نقطه حباب Bubble point

به فشار و دمايي كه در آن اولين حباب گاز در مخلوط مايع ايجاد شود نقطه حباب گويند. همچنين در محاسبات نقطه حباب (فشار يا دما) به علاوه آناليز خوراك و مايع خروجي مشخص است و بايد (به همان ترتيب دما يا فشار) و غلظت مواد در فاز بخار (y_i) را محاسبه كنيم. با استفاده از روش هاي زير مي توان محاسبات فوق را انجام داد

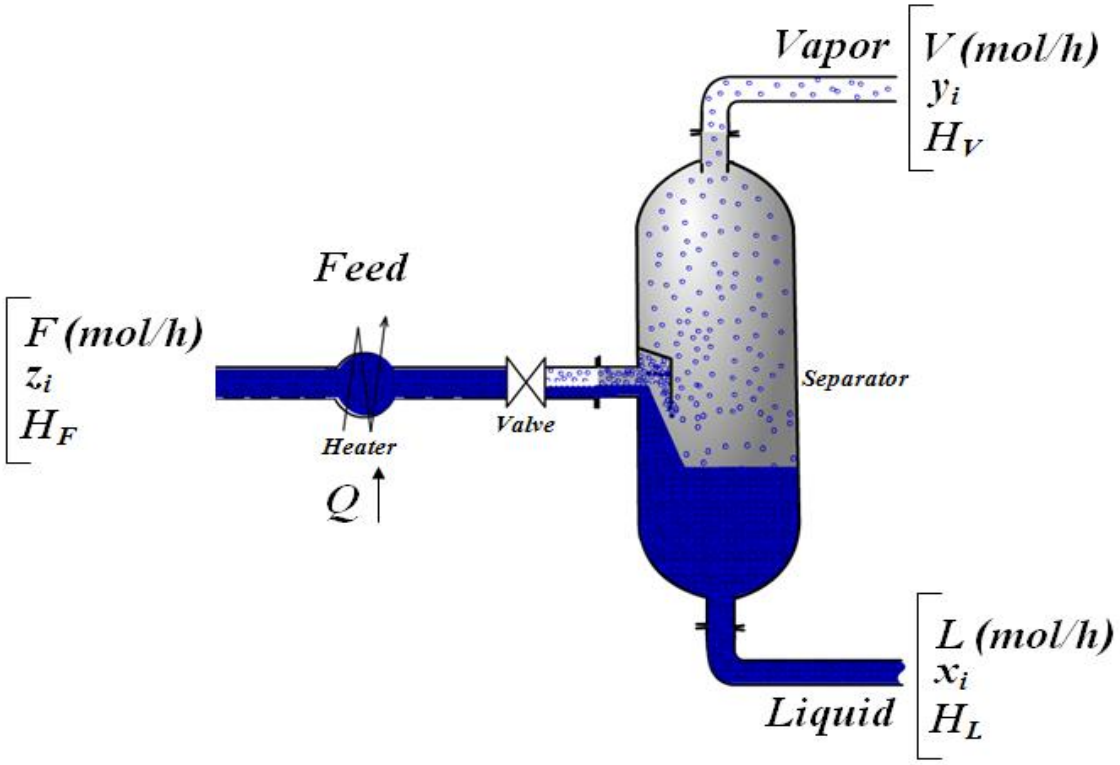
- قانون رائولت-دالتون
- k_{value}
- ضريب فراريت نسبي

نقطه شبنم Dew point

به فشار و دمايي كه بخار در اين نقطه شروع به مايع شدن مي كند. دماي شبنم در يك فشار معين ، به دمايي كه با كاهش آن اولين قطره مايع ظاهر مي شود. در محاسبات دماي نقطه شبنم فشار و آناليز بخار مشخص است و بايد دما و مقادير غلظت مواد در فاز مايع (x_i) را محاسبه كنيم. در محاسبات فشار نقطه شبنم دما و آناليز بخار خروجي مشخص است و بايد فشار و مقادير x_i در فاز مايع را محاسبه كنيم .در ادامه فلوچارت روش محاسبه دماي نقطه شبنم با استفاده از معادله آنتوان و به كار بردن ثابت تعادل ترموديناميكي ارائه شده است كه معادلات و نحوه محاسبه پارامترها با معادلات مذكور مشابه محاسبه دماي نقطه حباب است .

محاسبات *flash* (براي سيستم چند جزئي)

تقطير ناگهاني يك فرآيند تك مرحله اي است كه در آن ابتدا مايع را گرم كرده و بعد فشار را كاهش مي دهند. قسمتي از مايع به حالت بخار در مي آيد كه بخار حاصل در حالت تعادل با مايع باقي مانده است. سپس فاز بخار و مايع در يك دستگاه جدا كننده از يكديگر جدا مي شوند. در نتيجه در محاسبات تقطير ناگهاني آناليز خوراك ، دما و فشار مشخص است و دبي مايع و بخار خروجي و همچنين آناليز آنها را بايد محاسبه كنيم. بنا بر اين در محاسبات ، مقادير x_i و y_i مجهول مي باشد.



موازنه جرم کل

$$\boldsymbol{F = V + L}$$

موازنه جرم جزء i

$$\boldsymbol{(z_i \times F) = (y_i \times V) + (x_i \times L)}$$

موازنه انرژي

$$\boldsymbol{(H_F \times F) + Q = (H_V \times V) + (H_L \times L)}$$

با توجه به رابطه ثابت تعادل ترموديناميكي

$$k_i = {y_i}/{x_i}$$

مي توان براي بدست آوردن مقدار بخار و مايع حاصل و همچنين كسر مولي اجزاء در فاز بخار و در فاز مايع در محاسبات تقطير ناگهاني ، با معلوم بودن دما ، فشار ، مقدار خوراك و كسر مولي اجزاء در خوراك ، از روابط زير كه بر مبناي روابط فوق بدست آمده اند استفاده كرد

$$v = \frac{V}{F} \quad ، \quad l = \frac{L}{F}$$

$$\frac{F}{F} = \frac{V}{F} + \frac{L}{F} \quad \rightarrow \quad 1 = v + l$$

$$x_i = \frac{z_i}{1 + [(k_i - 1) \times v]}$$

$$y_i = \frac{k_i \times z_i}{1 + [(k_i - 1) \times v]}$$

براي محاسبات تقطير ناگهاني كه نيازمند حدس و خطا است. براي مثال در روابط فوق با توجه به اينكه مساله در شرايط دما و فشار مشخص براي يك تركيب معين مي باشد بنا بر اين مقادير k_i و Z_i معلوم است و مقدار υ يا كسري از مخلوط اشباع مي باشد كه بخار است. بنا بر اين υ مقداري بين 0 تا 1 است. به بيان ديگر هنگامي كه مقدار υ صفر است بدين معني است كه كل مخلوط اوليه به صورت مايع اشباع است و زماني كه υ برابر 1 است به اين مفهوم است كه 100% مخلوط در فاز بخار مي باشد. جهت تكرار محاسبات بايد از روش هاي عددي استفاده كرد. يكي از روش هاي مناسب روش نيوتن رافسون است. در صورت استفاده از اين روش ، براي حدس جديد نياز است كه يك تابع از آن پارامتر تعريف و همچنين از مشتق آن تابع نيز استفاده كرد. در اين محاسبات در صورت به كار گرفتن روش نيوتن رافسون ، براي منظور ذكر شده مي توان متناسب با پارامتر هاي اشاره شده به صورت زير تابعي تعريف كرد. با توجه به اينكه جمع كسر مولي اجزاء در فاز بخار و نيز در فاز مايع بايد يك باشد بنا بر اين تفاوت حاصل جمع كسر مولي اجزاء در فاز بخار و حاصل جمع كسر

