در شبیه سازی کامپیوتری، رفتار یک فرآیند با استفاده از روابط پایه مهندسی مانند موازنه انرژی و مواد، تعادل فازها و تعادل شیمیایی پیش بینی می گردد. به عبارت دیگر، با استفاده از داده های ترمودینامیکی معتبر، شرایط عملیاتی واقعی و تجهیزات فرآیندی مطلوب، می توان رفتار واقعی یک کارخانه را شبیه سازی نمود. در اینجا بخش گرم واحد اولفین بندر امام خمینی توسط نرم افزار HYSYS v3.2 شبیه سازی شده است. برای ارزیابی اقتصادی پنج واحد عملیاتی انتخاب شد و داده های مطلوب استخراج گردید.