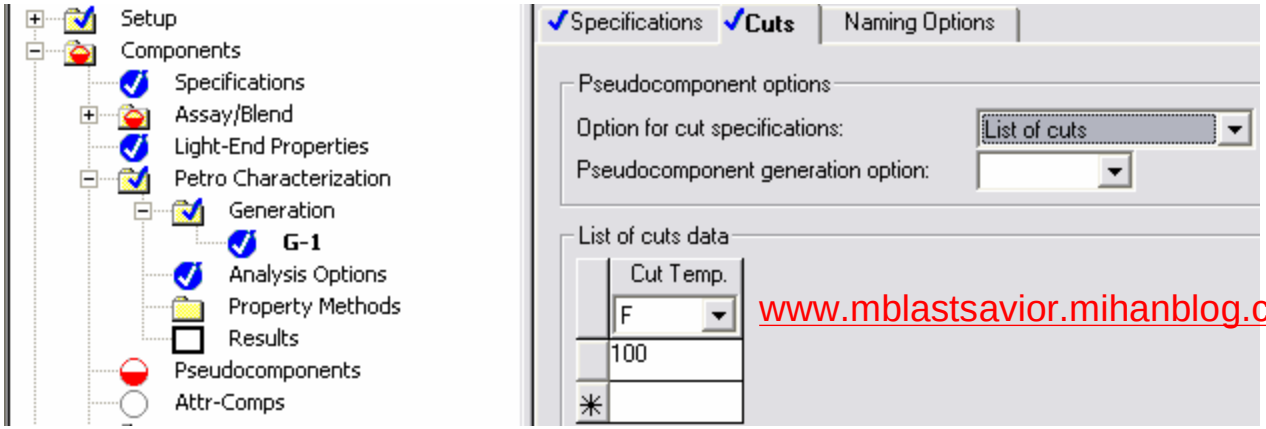
In the Distillation Curve Conversion Method frame, specify the method for converting the ASTM D86 and D2887 data to true boiling point (TBP) data.

www.DownloadSoftware.iR

- On the Advanced sheet, specify the spline fitting method for the distillation curves. The distillation curves must be spline fitted to allow easy interpolation. The Hermite method is recommended. However if the distillation curves you enter contain many closely spaced points, the linear interpolation method is preferred.

www.DownloadSoftware.iR





www.mblastsavior.mihanblog.com

www.DownloadSoftware.iR

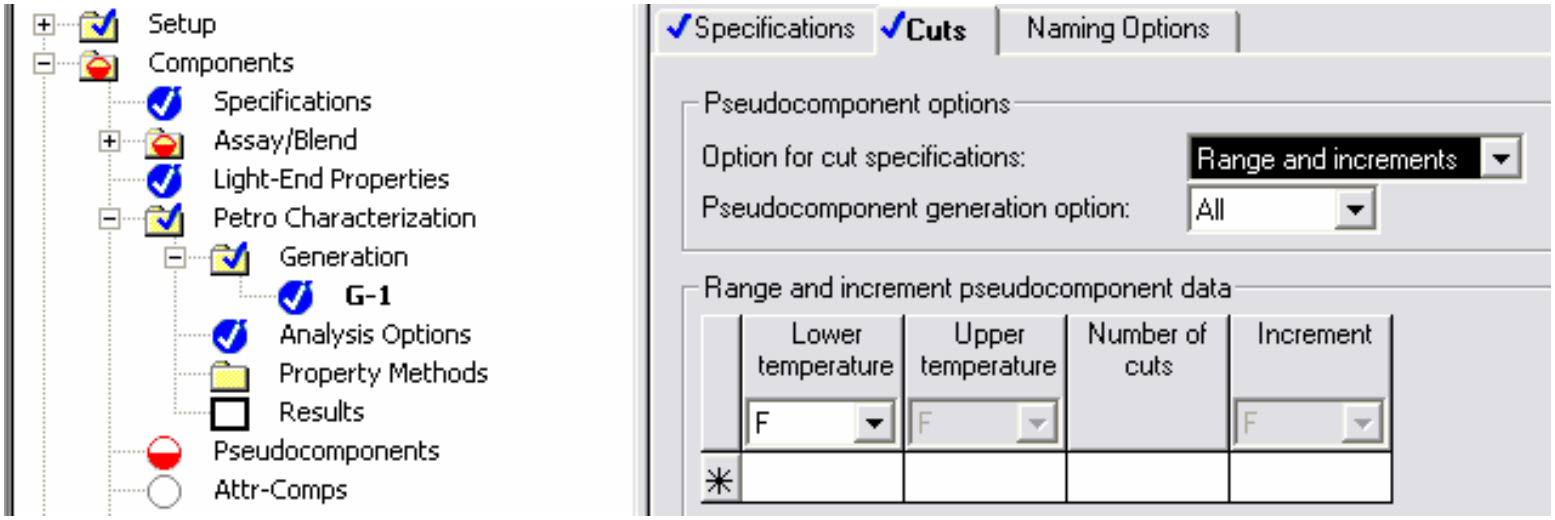
Specifying Cut Points

By default Aspen Plus generates pseudocomponents using a standard set of cut points:

TBP Range (F)	Number of Cuts	Increments (F)
100 – 800	28	25
800 – 1200	8	50
1200 – 1600	4	100

To override the standard cut points, use the Generation Cuts sheet to specify a list for one of the following:

- Cut temperatures
- Cut ranges. For each range, enter either the number of cuts or the temperature increment for each cut.



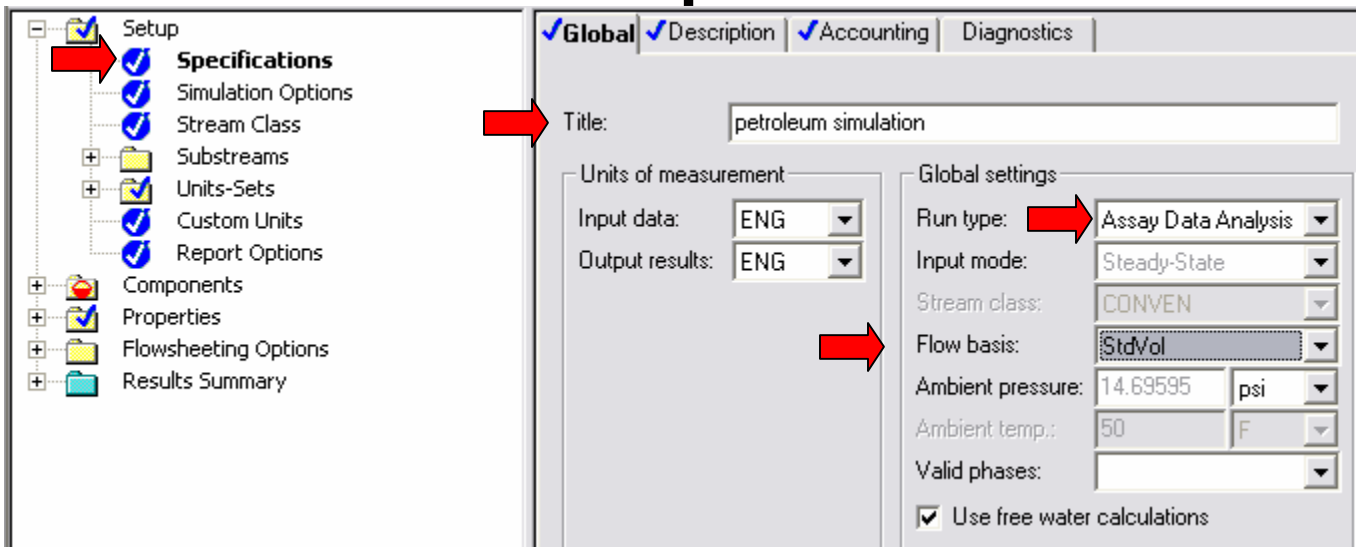
www.DownloadSoftware.iR

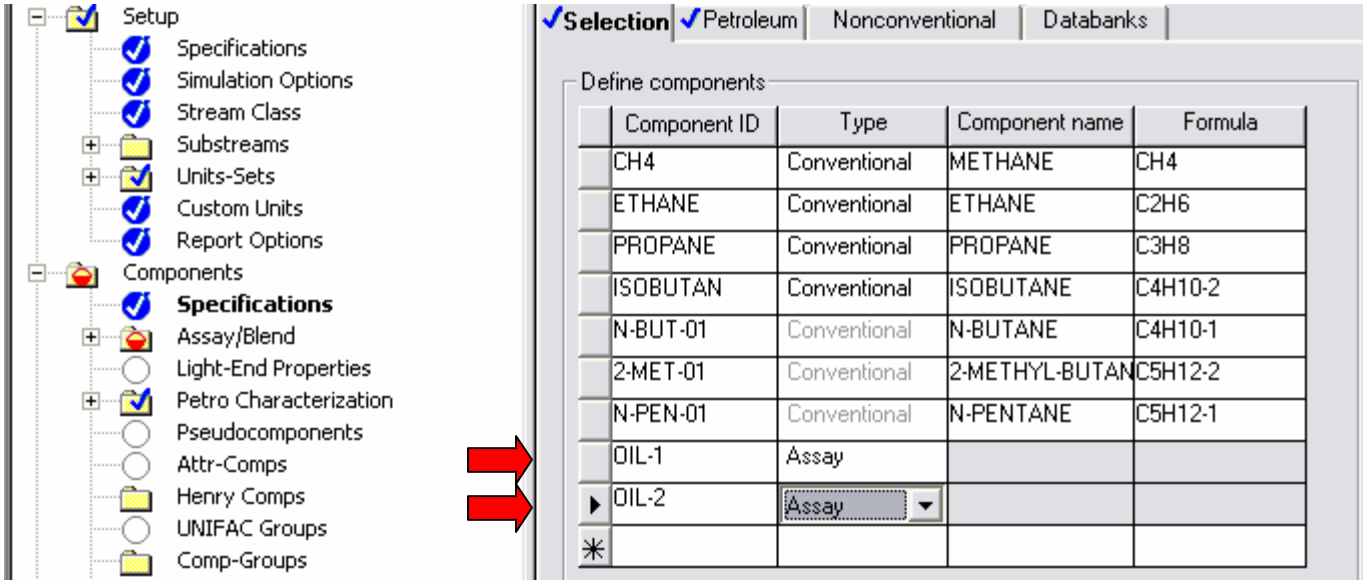
You can choose from five built-in pseudocomponent property methods:

Method	Description
API-METH	Uses procedures recommended by the American Petroleum Institute (API) Data Book.
COAL-LIQ	Uses correlations developed for coal liquids.
ASPEN	Based on the API-METH property method, with proprietary AspenTech enhancements for selected properties. (Default option set)
LK	Uses correlations by Lee and Kesler.
API-TWU	Based on the ASPEN property method, but uses correlations by Twu for critical properties.