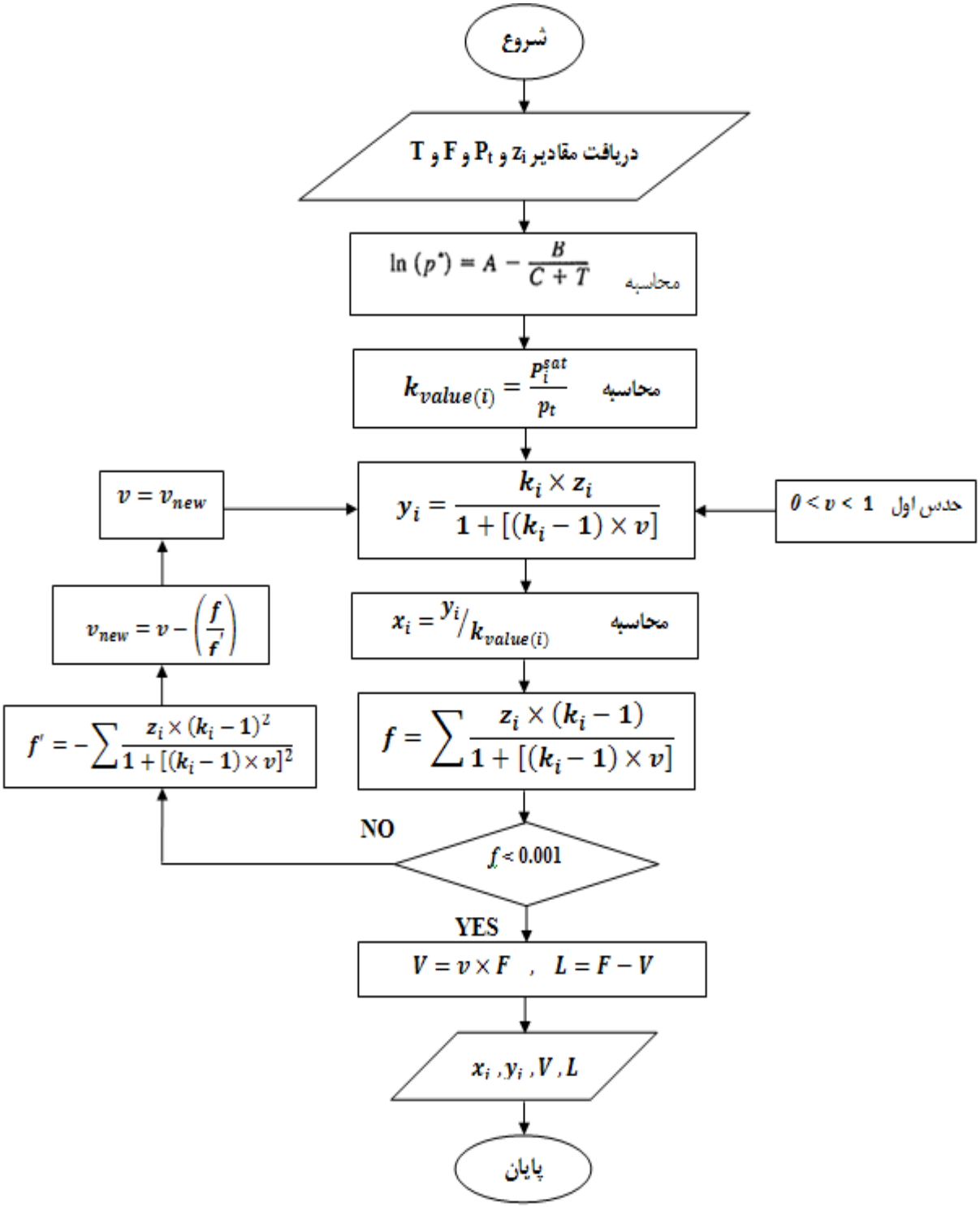
مولي اجزاء در فاز مايع بايد صفر باشد. لذا با استفاده از روابط كسر مولي كه در اين محاسبات تعريف شد تابع مورد نظر به صورت زير در مي آيد

$$f = \sum y_i - \sum x_i = \sum \frac{z_i \times (k_i - 1)}{1 + [(k_i - 1) \times v]} = 0$$

همان گونه كه اشاره شد در روش نيوتن رافسون نياز به مشتق تابع است. مشتق تابع فوق بر حسب υ به صورت زير مي باشد

$$f' = -\sum \frac{z_i \times (k_i - 1)^2}{1 + [(k_i - 1) \times v]^2}$$

در ادامه با استفاده از روش نيوتن رافسون در محاسبات و به كمك معادلات فوق الگوريتم محاسبات تقطير ناگهاني با قانون تعادل فازي رائولت و معادله آنتوان ، به صورت فلوچارت ارائه شده است.


شروع
دریافت مقادیر z_i و P_t و F و T
$\ln(p^*) = A - \frac{B}{C+T}$ محاسبه
$k_{value(i)} = \frac{p_i^{sat}}{p_t}$ محاسبه
$y_i = \frac{k_i \times z_i}{1 + [(k_i - 1) \times v]}$
حدس اول $0 < v < 1$
$v = v_{new}$
$x_i = y_i / k_{value(i)}$ محاسبه
$v_{new} = v - \left(\frac{f}{f'}\right)$
$f = \sum \frac{z_i \times (k_i - 1)}{1 + [(k_i - 1) \times v]}$
$f' = -\sum \frac{z_i \times (k_i - 1)^2}{1 + [(k_i - 1) \times v]^2}$
NO
$f < 0.001$
YES
$V = v \times F \quad , \quad L = F - V$
x_i , y_i , V , L
پایان

مثال

تركيب كلي (100 (kmol/h از سيستم سه جزئي (1) استون – (2) استونيتريل – (3) نيترومتان در دماي (c) 80 و فشار (110 (kPa در حالت دوفازي قرار دارد كه تركيب مخلوط اشباع اوليه به ترتيب داراي كسر مولي 0.45 و 0.35 و 0.20 مي باشد. در جدول زير مقادير فشار بخار اجزاء مذكور در دماي c 80 ارائه شده است.

	1: Acetone	2: Acetonitrile	3:Nitromethane
P (kPa)	195.75	97.84	50.32

با فرض قانون تعادل فاز رائولت ، مقادير كسر مولي و مقدار مايع و بخار بدست آوريد

حل

داده هاي مساله :

$$z_1 = 0.45 \quad ، \quad z_2 = 0.35 \quad ، \quad z_3 = 0.2$$

$$F = 100 \left({}^{kmol}/_{h} \right) \quad ، \quad T = 80\ (c) \quad ، \quad P_t = 110\ (kPa)$$

	1: Acetone	2: Acetonitrile	3:Nitromethane
P (kPa)	195.75	97.84	50.32

$$x_i = ? \qquad ، \qquad y_i = ? \qquad ، \qquad V = ? \qquad L = ?$$

محاسبات تبخیر ناگهانی یا Flash (دستی)

- **تکرار اول**

با توجه به الگوريتم محاسبات و همچنين داده هاي مساله ثابت تعادل ترموديناميكي اجزاء برابر :

	1: Acetone	2: Acetonitrile	3:Nitromethane
k_i	1.7795	0.8895	0.4575

بنابراين با فرض اوليه 50% بخار يا به عبارتي حدس اوليه υ=0.5 كسر مولي اجزاء در هر دو فاز برابر :

$$y_i = \frac{k_i \times z_i}{1+[(k_i-1)\times v]}$$

$$y_1 = \frac{1.7795 \times 0.45}{1 + [(1.7795 - 1) \times 0.5]} = 0.5762$$

$$y_2 = 0.3295$$

$$y_3 = 0.1256$$

همچنين كسر مولي فاز مايع برابر

$$x_1 = 0.3238$$

$$x_2 = 0.3705$$

$$x_3 = 0.2744$$

بنا بر اين با مقادير بدست آمده براي بررسي صحت نتايج با استفاده از تابع ارائه شده داريم :

$$f = \sum y_i - \sum x_i = \sum \frac{z_i \times (k_i - 1)}{1 + [(k_i - 1) \times v]} = 0$$

$$f = \sum 1.0313 - \sum 0.9687 = 0.0626$$

$$f = \frac{0.45 \times (1.7795 - 1)}{1 + [(1.7795 - 1) \times 0.5]} + \frac{0.35 \times (0.8895 - 1)}{1 + [(0.8895 - 1) \times 0.5]} + \frac{0.2 \times (0.4575 - 1)}{1 + [(0.4575 - 1) \times 0.5]} = 0.0626$$

نظر به اینکه مقدار بدست آمده به اندازه کافي به صفر نزديك نيست بنا بر اين براي تكرار دوم نياز به حدس جديد است. با توجه به اينكه تاكييد شده است از روش نيوتن رافسون براي حدس جديد استفاده شود لذا بايد از رابطه زير استفاده كرد

$$v_{new} = v - \left(\frac{f}{f'}\right)$$

بنا بر این باید ابتدا مقدار f' را بدست آورده و سپس حدس جدید v را از رابطه فوق محاسبه و در روابط استفاده کرد