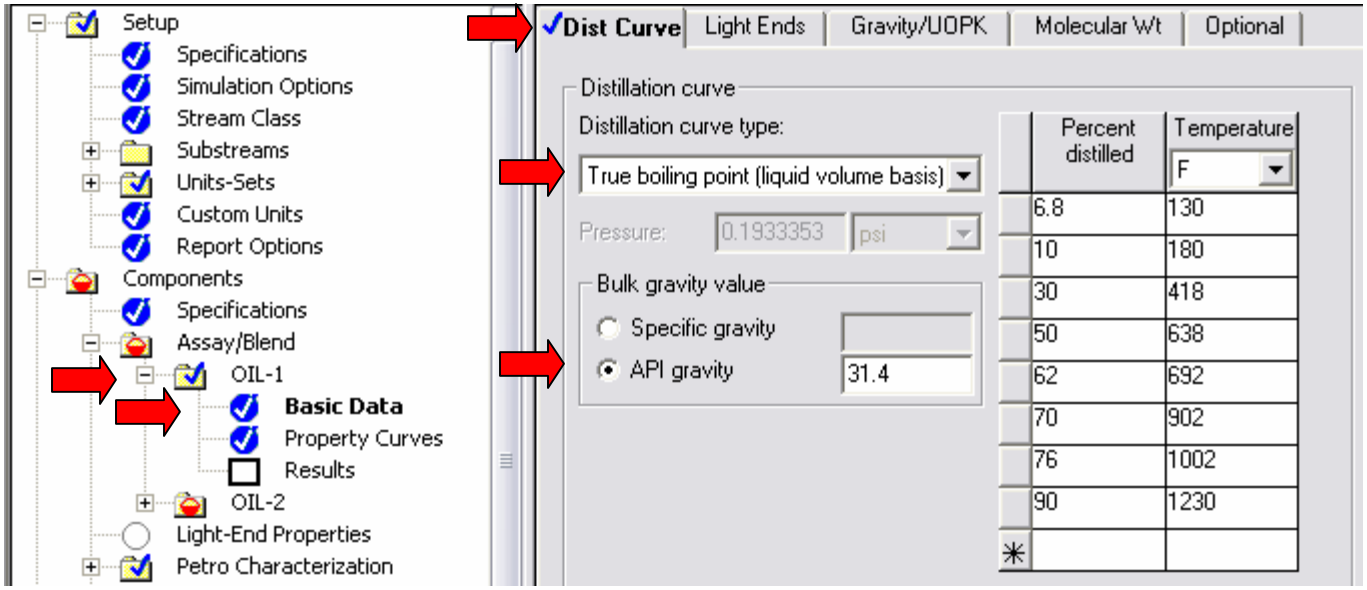
www.DownloadSoftware.iR

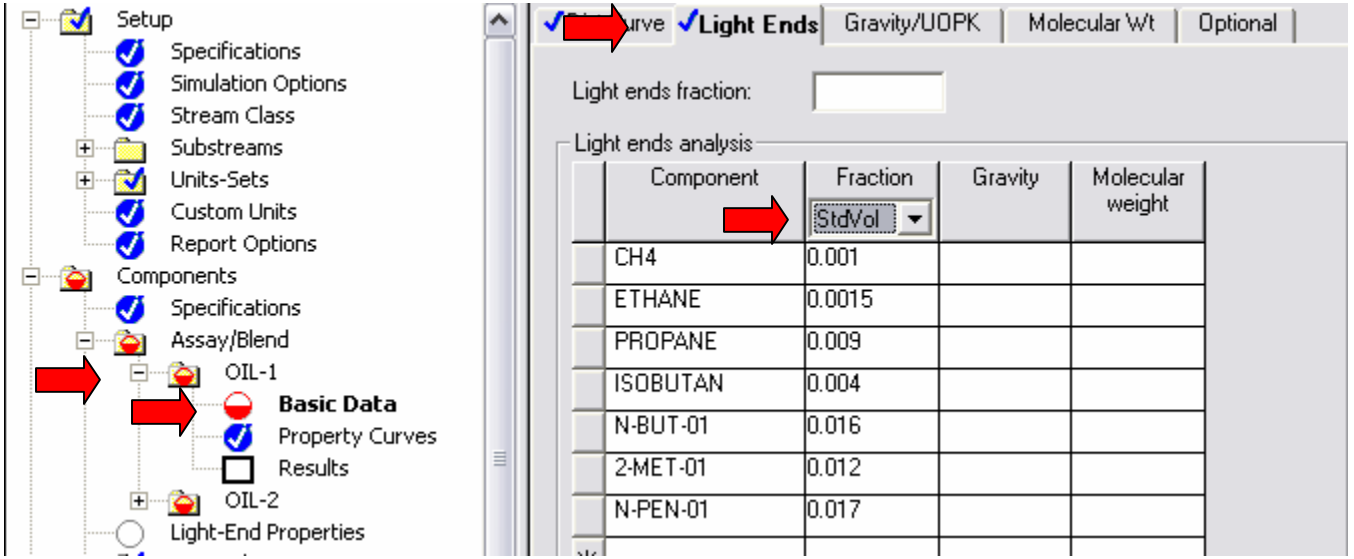
Example



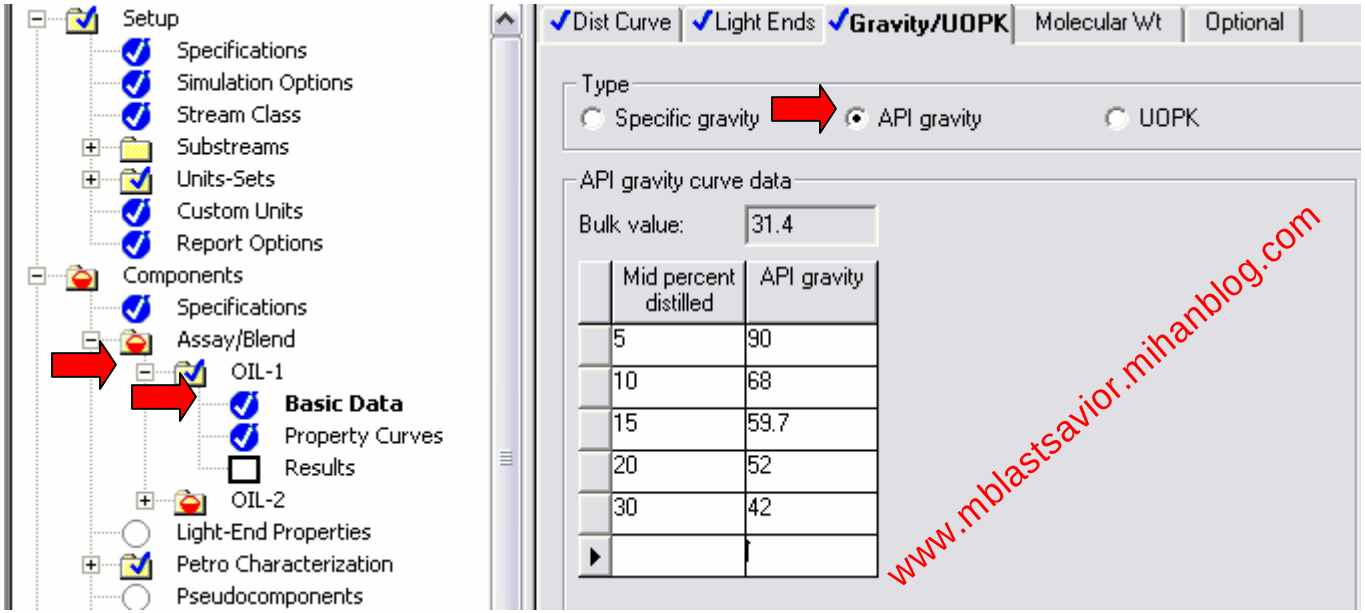


www.DownloadSoftware.iR

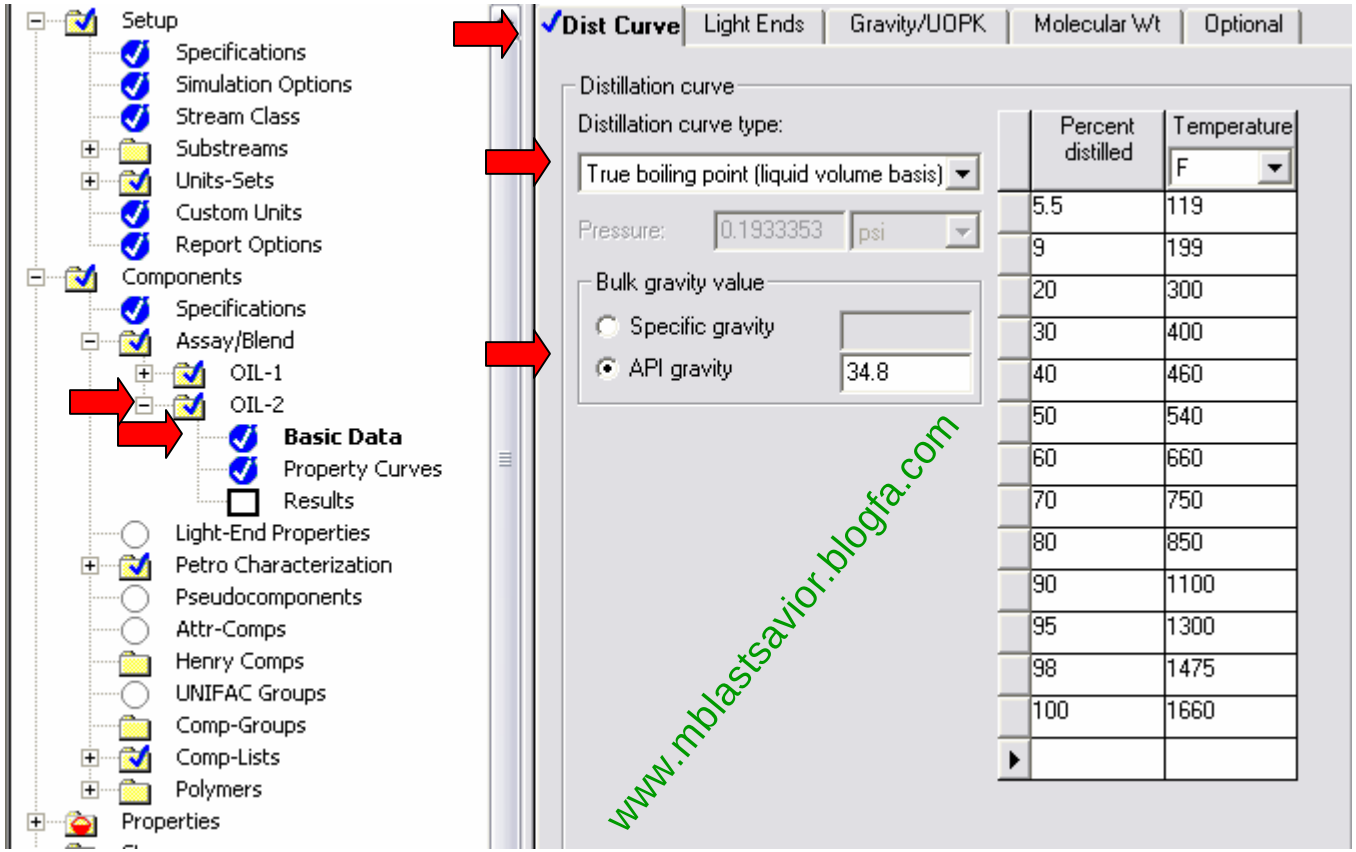




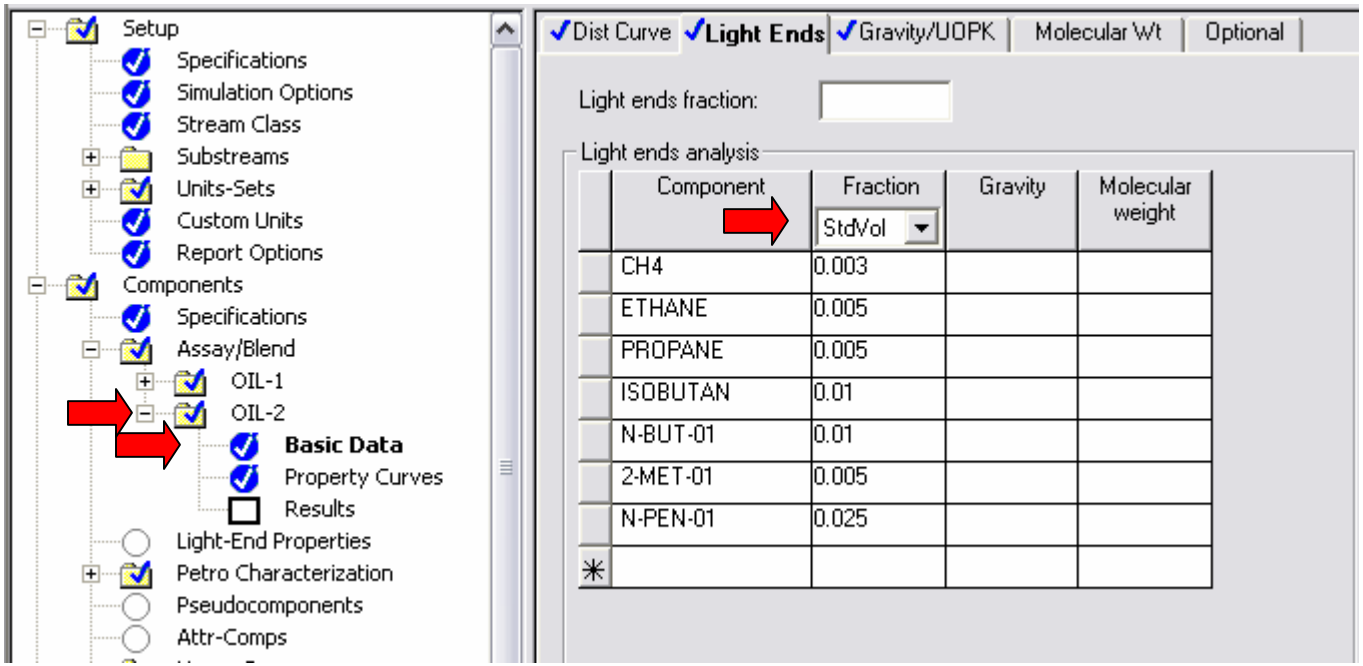
www.DownloadSoftware.iR



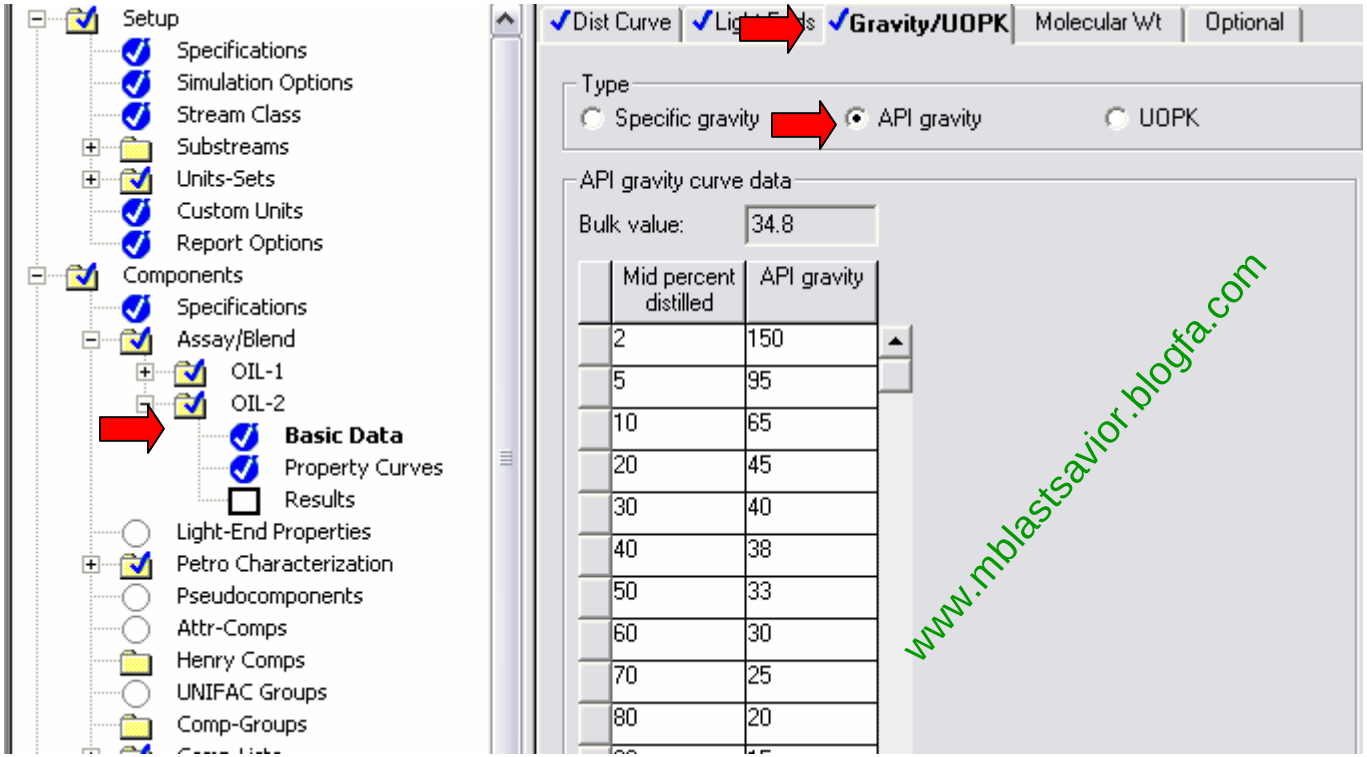
www.DownloadSoftware.iR



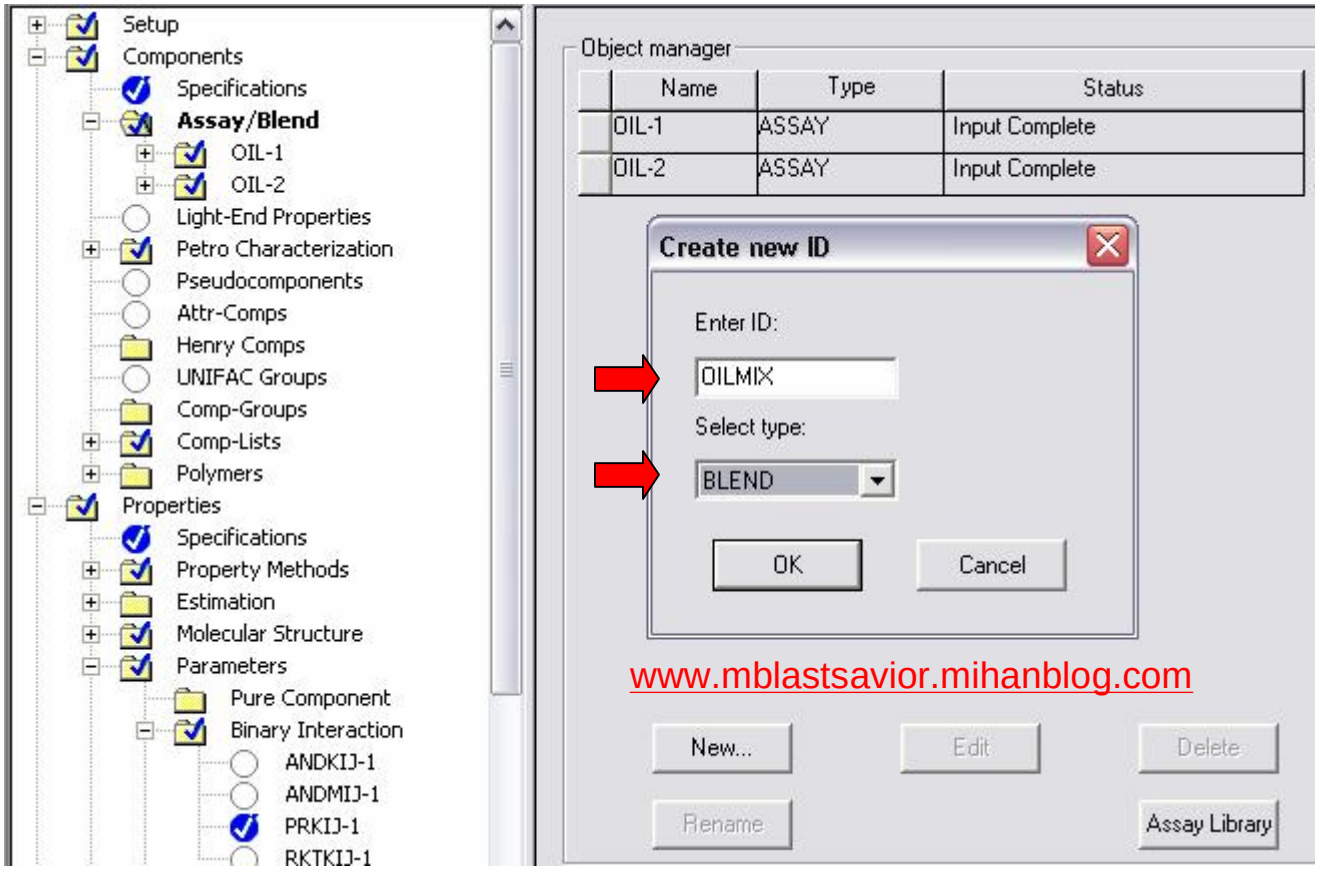
www.DownloadSoftware.iR



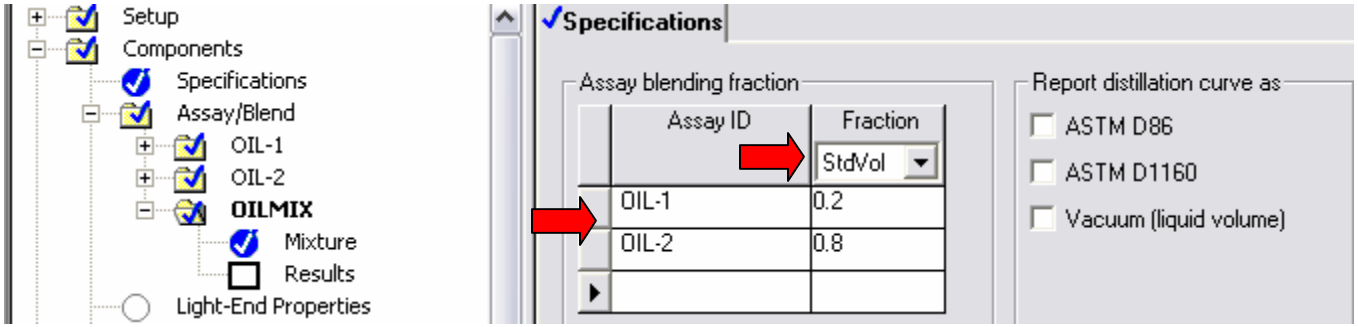
www.DownloadSoftware.iR

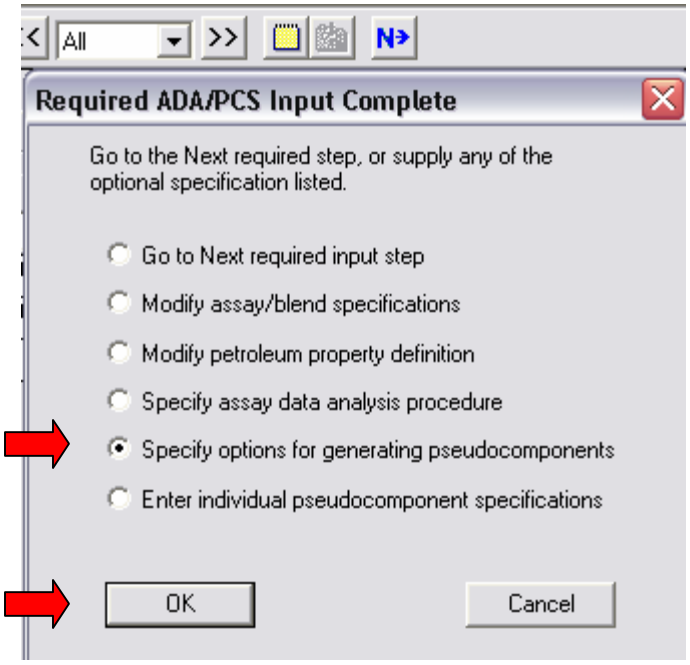


www.DownloadSoftware.iR

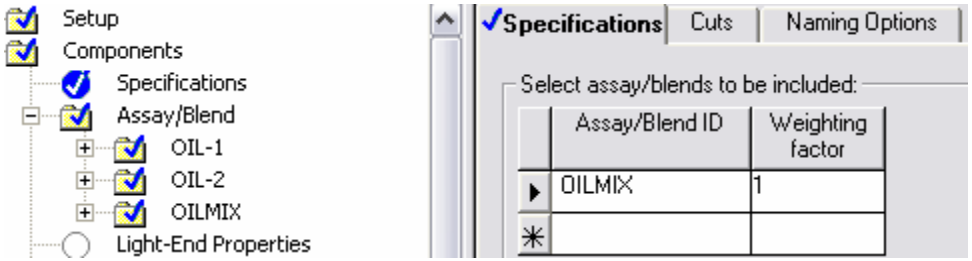


www.DownloadSoftware.iR

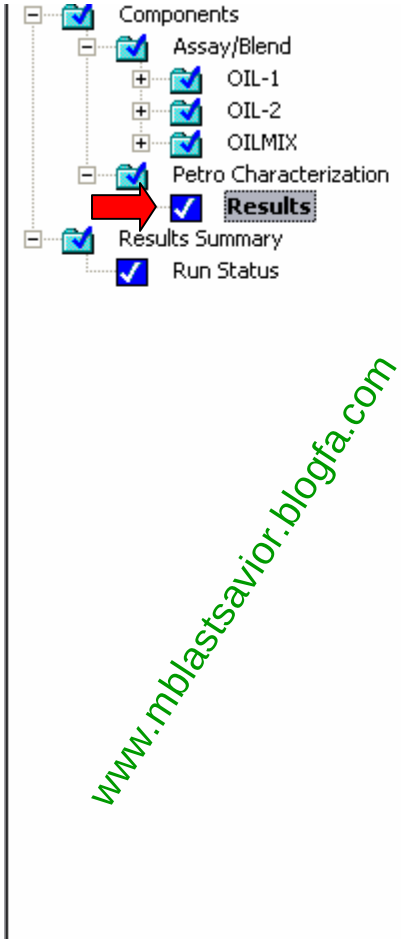




www.DownloadSoftware.iR



www.DownloadSoftware.iR

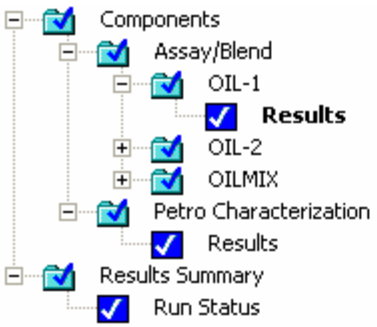


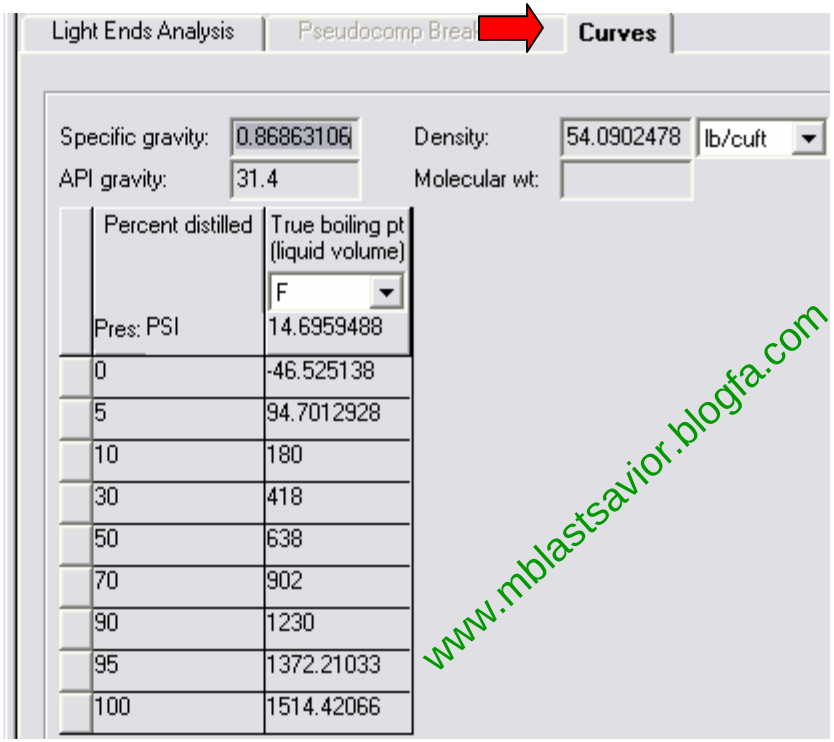
www.mblastsavior.blogfa.com

Summary | Petro Properties | Viscosity

Pseudocomponents	Normal BP (F)	API Gravity	Specific gravity	Molecular weight	Critical temperature (F)	Critical Pressure (psi)
PC142F	142.12742	82.2615644	0.66195249	82.8172289	444.907285	448.091808
PC163F	162.700143	76.8904429	0.67901387	87.8285988	471.461022	439.794171
PC188F	187.687977	71.5296274	0.69694262	94.1626445	502.255405	426.555269
PC213F	212.973434	66.5792065	0.7143607	105.288021	532.96376	413.396771
PC238F	238.330863	60.6855821	0.73626751	110.781435	565.896433	407.040888
PC263F	263.36221	53.9818307	0.76287796	115.672232	600.836562	407.406084
PC287F	286.661218	49.1556785	0.78325797	120.984985	631.108062	402.475826
PC312F	312.33011	46.3408375	0.79565527	128.48564	659.332826	386.01338
PC337F	337.496201	44.5739249	0.80363972	136.786475	684.759353	366.814696
PC363F	362.611079	43.3523248	0.80925433	145.84039	708.763362	346.983802
PC388F	387.864624	42.2762811	0.81426533	155.502752	732.392307	328.208271
PC413F	413.199812	41.0159404	0.82021406	165.488636	756.414068	311.818892
PC437F	437.343433	40.1833022	0.82419197	175.795246	778.249369	296.057077
PC462F	462.254301	39.0936021	0.82945666	186.663095	801.249934	282.02073
PC487F	487.327797	37.3617756	0.83796347	197.281588	826.028125	271.402035
PC512F	512.255748	35.5852137	0.84687326	208.095244	850.812578	261.924163
PC537F	537.202154	34.1632873	0.85414217	219.736875	874.597868	251.961935