لذا :

$$f' = -\sum \frac{z_i \times (k_i - 1)^2}{1 + [(k_i - 1) \times v]^2}$$

$$f = -\left[\frac{0.45 \times (1.7795 - 1)^2}{1 + [(1.7795 - 1) \times 0.5]^2} + \frac{0.35 \times (0.8895 - 1)^2}{1 + [(0.8895 - 1) \times 0.5]^2} + \frac{0.2 \times (0.4575 - 1)^2}{1 + [(0.4575 - 1) \times 0.5]^2}\right] = -0.2965$$

$$v_{new} = 0.5 - \left(\frac{0.0626}{-0.2965}\right) = 0.7111$$

- **تکرار دوم**

حدس اولیه

بنابراين با فرض اوليه 71.11% بخار يا به عبارتي حدس اوليه υ=0.71 كسر مولي اجزاء در هر دو فاز برابر :

$$y_1 = 0.5152$$

$$y_2 = 0.3379$$

$$y_3 = 0.1490$$

همچنين كسر مولي فاز مايع برابر

$$x_1 = 0.2895$$

$$x_2 = 0.3798$$

$$x_3 = 0.3256$$

بنا بر اين با مقادير بدست آمده براي بررسي صحت نتايج با استفاده از تابع ارائه شده داريم :

$$f = \frac{0.45(1.7795-1)}{1+[(1.7795-1)0.71]} + \frac{0.35(0.8895-1)}{1+[(0.8895-1)0.71]} + \frac{0.2(0.4575-1)}{1+[(0.4575-1)0.71]} = 0.007$$

به نظر مي آيد مقدار بدست آمده به اندازه كافي به صفر نزديك مي باشد و مقدار υ مناسب است و مساله حل شده است

در نتيجه داريم

F=100

$$V = v \times F = 0.7111 \times 100 = 71.11 \left(kmol/h\right)$$

$$L = F - V = 100 - 71.11 = 28.89 \left(kmol/h\right)$$

$$y_1 = 0.5152$$

$$y_2 = 0.3379$$

$$y_3 = 0.1490$$

همچنين كسر مولي فاز مايع برابر

$$x_1 = 0.2895$$

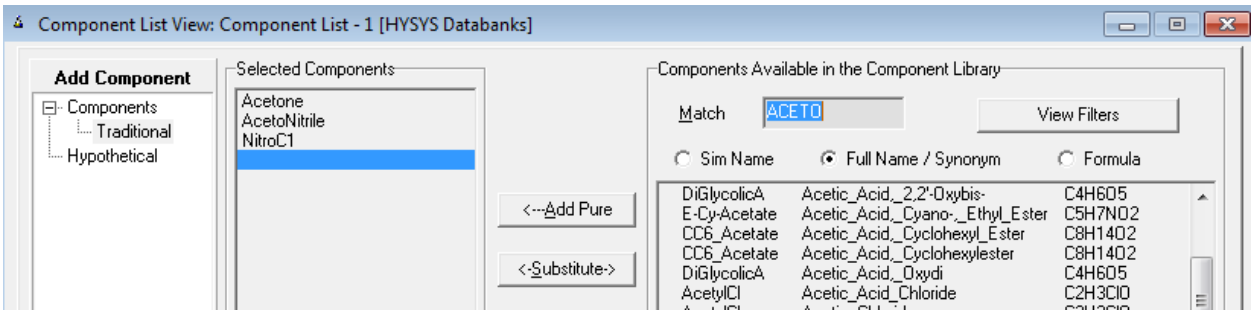
$$x_2 = 0.3798$$

$$x_3 = 0.3256$$

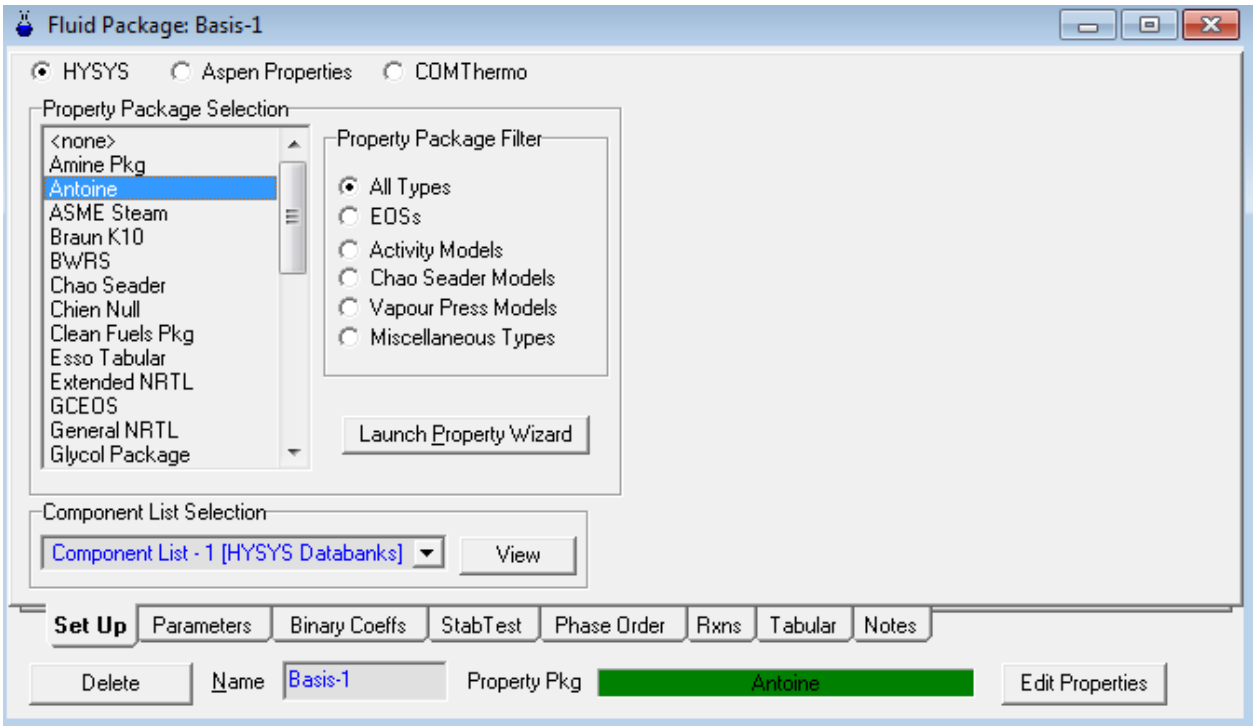
جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 2)

محاسبات تبخیر ناگهانی یا Flash(با نرم افزارAspenHYSYS)

انتخاب اجزاء مواد

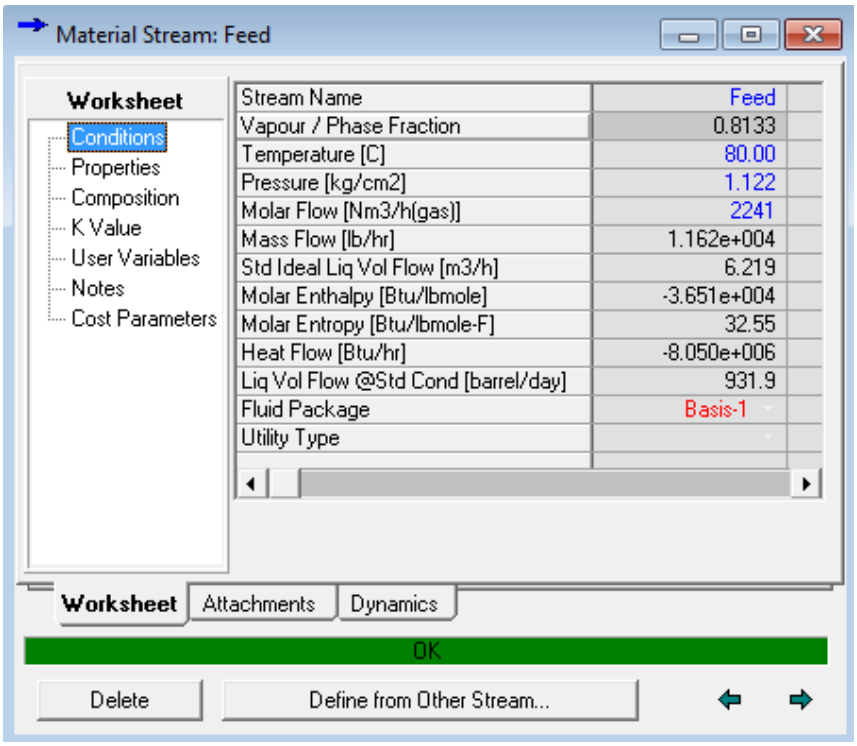


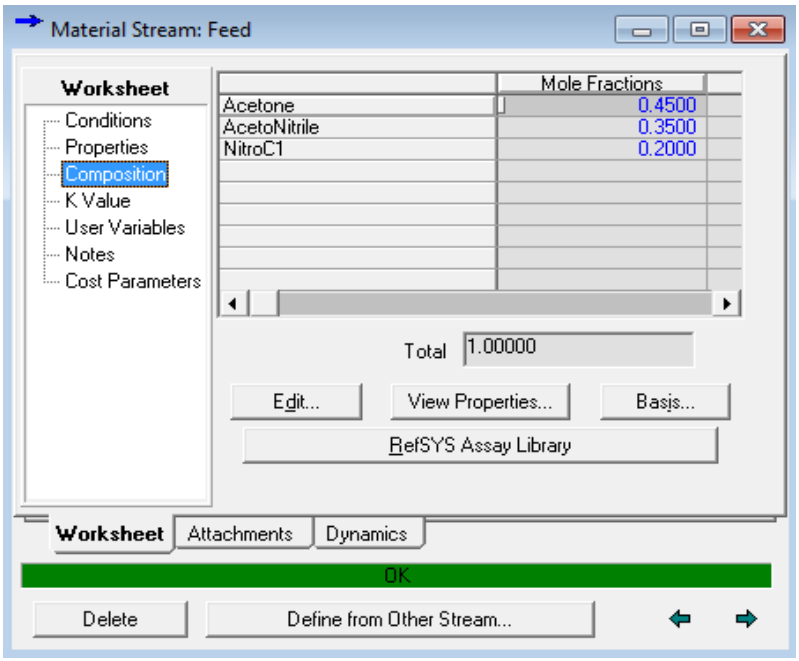
انتخاب مدل ترمودینامیکی



جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 2)