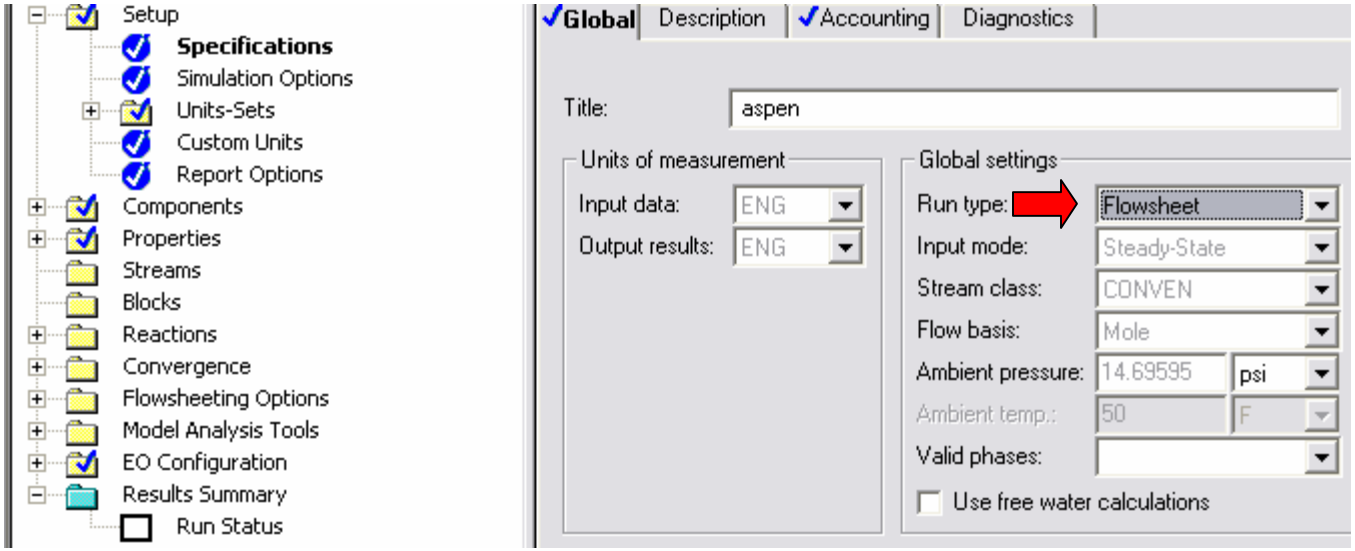
www.DownloadSoftware.iR



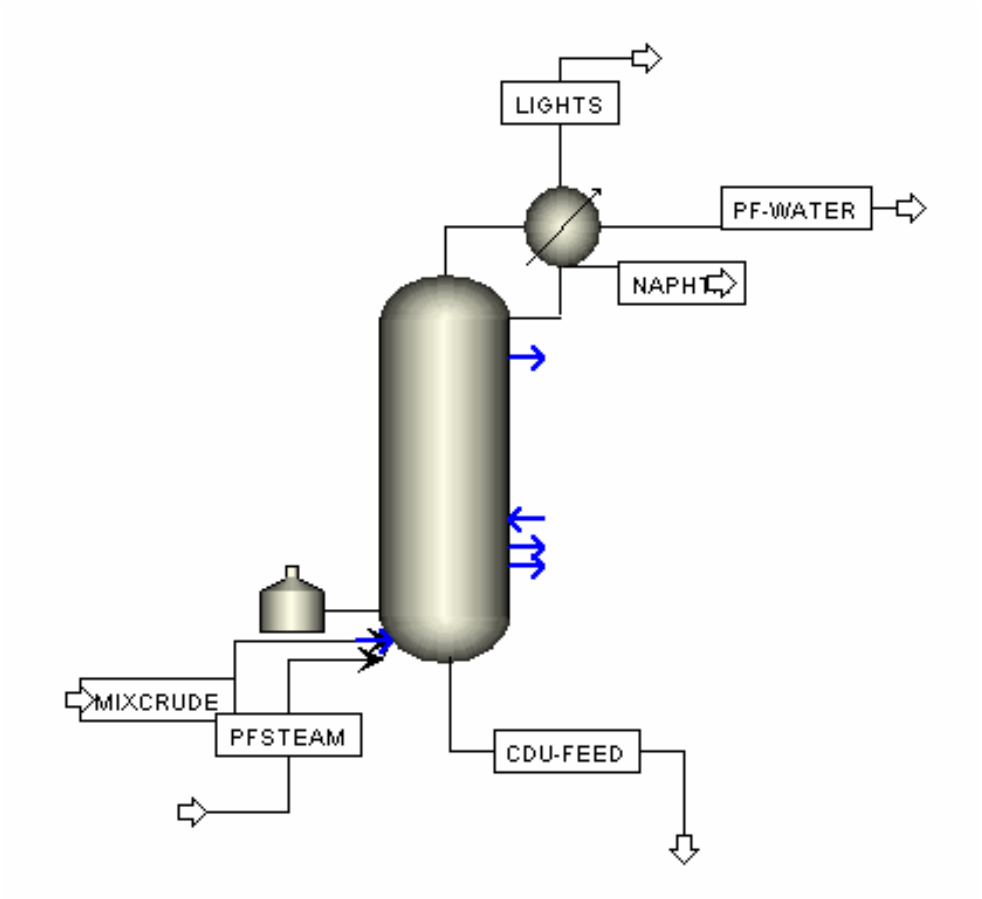


www.DownloadSoftware.iR

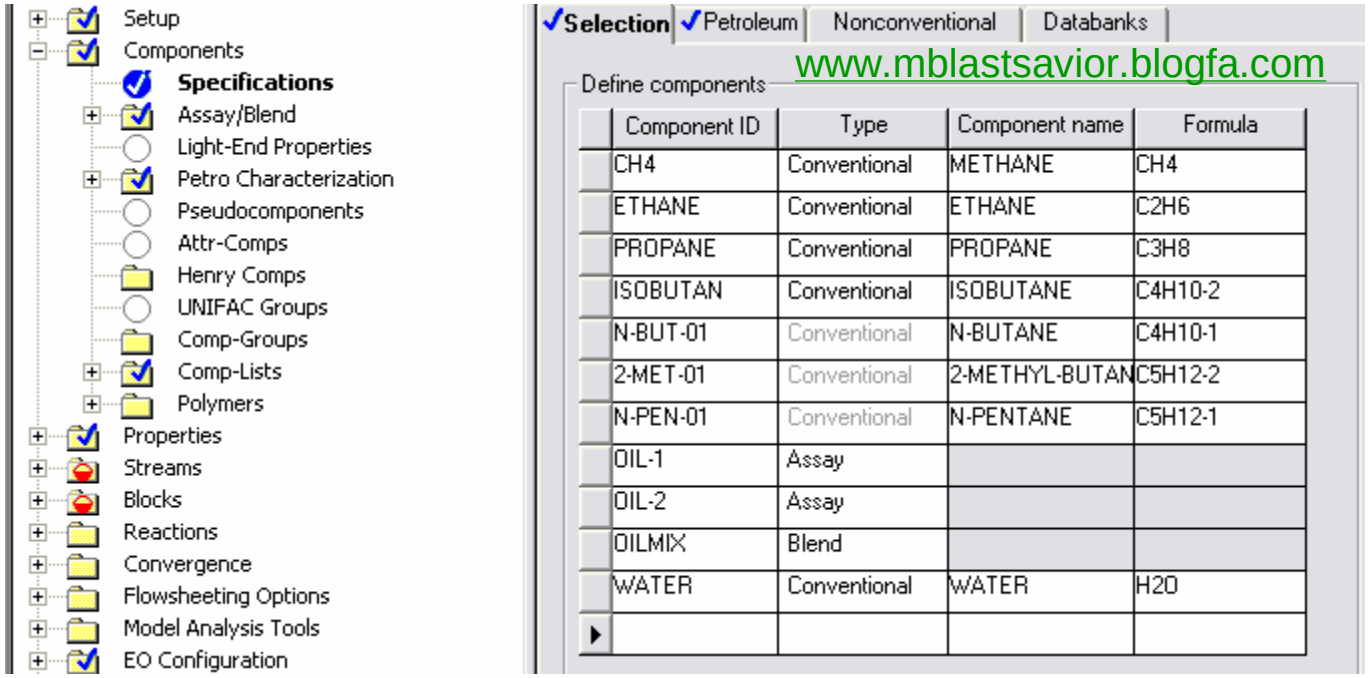
EXAMPLE(PETROFRAC)