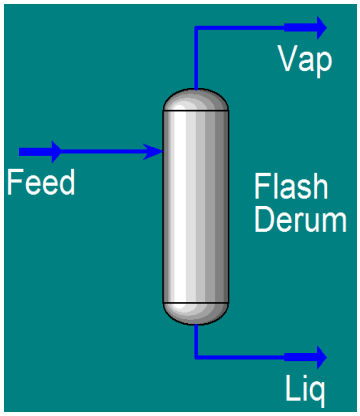
ایجاد جریان (و تکمیل داده های ورودی)





جزوه آموزش نرم افزار AspenHYSYS (شماره 2)

سپس انتخاب جدا کننده و شبیه شازی

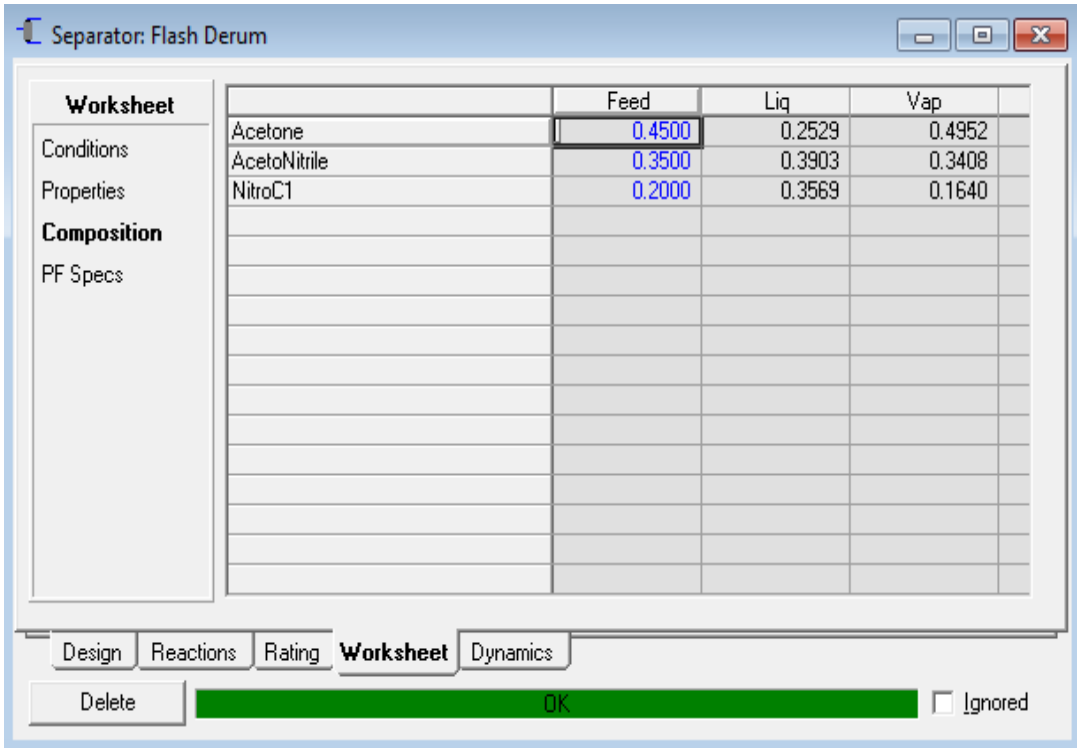


بررسی نتایج

Separator: Flash Derum

Worksheet
Conditions
Properties
Composition
PF Specs

Name	Feed	Liq	Vap
Vapour	0.8133	0.0000	1.0000
Temperature [C]	80.00	80.00	80.00
Pressure [kg/cm2]	1.122	1.122	1.122
Molar Flow [kgmole/h]	100.0	18.67	81.33
Mass Flow [kg/h]	5271	979.8	4292
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	6.219	1.087	5.132
Molar Enthalpy [Btu/lbmole]	-3.651e+004	-3.313e+004	-3.729e+004
Molar Entropy [Btu/lbmole-F]	32.55	14.56	36.68
Heat Flow [Btu/hr]	-8.050e+006	-1.363e+006	-6.687e+006



بنابراین پس از همگرایی محاسبات کسر مولي اجزاء در هر دو فاز برابر :

$$y_1 = 0.495$$

$$y_2 = 0.381$$

$$y_3 = 0.164$$

همچنین کسر مولي فاز مایع برابر

$$x_1 = 0.253$$

$$x_2 = 0.390$$

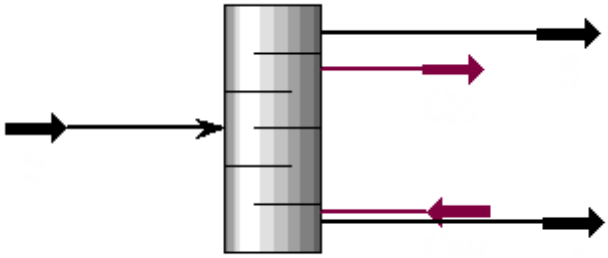
$$x_3 = 0.357$$

طراحي فر آيندي

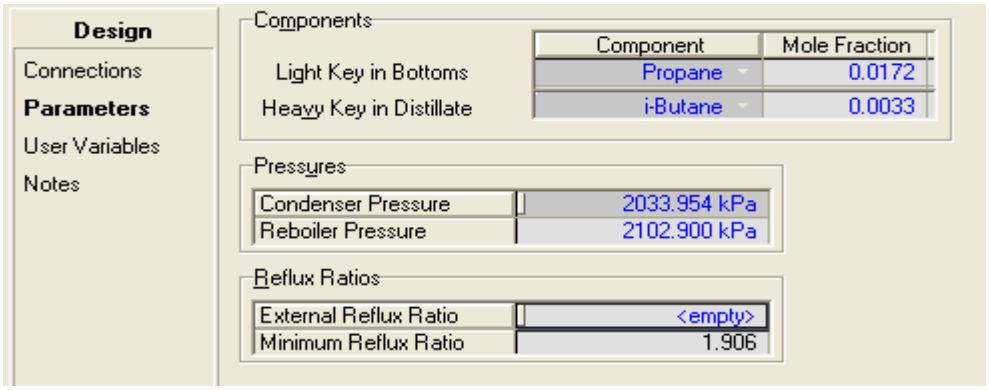
طراحي فرآيندي برج تقطير به مفهوم تعيين : جداسازي ، تنظيمات[1] فشار برج ، نسبت جريان برگشتي ، تعدادمراحل مورد نياز و نقطه خوراک است .