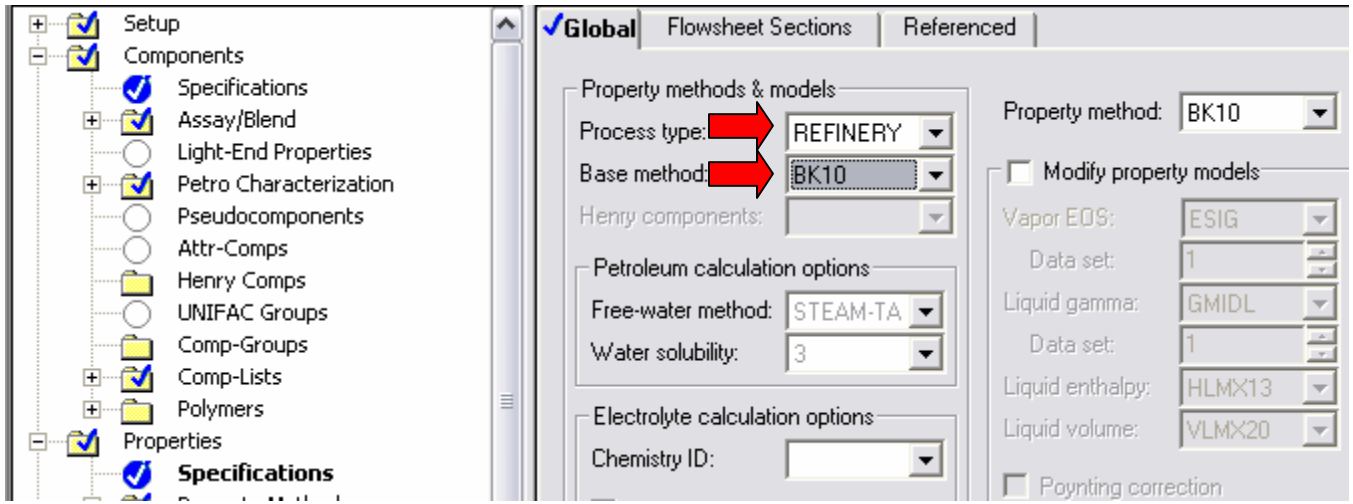


www.DownloadSoftware.iR

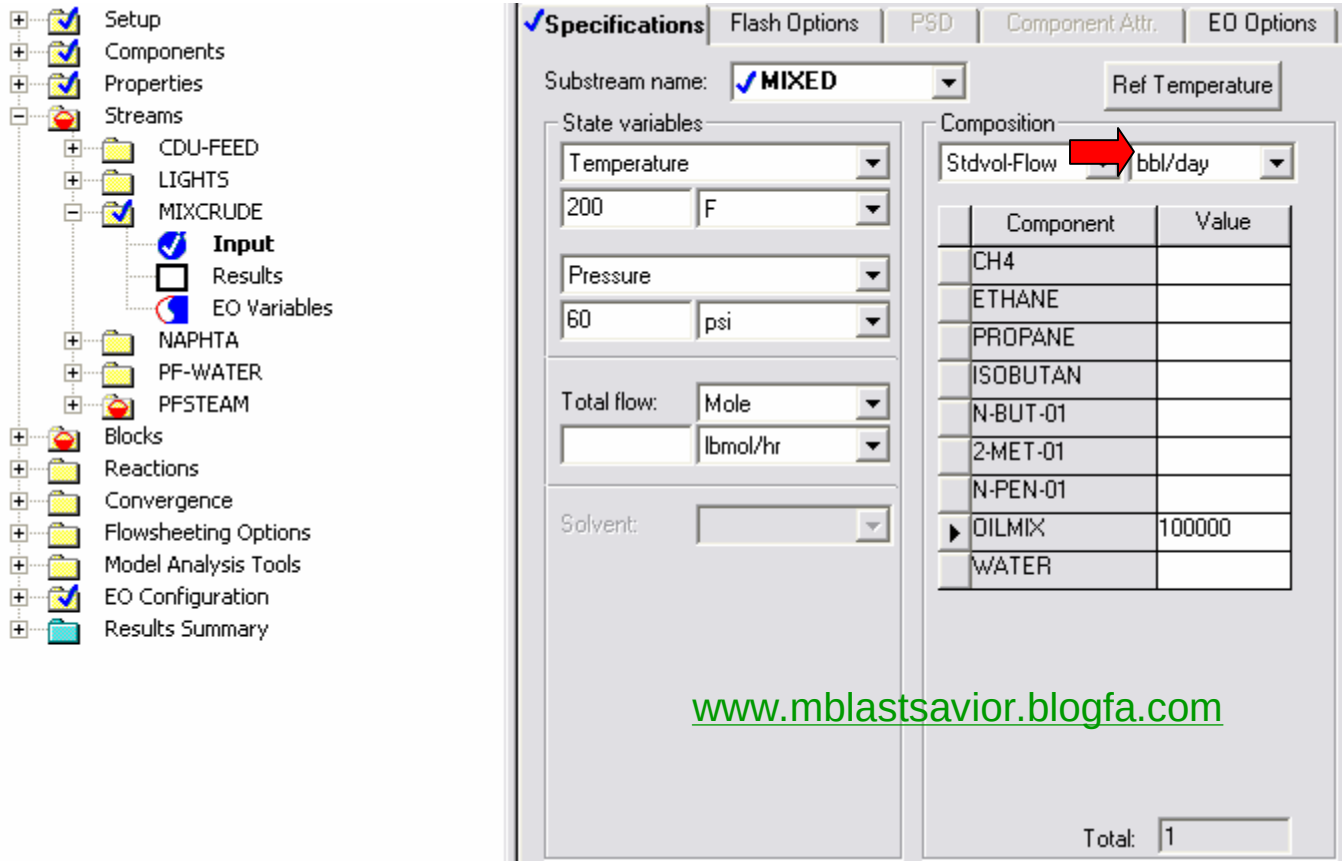


www.DownloadSoftware.iR



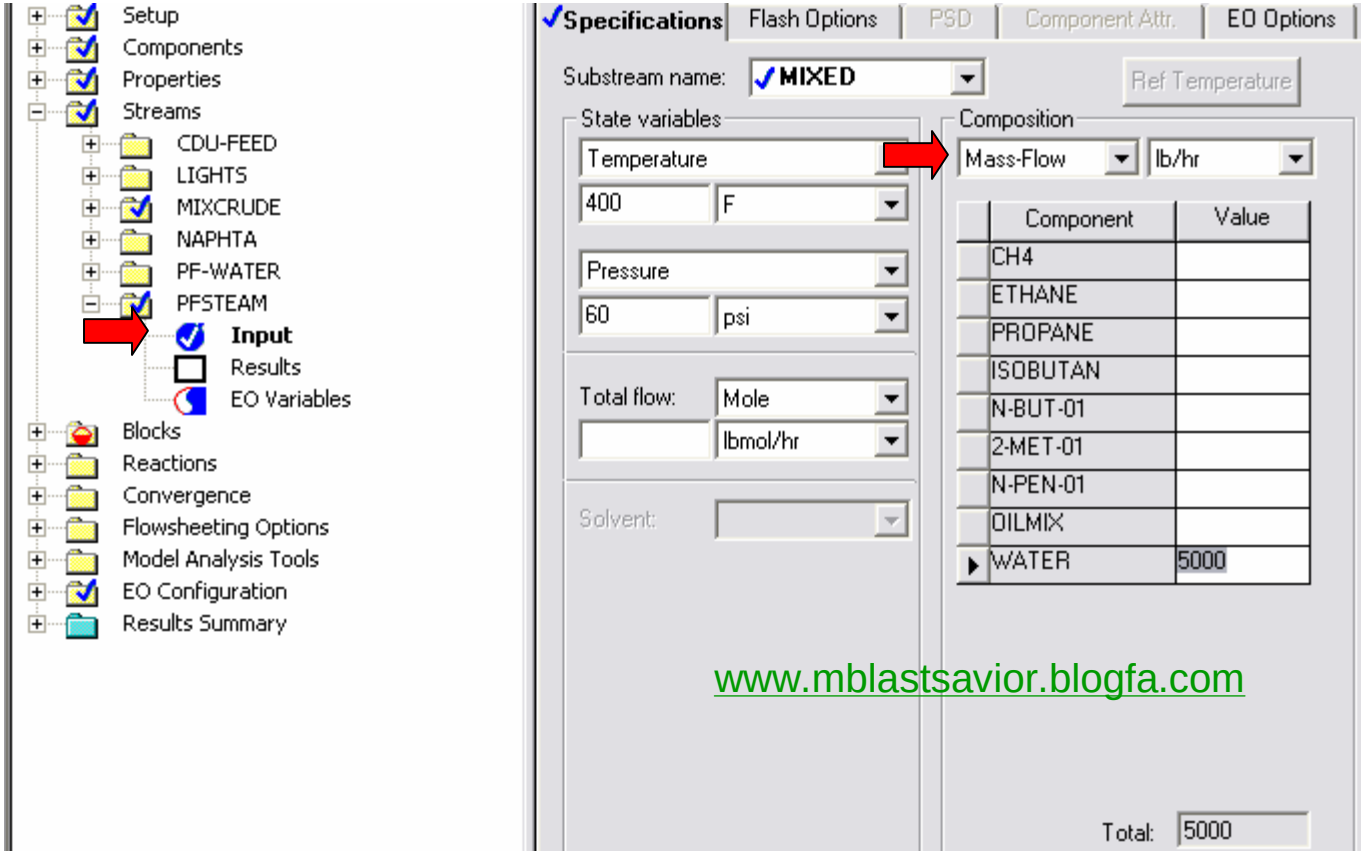


www.DownloadSoftware.iR



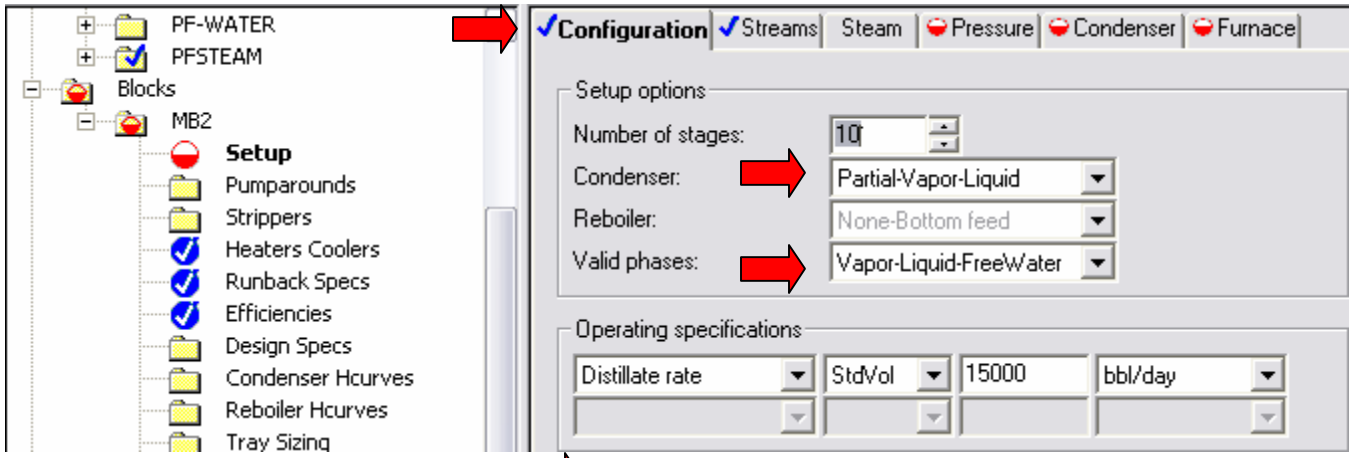
www.mblastsavior.blogfa.com

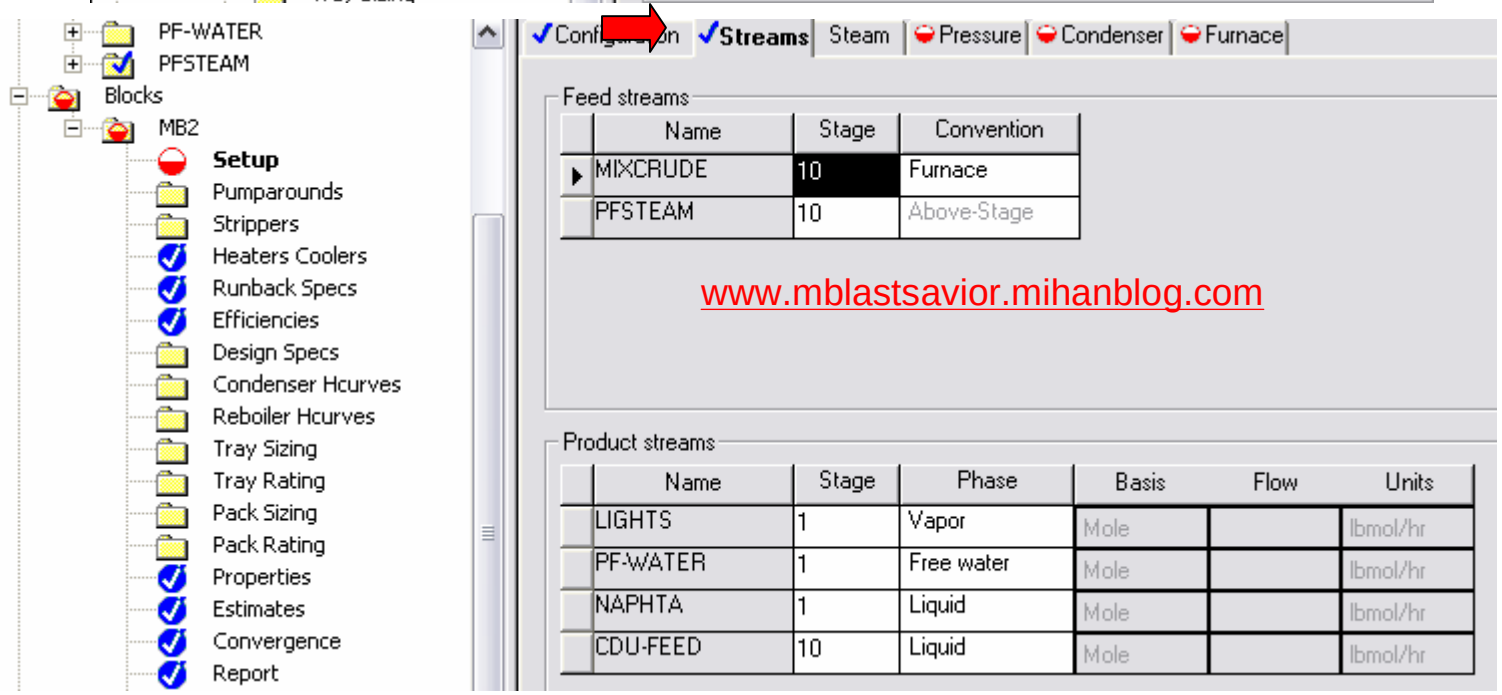
www.DownloadSoftware.iR



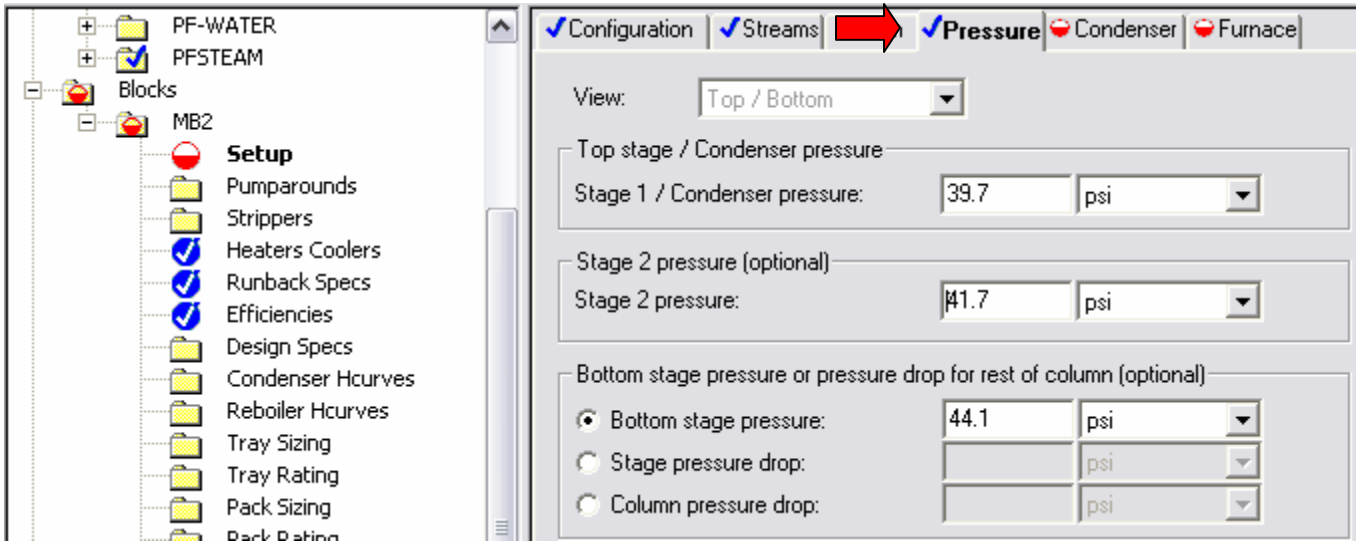
www.mblastsavior.blogfa.com

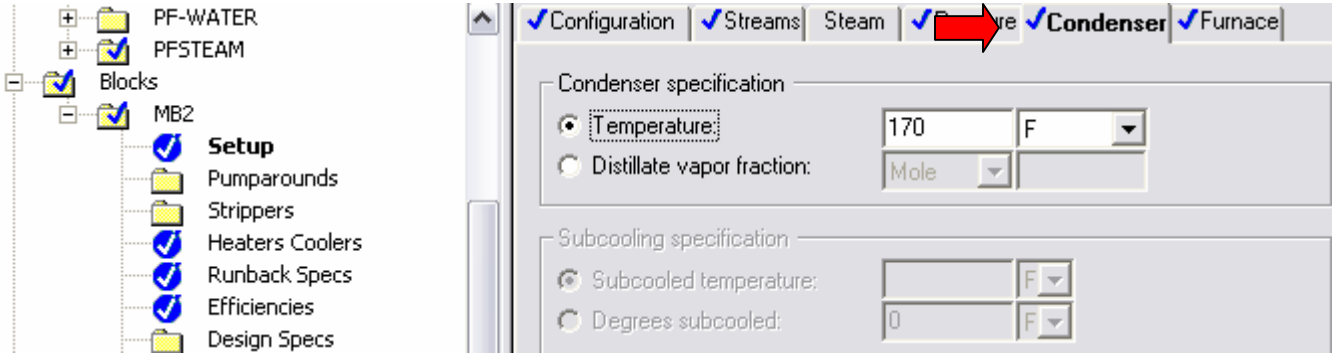
www.DownloadSoftware.iR



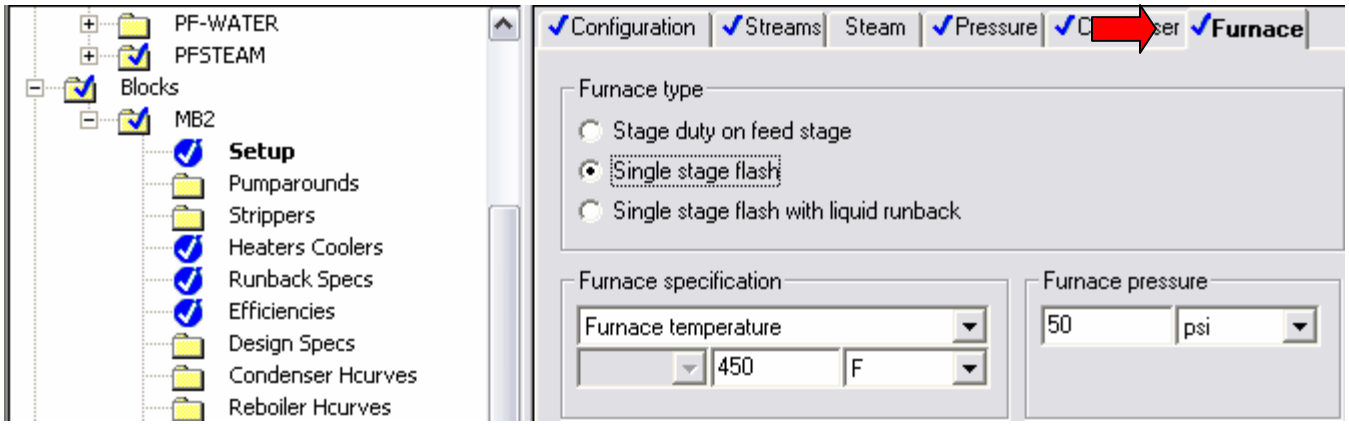


www.DownloadSoftware.iR





www.DownloadSoftware.iR



www.DownloadSoftware.iR

FINAL EXAMPLES

www.DownloadSoftware.iR

مثال ۲۴

شبیه سازی واحد تولید اتیلن اکساید

اتیلن اکساید یک ماده شیمیایی است که برای تولید اتیلن گلایکل ، پلیمرهای با جرم مولکولی سبک و سنگین و کاربردهای دیگر به عنوان افزودنی مواد شوینده استفاده می شود. این ماده از فعالیت واکنشی بالایی برخوردار است و به همین خاطر در بسیاری از جاها به عنوان یک ماده واکنشگر استفاده می شود.