طراحی فرآیندی برج تقطیر(با نرم افزارAspenHYSYS)

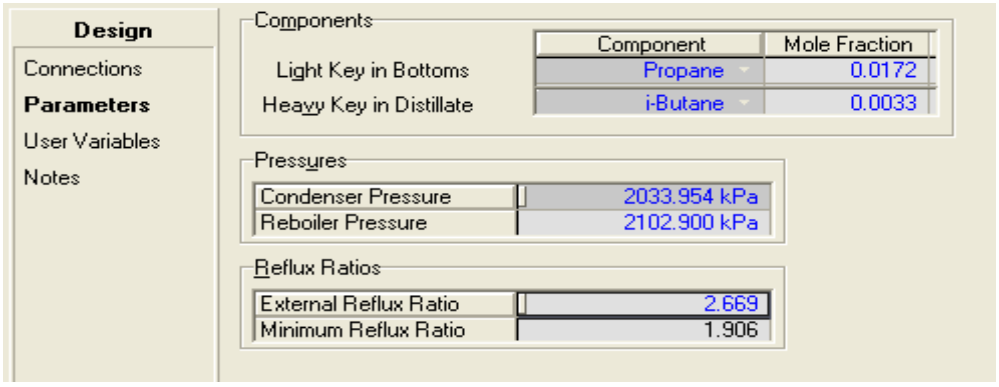
پس از باز كردن نرم افزار با انتخاب مواد مورد نظر و تعيين مدل ترموديناميكي بر مبناي روش $(\Phi - \Phi)$ يا روش اكتيويته در برگه fluid pkgs مدل ترموديناميكی را انتخاب و وارد محيط شبيه سازي مي شويم. براي طراحي فرآيندی به روش shortcut برج تقطير از Palette برج ShortCutDistillation (و يا در پنجره Unit operation كه با زدن F12 يا انتخاب گزينه آن در منوي Flow sheet مي توان پنجره را باز كرد با روشن كردن كليد راديويي ShortColumns) برج تقطير را به محيط شبيه سازي وارد مي كنيم. حداقل جريان هاي جرمي وانرژي مورد نياز برج را متصل و مشخصات خوراک ورودي را وارد مي كنيم.



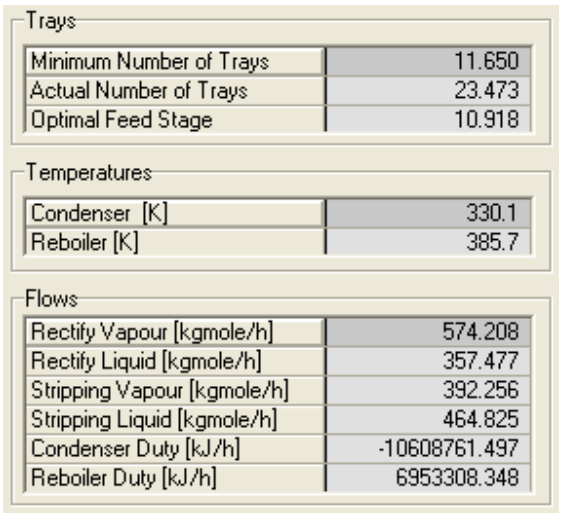
با در نظر گرفتن برج مورد نظر در محيط شبيه سازي ، پس از كليد كردن روي برج و باز شدن پنجره آن ، در برگه Design ، صفحه Connection ضمن تعيين و يا تائيد نام برج و جريان ها ، لازم است در گروه Top Product Phase كليد راديويي Liquid (به معني وجود كندانسور كامل) انتخاب كنيم. اگرچه پيش فرض نرم افزار نيز همين گزينه است. برای طراحي برج بايد علاوه بر دادههاي جريان ورودي ، در مرحله اول نام اجزاء كليدي ، جزء مولي اجزاء كليدي در محصول (جزء كليدي سبک LK در محصول پس ماند و جزء كليدي سنگين HK در محصول مقطر) و فشارهاي سرد كننده وجوش آور را در صفحه Parameters تعيين كنيم تا نرم افزار حداقل نسبت جريان برگشتي را محاسبه كند و در قسمت Minimum Reflux Ratio از گروه Reflux Ratios در صفحه مذكور ارائه دهد.



در مرحله دوم يعني پس از مشخص شدن حداقل نسبت جريان برگشتي ، مقدار آن را با يک ضريب مناسب به عنوان نسبت جريان برگشتي فرآيندي در قسمت External Reflux Ratio در همان گروه وارد مي كنيم.



با اين كار طراحي برج انجام شده و نتايج را در پنجره برج ، برگه Performance مي توان مشاهده كرد.

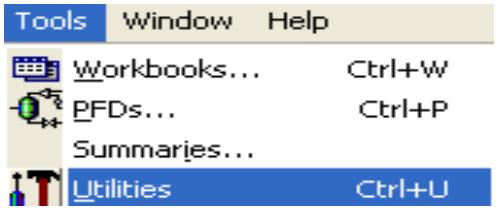


طراحي هيدروليكي

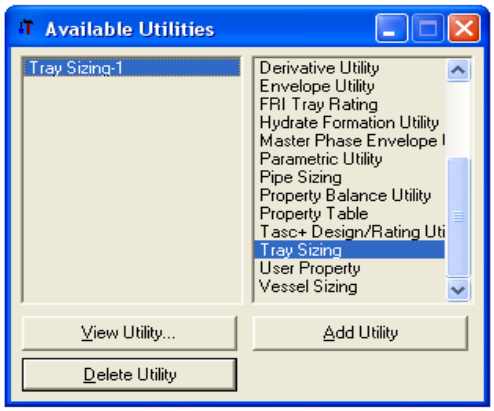
ساختار دروني برج بايد جهت پشتيباني و نگهداري بارهاي هيدروليكي در طي عمليات و فشارهاي تحميلي در حين ساخت ، تعمير و نگهداري طراحي شده باشد. لذا با محاسبه اين بار ها و در نظر گرفتن محدوديت هاي عملياتي و معيار هاي طراحي ، از روابط موجود ، قطر ، تركيب و ارتفاع مناسب براي فرآيند مورد نظر طراحي مي شود

طراحی هیدرولیکی برج تقطیر (با نرم افزارAspenHYSYS)

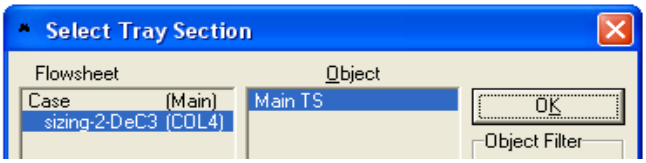
ابتدا برج مورد نظر با يد شبيه سازي شده باشد. دادههاي ورودي لازم براي شبيه سازي در ابتداي محاسبات همين فصل ارائه شده اند. لازم به ذكر است كه شبيه سازي در اين حالت با پيش فرض هاي نرم افزار براي قطر و فاصله بين سيني ها انجام مي گيرد و بعد از سايزينگ سيني در اين مرحله مي توان محاسبات برج را بر مبناي مقادير بدست آمده انجام داد. طراحي هيدروليكي برج و سايزينگ سيني را با ابزار Utilities/Tray sizing انجام مي دهيم. به اين منظور از منوي Tools گزينه Utilities را انتخاب مي كنيم.



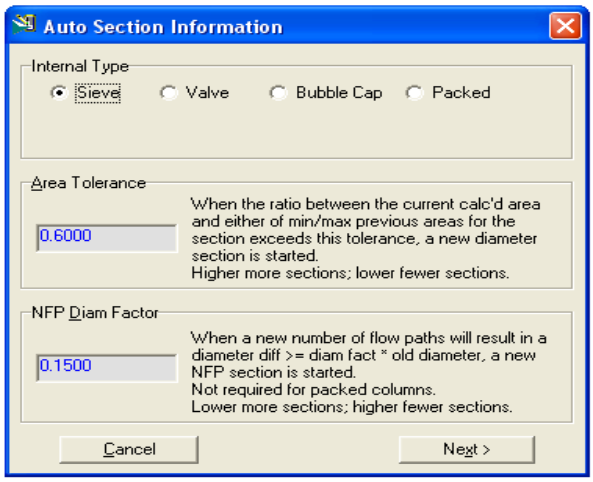
سپس كليد Add Utility را بزنيد تا Tray sizing – 1 به منوي سمت چپ اضافه و پنجره مربوط به آن باز شود.



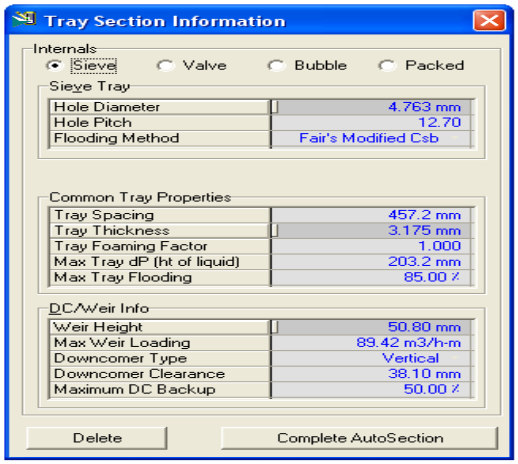
در پنجره Tray sizing – 1 كليد Select TS را زده و در پنجره باز شده مطابق شكل ، Main TS را انتخاب مي كنيم.