شرح فرآیند

PFD این فرآیند در شکل صفحه بعدی ملاحظه می شود. جریان های خوراک اتیلن ، جریان اتیلن برگشتی وجریان هوای فشرده و خشک شده مخلوط و گرم شده و وارد راکتور اول می شود. واکنش گرمازا است و در نتیجه بخار فشار بالا در پوسته راکتور تولید می شود. میزان تبدیل در راکتور پایین نگه داشته می شود تا واکنش به سمت تولید محصول مطلوب پیش برود. خروجی راکتور سرد و فشرده شده و به برج شستشو با آب فرستاده می شود تا اتیلن اکساید تولید شده جذب آب شود. بخار جدا شده از برج شستشو گرم شده و وارد راکتور دوم می شود. خروجی راکتور دوم نیز مانند راکتور اول سرد و فشرده شده و به برج شستشو با آب فرستاده می شود. قسمتی از بخارات واکنش نداده به اول خط بازگردانی می شود و جریان های مایع محصولات زیر برج های شستشو با آب با هم ترکیب شده ، سرد شده و وارد برج تقطیر می شود تا محصول مطلوب اتیلن اکساید از آب جدا شود. خلوص لازم برای اتیلن اکساید در بالای برج ۹۹/۹٪ است.

www.DownloadSoftware.iR

داده های تعادلی Tx-y در فشار ۱ اتمسفر برای آب و اتیلن اکساید و TPx-y برای آب و نیتروژن مطابق جداول زیر هستند:

TPX-y

T (F)	P (psi)	X_{N2}	X_{H2O}	Y_{N2}
100	50	0.00004	0.99996	0.9798
100	200	0.00014	0.99986	0.995
100	450	0.0003	0.9997	0.9976
100	950	0.0006	0.9994	0.9988
100	1500	0.0009	0.9991	0.991
100	2000	0.00116	0.99884	0.993
200	50	0.00002	0.99998	0.767
200	200	0.00011	0.99989	0.9395
200	450	0.00025	0.99975	0.9723
200	950	0.00051	0.99949	0.9863
200	2000	0.00101	0.99899	0.9925
300	950	0.00065	0.99935	0.9214
400	450	0.00026	0.99974	0.4266
400	950	0.00088	0.99912	0.7055
400	1500	0.00152	0.99848	0.8025
600	2000	0.00294	0.99706	0.1445

Txy-1

T (C)	X_{EO}	X_{H2O}	Y_{EO}	Y_{H2O}
50	0.04	0.96	0.86	0.14
37.6	0.065	0.935	0.937	0.063
31.5	0.082	0.918	0.9595	0.0405
31	0.095	0.905	0.9648	0.0352
16.4	0.21	0.79	0.9818	0.0182
15.1	0.232	0.768	0.9841	0.0159
15	0.274	0.726	0.9845	0.0155
14.3	0.432	0.568	0.9853	0.0147
13.7	0.56	0.44	0.9845	0.0155
13.2	0.615	0.385	0.9853	0.0147
12	0.875	0.125	0.9888	0.0112
11.9	0.89	0.11	0.9905	0.0095
11.8	0.91	0.09	0.99	0.01
11.7	0.933	0.067	0.9934	0.0066
11.5	0.951	0.049	0.9927	0.0073

فرآیند فوق را با استفاده از معادله حالت PR و مشخصات داده شده زیر شبیه سازی نمایید.

Process Water	
T ©	۲۵
P (bar)	۳۰
H2O (mole flow) (kmol/hr)	۵۰۰۰۰
Ethylene	
T ©	۲۵
P (bar)	۵۰
E (mole flow) (kmol/hr)	۷۱۲/۹۱
EO (mole flow) (kmol/hr)	۰
O_2 (mole flow) (kmol/hr)	۰
N_2 (mole flow) (kmol/hr)	۰
CO_2 (mole flow) (kmol/hr)	۰
H_2O (mole flow) (kmol/hr)	۰

Air	
T (C)	۲۵
P (bar)	۱
E (mole flow) (kmol/hr)	۰
EO (mole flow) (kmol/hr)	۰
O_2 (mole flow) (kmol/hr)	۲۲۸۱۲۵
N_2 (mole flow) (kmol/hr)	۱۴۱۰۰۰۹
CO_2 (mole flow) (kmol/hr)	۰
H_2O (mole flow) (kmol/hr)	۰

Valve	P (bar)
V-701	۲۷
V-702	۲۷
V-703	۲۶/۵
V-704	۱۰

www.DownloadSoftware.iR

Heater	T ©	Δ P (bar)
E-701	۴۵	۰/۳
E-702	۴۵	۰/۳
E-703	۲۴۰	۰/۳
E-704	۴۵	۰/۳
E-705	۲۴۰	۰/۳
E-706	۴۵	۰/۳
E-707	۴۵	۰/۳

Compressor	P (bar)	بازدهی ایزنتروپیک
C-701	۳	۸۰٪
C-702	۹	۸۰
C-703	۲۷	۸۰
C-704	۳۰/۱۵	۸۰
C-705	۳۰/۱۵	۸۰

COLUMN	T-701	T-702	T-703
تعداد سینی های برج	۵	۵	۲۵
سینی خوراک	۱و۵	۱و۵	۱۲
نوع کندانسور	ندارد	ندارد	جزئی
دمای کندانسور ©	-	-	۱۰
نوع ریبویلر	ندارد	ندارد	kettle
شدت جریان محصول بالای برج (kg/hr)	-	-	۱۰۰۰۰
نسبت جرمی جریان برگشتی	-	-	۸
فشار بالای برج (bar)	۳۰	۳۰	۴

- میزان Split Fraction کلیه Splitter ها برابر ۵۰٪ است.
- راکتور اول از نوع پلاگ و همدما (در دمای ورودی) با افت فشار ۰/۷۵ بار می باشد. راکتور دارای ۱۰۰۰ لوله ، هر کدام با طول ۴ متر و قطر ۷۳۸ سانتیمتر می باشد.
- راکتور دوم از نوع پلاگ و همدما (در دمای ورودی) با افت فشار ۰/۷۵ بار می باشد. راکتور دارای ۵۰۰ لوله ، هر کدام با طول ۴ متر و قطر ۹/۳۳ سانتیمتر می باشد.
- واکنش های زیر در داخل راکتور به وقوع می پیوندند.

$$E + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow EO \qquad r_1 = \frac{1.96e^{-\frac{2400}{RT}}P_E}{1+9.8\times10^{-4}e^{-\frac{11100.9}{RT}}P_E}$$

$$E + 3O_2 \rightarrow 2CO_2 + 2H_2O \qquad r_1 = \frac{0.0936e^{-\frac{6400}{RT}}P_E}{1+9.8\times10^{-4}e^{-\frac{11100.9}{RT}}P_E}$$

$$EO + \frac{5}{2}O_2 \rightarrow 2CO_2 + 2H_2O \qquad r_1 = \frac{0.42768e^{-\frac{6200}{RT}}P_E^2}{1+3.3\times10^{-5}e^{-\frac{21100.9}{RT}}P_E^2}$$

$$E:\left(\frac{cal}{mol}\right) \quad , \quad R = 1.987\left(\frac{cal}{mol.K}\right)$$

- میزان بازیافت اتیلن اکساید در برج تقطیر ۹۸٪ است. محدوده تغییرات دبی جرمی جریان ۳۲ را بین ۱۵۰۰۰-۱۰۰۰۰ در نظر بگیرید.

www.DownloadSoftware.iR

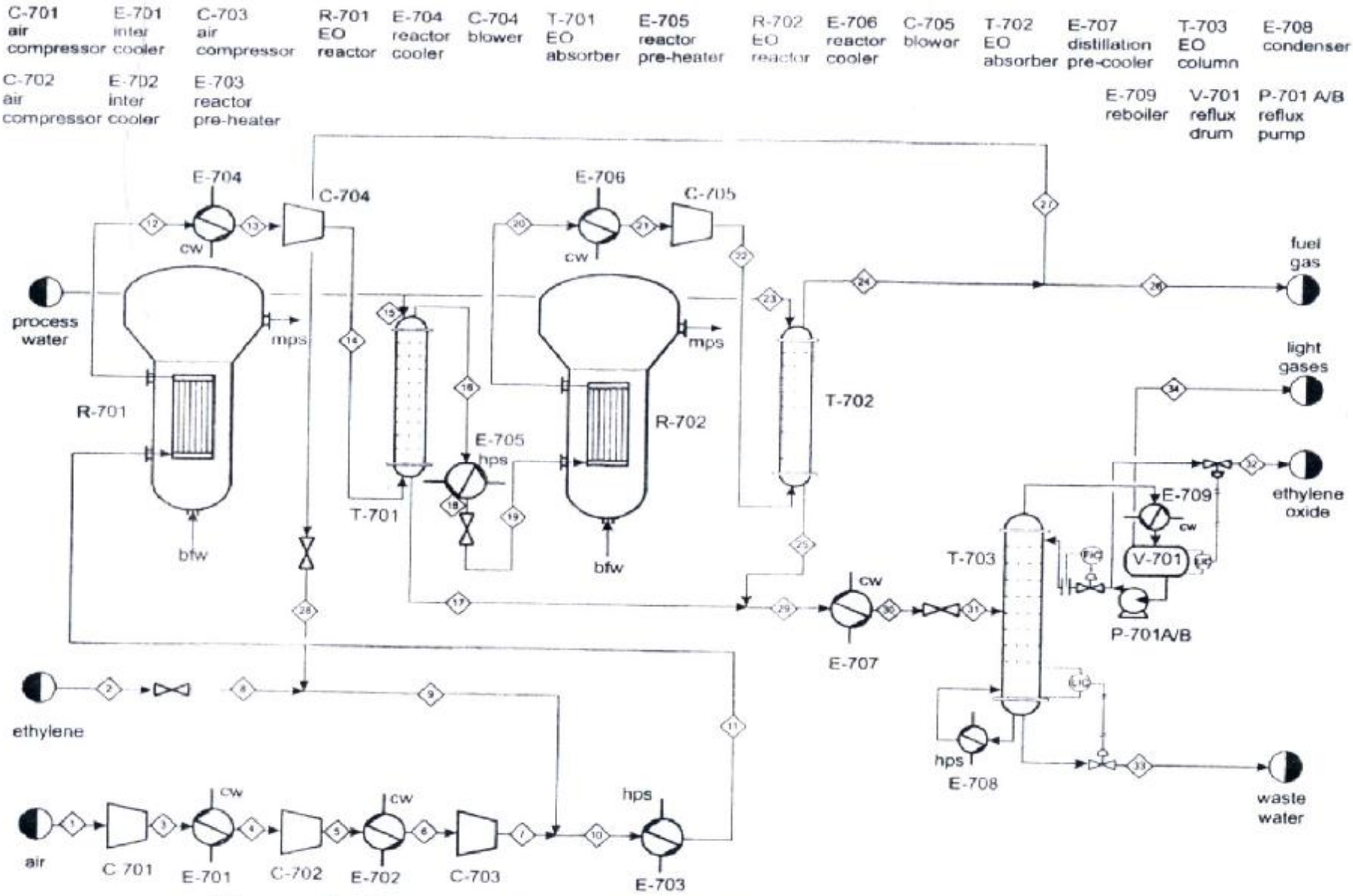
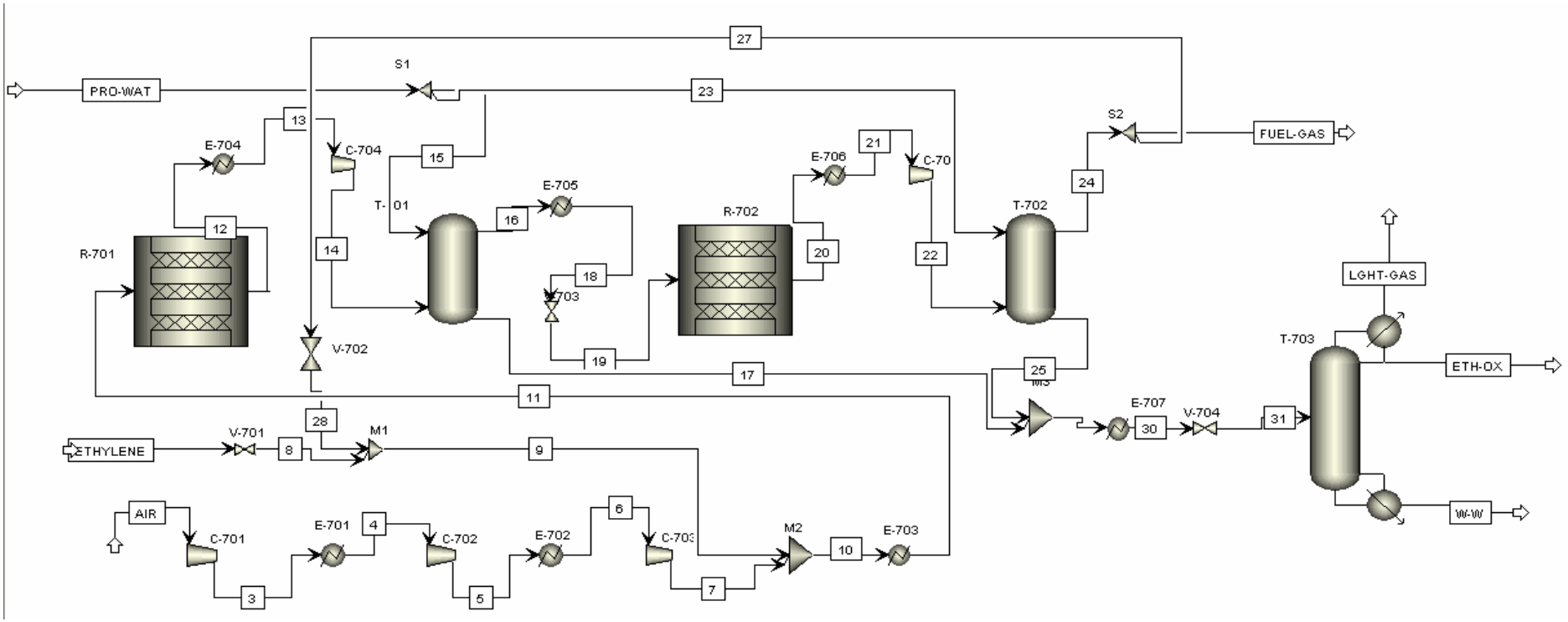