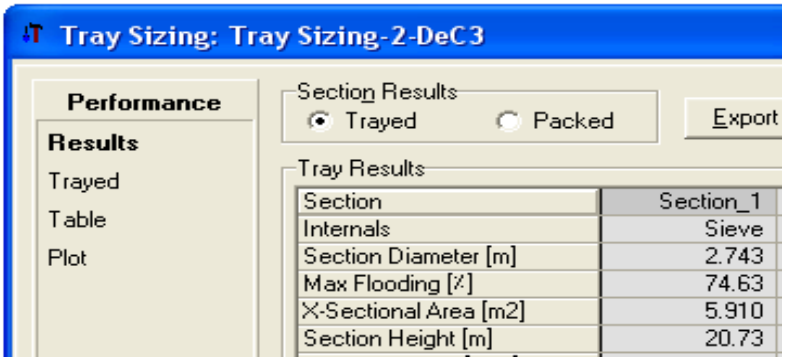
كليد OK را مي زنيم. در پنجره Tray sizing مي توان روي Auto Section كليك كرد تا طراحي به طور اتوماتيك و با پيش فرض هاي نرم افزار انجام شود. در اين صورت صفحه ديگري باز مي شود كه نوع سيني ها را بايد در آن تعيين كرد.



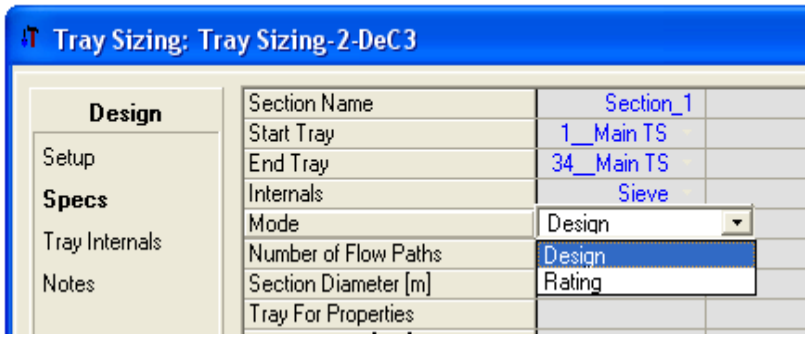
پس از انتخاب كليد Next را مي زنيم و در صفحه بعدي كه باز مي شود با زدن كليد Complete Atuo Section پنجره اتوماتيك بسته شده و محاسبات طراحي هيدروليكي انجام مي شود و به صفحه Setup در برگه Design برمي گرديم.



در برگه Performance صفحه Results مي توان نتايج را مشاهده كرد.



البته مي توان به جاي طراحي اتوماتيك نرم افزار در برگه Design با زدن كليد Add Section تعداد Section مطلوب را وارد كردو با تغيير پيش فرض هاي نرم افزار ، محاسبات سايزينگ سيني را بر اين اساس توسط نرم افزار انجام داد. لازم به ذكر است اين محاسبات در حالت Design انجام مي شود. به عبارت ديگر در اين حالت قطر برج و ديگر مشخصات برج را نرم افزار تعيين مي كند.



تهیه گزارش از کار شبیه سازی

در HYSYS عمل پرینت به سه صورت زیر انجام می شود:

۱. با استفاده از منوی File و انتخاب گزینه Print

۲. کلیک راست بر روی نوار عنوان پنجره های مشخصات و انتخاب گزینه Print Data Sheet

۳. با استفاده از منوی Tools و انتخاب گزینه Report Manager

در HYSYS تهیه پرینت از PDF به دو صورت زیر انجام می شود:

۱. با استفاده از منوی File و انتخاب گزینه Print

۲. کلیک راست بر روی فضای خالی PDF و انتخاب گزینه Print PDF

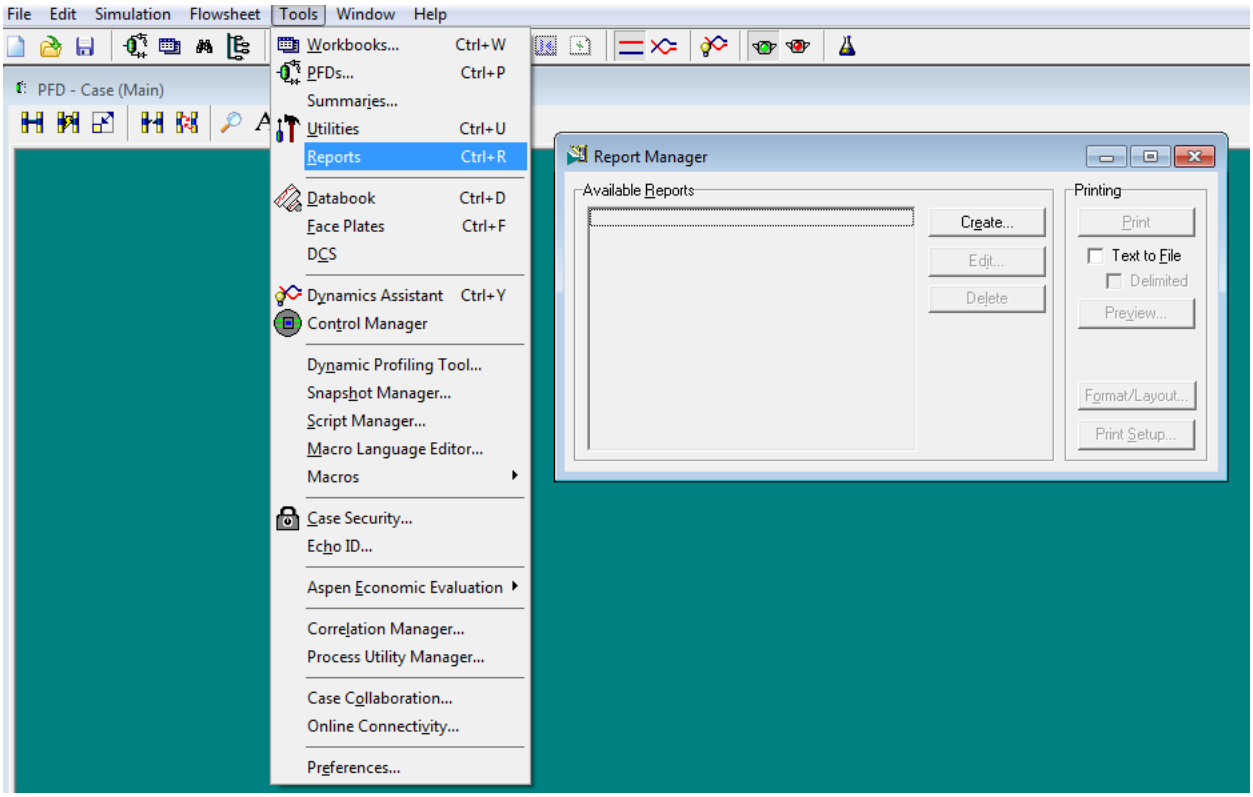
در HYSYS تهیه پرینت از نمودارها به صورت زیر انجام می شود:

۱. کلیک راست بر روی نمودار و انتخاب گزینه Print Plot

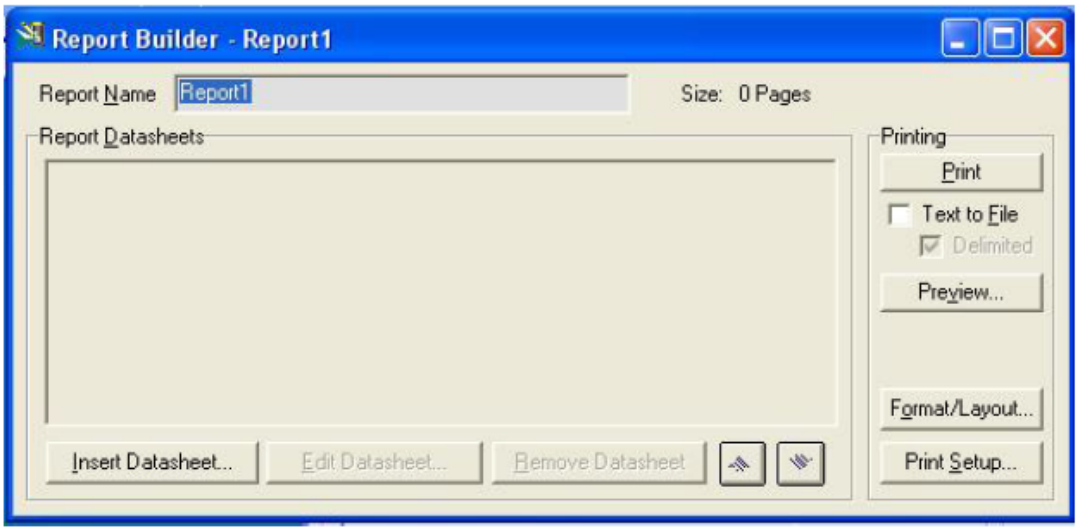
در تمامی موارد بالا با انتخاب گزینه Print Setup می توان در پنجره مربوطه کلیه مشخصه های پرینت و پرینتر را تنظیم کرد.