Figure 1: Process Flow Diagram for Ethylene Oxide Production

www.DownloadSoftware.iR



www.DownloadSoftware.iR

مثال ۲۵

شبیه سازی فرآیند تولید مونومر وینیل کلراید

مونومر وینیل کلراید (VCM) توسط یک فرآیند تحت فشار غیر کاتالیستی از طریق پیرولیز ۲و۱ دی کلرو اتان (EDC) مطابق واکنش زیر تولید می شود.

$$CH_2Cl - CH_2Cl\,(EDC) \rightarrow HCl + CHCL = CH_2\,(VCM)$$

واکنش کراکینگ EDC در دمای ۵۰۰ C و فشار ۳۰ بار در داخل یک کوره Fired Furnace اتفاق می افتد. خوراک EDC با دبی ۱۰۰۰ kgmol/hr در دمای ۲۰ C و فشار ۳۰ بار وارد راکتور می شود. میزان تبدیل EDC در داخل راکتور ۵۵٪ است. گازهای داغ تولید شده از راکتور قبل از ورود به برج تفکیک سازی به میزان ۱۰ C خنک می شود. به منظور خالص سازی محصول VCM از دو ستون تقطیر استفاده می شود. در ستون اول محصول HCL از بالای برج گرفته شده و خروجی پایین برج جهت خالص سازی مجدد به عنوان خوراک وارد برج دوم می شود. محصول VCM از بالای برج دوم گرفته شده و جریان پایین برج که شامل EDC واکنش نداده می شود به کوره بازگردانی می شود. محصولات بالای هر دو برج به صورت مایع اشباع است. برج اول در فشار ۲۵ بار و برج دوم در فشار ۸ بار کار می کنند.

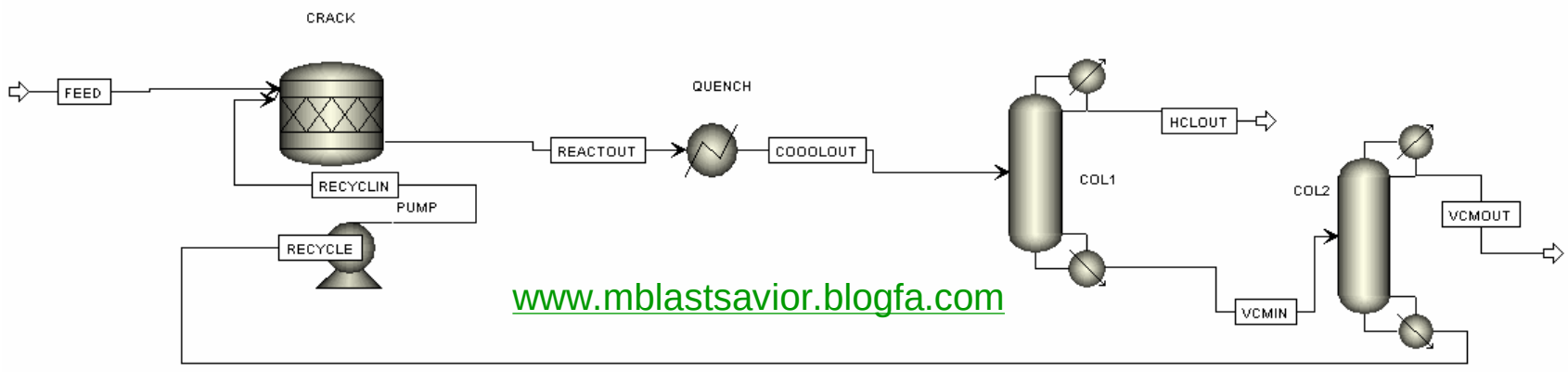
(معادله حالت : RK-SOAVE)

مطلوبست :

- بار حرارتی کوره
- دمای خروجی Quench
- بار حرارتی Quench
- بار حرارتی کندانسور و ریبویلر برج دوم
- غلظت VCM در جریان محصول VCM

مطلوبست نمودارهای بار حرارتی کوره و بار حرارتی Quench در تابعیت با میزان تبدیل EDC . (میزان تبدیل EDC به VCM در داخل کوره بین ۵۰٪ و ۵۵٪ متغیر است.)

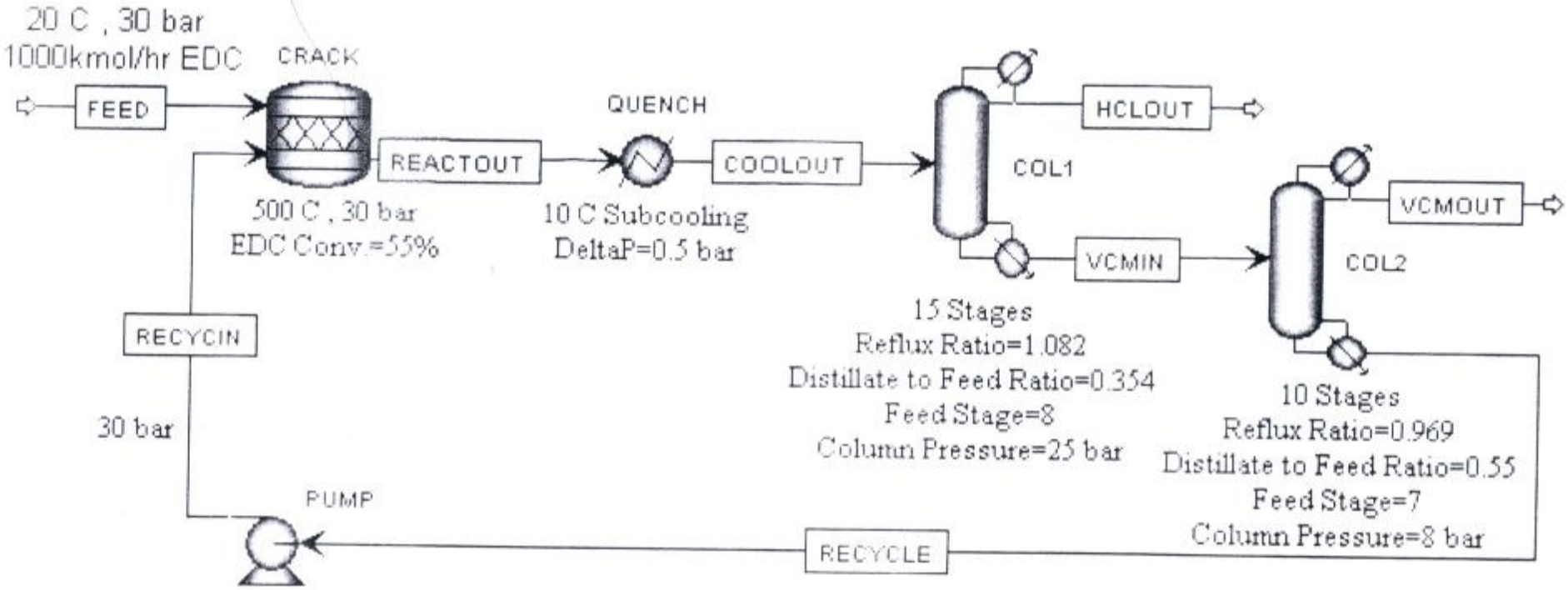
www.DownloadSoftware.iR



www.mblastsavior.blogfa.com

www.DownloadSoftware.iR

فرآیند تولید مونومر وینیل کلراید (VCM)



www.DownloadSoftware.iR

سخن پایانی

به نظر می رسد در عصری که آن را عصرانفجار اطلاعات نامیده اند ومن آن را عصر روشن ایران می نامم، مهمترین دغدغه برای پیشرفت و ترقی پیدا کردن منابع درست مطالعاتی می باشد.در جزوات اخیر سعی شده است بر اساس تجربه و مطالعه چندین منبع مختلف بهترین سیستم آموزشی برای سریعترین نتیجه گیری ارائه شود.

مطمئن باشید که با بخشش علمی به اطرافیان درهای پنهان و ناگشوده علم را بر روی خود گشوده خواهید دید! این درسی است که از طبیعت گرفتم .قدرتمندی و ویران کنندگی یک گردباد به میزان خلا درون آن بستگی دارد.انتقال دانش به دیگران همان منشا خلا علمی شماست.

این جزوه تقدیم می شود به پدر و مادرم که پشتوانه ای بی بدیل برای این حقیر بودند.

و با تشکر از تمام کسانی که صمیمانه در این راه یاورم بودند

به طور قطع این جزوه خالی از اشکال نمی باشد. خواهشمند است در تصحیح و بهتر نمودن آن اینجانب را یاری نمایید.

Email: lastsavior_b@yahoo.com
Weblog: www.mblastsavior.mihanblog.com
www.mblastsavior.blogfa.com

www.DownloadSoftware.iR