تهیه گزارش

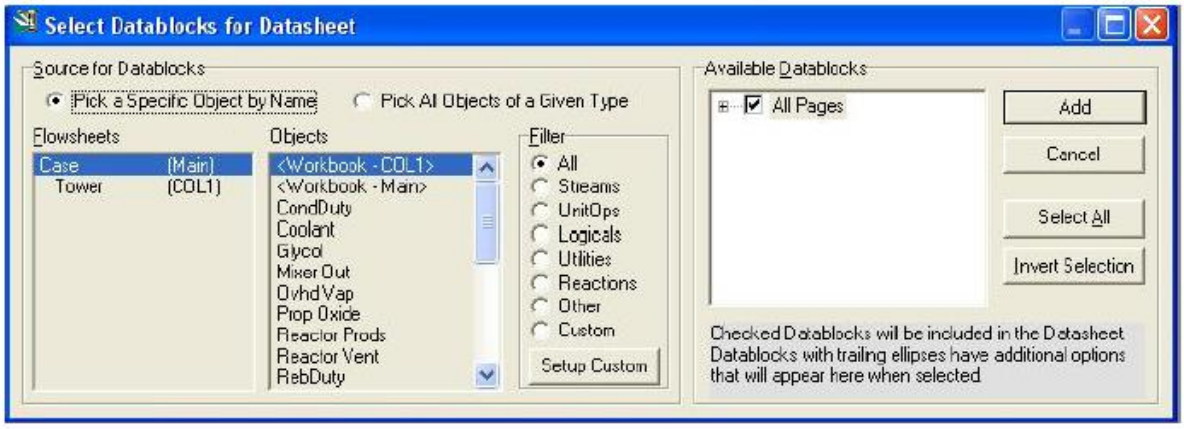
با استفاده از قابلیت تهیه گزارش در HYSYS می توان اجزاء مختلف شبیه سازی را انتخاب کرده و گزارش مورد نظر را تهیه کرد. بدین منظور باید از منوی Tools ، گزینه Report را انتخاب کرد. با این کار وارد پنجره Report Manager می شویم.



در قسمت Available Report کلیه گزارش هایی که قبلاً تهیه شده اند لیست می شوند. برای ایجاد یک گزارش با زدن دکمه Create در پنجره Report Manager وارد پنجره Report Builder می شویم.



در این پنجره جهت تهیه گزارش برای انتخاب لایه ها و آیتم های مختلف از طریـق فشـردن کلیـد Insert Datasheet وارد پنجره Select Datablocks for Datasheet می شویم:



برای اضافه کردن هر آیتم به فهرست Report باید دوباره به پنجره Report Builder برگشـته و عملیـات قبلی را تکرار کرد.

اگر بخواهیم به جای آرم Hyprotech آرم شرکت مورد نظر ما در گزارش چاپ شود ، باید از طریـق آدرس زیر اقدام کرد :

Tools \ Preferences \ Reports \ Company info

تجهیزات انتقال حرارت

در نرم افزار HYSYS تجهیزات انتقال حرارت به دو دسته زیر تقسیم می شوند:

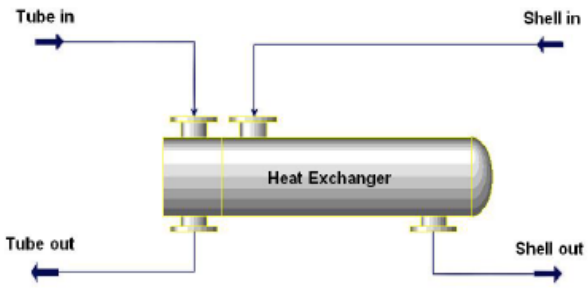
۱. دسته اول شامل Heater و Cooler می شوند که هدف در آن برآورد میزان انرژی لازم برای تغییر دمای جریان های مهم فرآیندی است و ساختار مبدل مورد بحث قرار نمی گیرد.

۲. دسته دوم شامل مبدل های فرآیندی ، مبدل های هوایی و کوره ها می شوند که برای شبیه سازی های دقیق تر مورد استفاده واقع می شوند.

۱. Heater / Cooler

در Heater جریان ورودی به واحد تا حد معینی گرم شده و سپس از واحد خارج می گردد و در Cooler عکس این عمل اتفاق می افتد. تفاوت انرژی بین دو جریان ورودی و خروجی توسط یک جریان مستقل انرژی تأمین می گردد. تنها پارامتر های مورد نیاز برای این واحد ها افت فشار سیستم و شار حرارتی می باشد. استفاده از علامت منفی برای شار حرارتی Heater باعث می شود که عملکرد آن مشابه Cooler شود.

۲. مبدل حرارتی (Heat Exchanger)



مبدل های حرارتی دارای دو جریان فرآیندی سرد و گرم می باشند که در اثر تبادل حرارت بین دو فاز جریان گرم و جریان سرد ، آنتالپی سیال گرم کاهش و در مقابل آنتالپی جریان سرد افزایش می یابد. موازنه انرژی برای مبدل های حرارتی به صورت زیر می باشد :

$$BE = \left[M_{Cold}\left(H_{Out} - H_{In}\right)_{Cold} - Q_{Leak}\right] - \left[M_{Hot}\left(H_{Out} - H_{In}\right)_{Hot} - Q_{Loss}\right]$$

که معمولاً در مبدل ها BE (Balance Error) برابر صفر در نظر گرفته می شود.

Q_{loss}: انرژی هدر رفته در سیستم گرم که منجر به کاهش دما می شود.

Q_{leak}: انرژی هدر رفته در سیستم سرد که منجر به افزایش دما می شود.

شار حرارتی مبدل نیز به شکل مقابل محاسبه می شود: $Q = UA\Delta T_{LM} F_t$

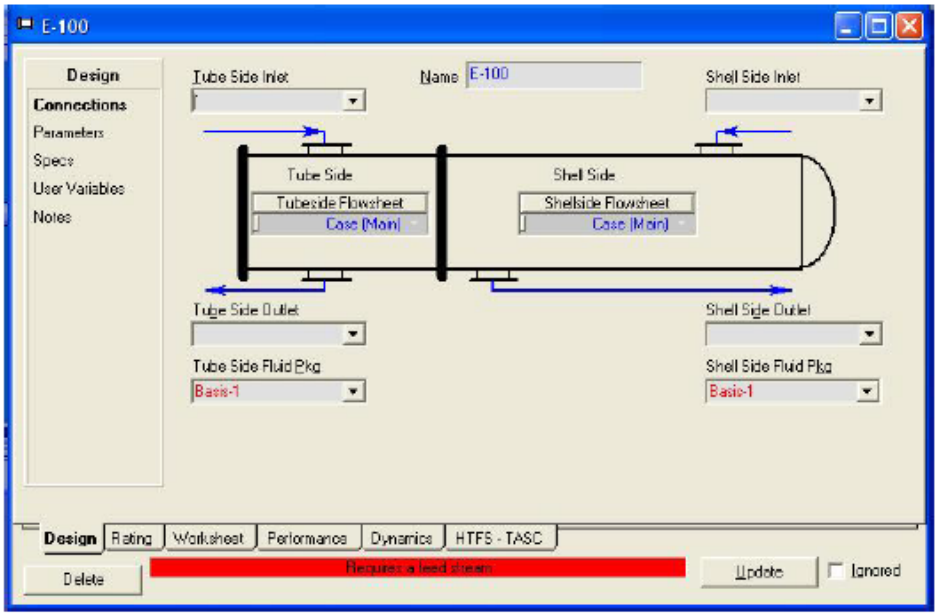
U: ضریب انتقال حرارت کلی

A: سطح متوسط کل برای انتقال حرارت

ΔT_{LM}: میانگین لگاریتمی اختلاف دما

F_t: ضریب اصلاح LMTD که به هندسه مبدل بستگی دارد.

اتصال جریان های ورودی و خروجی و تعیین نوع معادله ترمودینامیکی مناسب برای سیال سمت پوسته و لوله در صفحه Connections معین می شوند و تعیین افت فشار سمت لوله و پوسته و انتخاب روش انجام محاسبات ، در صفحه Parameters مشخص می گردد.



روش های انجام محاسبات در مبدل های حرارتی

در HYSYS محاسبات مبدل ها کلاً به دو صورت Design و Rating صورت می پذیرد. در حالت Design با معلوم بودن اطلاعات ورودی و خروجی مبدل سطح انتقال حرارت محاسبه می شود. ولی در حالت Rating خروجی های مبدلی را که اطلاعات طراحی آن موجود است ، با توجه به تغییرات در

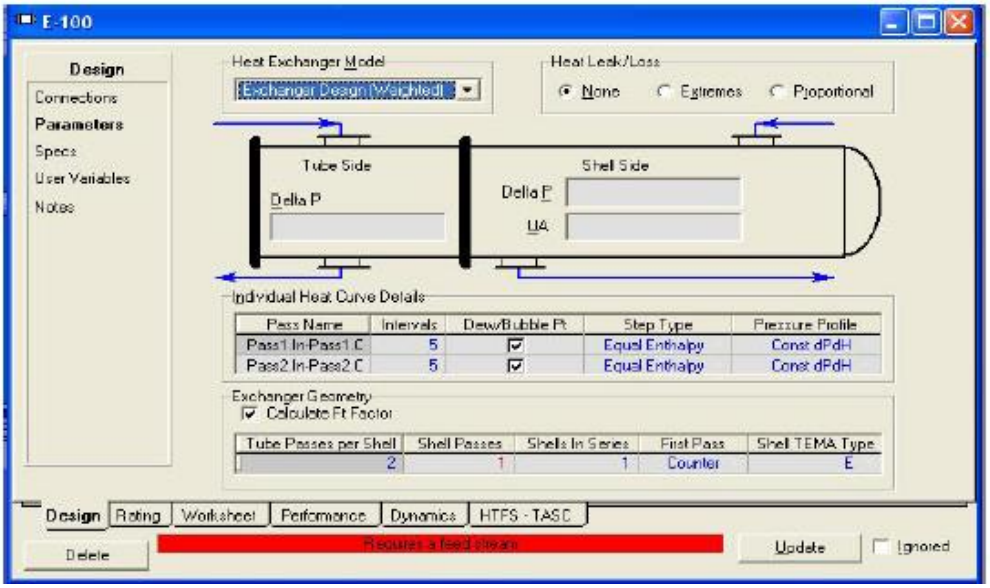
مشخصات جریان های ورودی و/یا جریان های خروجی و تغییر مشخصات هندسه مبدل بررسی می کنیم.

یادآوری

- **Design** : به طراحی یک مبدل حرارتی جدید که شامل طراحی مکانیکی و طراحی حرارتی می شود Design اطلاق می شود.
- **Rating** : به بررسی اینکه یک مبدل از پیش ساخته شده برای یک کاربرد جدید مناسب است یا نه Rating اطلاق می شود.
- **Simulation** : به محاسبه نتایج خروجی جریان ها از روی اطلاعات جریان ورودی و سطح انتقال حرارت معلوم Simulation اطلاق می شود.

۱. روش Exchanger Design-Weighted

این مدل یک مدل بسیار خوب برای مسائل با منحنی حرارتی غیر خطی نظیر مسائلی با تغییر فاز در قسمت پوسته یا لوله یا هر دو می باشد. در این روش منحنی حرارتی مبدل به تعدادی بازه (interval) شکسته می شود و در هر بازه ضرایب LMTD و UA برای همان بازه محاسبه شده و استفاده می شود و برای محاسبه UA کل مبدل ، UA در تمامی این بازه ها جمع می شوند.



در این روش با افزایش تعداد بازه ها دقت انجام محاسبات بالاتر می رود. این روش فقط برای مبدل های ناهمسو و متقابل استفاده می گردد و بیشتر در مبدل های حرارتی دارای تغییر فاز مورد استفاده قرار می گیرد. از معایب این مدل اینست که اثر شکل هندسی مبدل روی محاسبه ضریب تصحیح F_t در نظر گرفته نشده است. در این مدل امکان تعریف ضریب تصحیح F_t و اتلاف حرارتی به صورت تجربی موجود می باشد.

۲. حالت Exchanger Design-End Point

در این حالت برای مبدل فقط یک LMTD و یک UA با توجه به شرایط ورودی ها و خروجی های مبدل محاسبه می شوند. از این روش برای حل مسائل ساده که مدل منحنی حرارتی آن برای هر دو قسمت پوسته و لوله خطی فرض می شود و تغییر فازی وجود ندارد و می توان مقدار CP را نسبتاً ثابت فرض کرد استفاده می گردد.

۳. حالت Steady State Rating

این حالت دقیقاً مشابه حالت End Point است با این تفاوت که در این حالت پارامتر UA با در نظر گرفتن ساختار دقیق مبدل که در قسمت Sizing وارد شده است ، محاسبه می گردد. از این روش برای حل مسائل ساده که مدل منحنی حرارتی مبدل خطی یا نزدیک به خط باشد استفاده می گردد.

۴. حالت Dynamic Rating

از این حالت در شبیه سازی دینامیکی مبدل ها استفاده می شود.

پمپ ها

برای انتقال سیالات غیر تراکم پذیر و افزایش فشار آنها بکار برده می شوند. با فرض معلوم بودن دو پارامتر از پارامترهای زیر HYSYS بقیه مجهول ها را محاسبه می کند.

- فشار خروجی یا افت فشار
- راندمان پمپ
- انرژی پمپ

راندمان پمپ $= Power_{real} / Power_{actual}$

$$Power_{actual} = Heat\ Flow_{Out} - Heat\ Flow_{in}$$

با انتخاب یا انتخاب نکردن گزینه on پمپ فعال یا غیر فعال خواهد شد. اگر این گزینه غیر فعال باشد جریان ورودی عیناً از خروجی پمپ خارج خواهد شد و اگر در این حالت برای دو جریان ورودی و خروجی دو فشار مختلف وارد کرده باشیم نرم افزار پیغام خطا خواهد داد.

از مهمترین نمودارهای پمپ ها ، نمودار Performance یک پمپ است. در این منحنی هد پمپ بر حسب دبی در سرعت پروانه های مختلف پمپ رسم شده است. اغلب همراه با منحنی Performance منحنی بازده وجود دارد که کاربر را در انتخاب بهترین پمپ برای آن محدوده دبی و هد ، هدایت می کند. در HYSYS برای تعیین منحنی مشخصه پمپ از گزینه Curve استفاده می شود. با فعال بودن گزینه Activate Curves ، HYSYS افزایش فشار را برای شدت جریان داده شده محاسبه می کند. برای تعیین منحنی مشخصه پمپ می بایست ضرایب معادله درجه چهارمی را که معمولاً برای هر پمپی

ارائه می شود وارد کرد. در این حالت برای جلوگیری از بروز خطا ، افت فشار یا فشار جریان خروجی پمپ را نباید داده باشیم.

کمپرسور

برای افزایش فشار جریان تراکم پذیر استفاده می شود و در آن کار محوری به انرژی درونی گاز تبدیل میشود.

انبساط دهنده Expander

برای کاهش فشار جریان تراکم پذیر استفاده می شود و در آن انرژی درونی گاز به کار محوری تبدیل میشود.

در HYSYS دو نوع کمپرسور مورد استفاده از نظر Centrifugal یا Reciprocating (رفت و برگشتی) بودن باید انتخاب شود. از دو بازدهی آدیاباتیک و پلی تروپیک تنها یکی باید وارد شود. HYSYS دیگری را خود محاسبه می کند.

بازدهی پلی تروپیک برابر است با :

$$\eta_p = \frac{\left(\frac{K-1}{K}\right)}{\left(\frac{n-1}{n}\right)} \quad , \quad K = \frac{C_P}{C_V}$$

که در آن n ضریب پلی تروپیک است. و بازده آدیاباتیک برابر خواهد بود با :

$$\eta_S = \frac{h_{out}^S - h_{in}}{h_{out} - h_{in}}$$

که در آن h_{out}^S آنتالپی مولی جریان خروجی با فرض فشردگی آیزنتروپیک است.

در صورت عدم استفاده از منحنی مشخصه جهت حل کمپرسور ، چهار مورد از ۵ مورد زیرباید وارد شوند.

- دمای ورودی
- فشار ورودی
- دمای خروجی
- فشار خروجی
- بازده

هنگامی که برای سرعت های مختلف گردش کمپرسور ، منحنی های متفاوتی را ارائه می دهیم ، سرعت نیز به عنوان یک متغیر وابسته در مسئله ما وارد می شود. با تعیین سرعت متناظر هر منحنی ، HYSYS متناسب با سرعت داده شده منحنی مناسب را درون یابی کرده و مسئله را حل می کند.

در صورت استفاده از منحنی علاوه بر ترکیب و دمای جریان ورودی حداقل یکی از اطلاعات زیر باید معین شوند:

- فشار و دبی ورودی
- فشار ورودی و خروجی
- فشار ورودی و شدت جریان انرژی
- فشار ورودی و بازده