1- مقدمه

اصطلاح سنتز و طراحی حلال شامل شناسایی و انتخاب فرمولاسیون ترکیبات یا مخلوط است که توانایی انجام دادن نیازهای فرآیندی را دارا باشند. از این رو خاصیت های ترکیبات یا مخلوط مشخص می کند که آیا طراحی مفید است یا نه، اساس حل روش در این زمینه خواص ترکیبات می باشد. در حقیقت برای تکنیک طراحی ملکولی، طراحی ملکول توسط کامپیوتر (CAMD)، خواص هدف مطلوب، ورودی های الگوریتم هستند. نیازمندی ها برای فرمولاسیون معمولا توسط نیازهای فرآیندی مشخص می شود. بنابراین نیازمندی های مطلوب در حالت عملیات فرآیندی مطلوب بدست می آیند. اگرچه رابطه کلی بین طراحی فرآیند و حلال شناخته شده است اما معمولا این دو طراحی را جدا از هم درنظر می گیرند. به طور کلی هدف در طراحی بهینه فرآیند، پیدا کردن تعادل بین نیاز های یک واحد و استفاده مناسب از مواد خام به نحوی که حداکثر سود و حداقل سرمایه را دارا باشیم. مواد خام از یک لیست از پیش تهیه شده انتخاب می شوند، بنابراین محدودیت عملیات لیست ارئه شده ترکیبات است.

هنگامیکه ما با استفاده از روش های رایج طراحی ملکولی و فرآیند را به همدیگر متصل می کنیم در اکثر موارد در انتخاب مدل پیشبینی خواص با مشکل مواجه می شویم. معمولا مدل مناسب برای طراحی ملکول برای طراحی فرآیند قابل استفاده نیست و برعکس[1]. به علاوه مدل های انتخابی فرآیندی نیازمند دردسترس بودن بعضی پارامتر های ملکولی است. تکنیک های برنامه های ریاضیاتی در هنگام تعویض نوع مدل پیشبینی واگرا می شوند. استفاده از چند مدل پیشبینی برای یک خاصیت و ورود آن به الگوریتم رسیدن به همگرایی را مشکل می سازد. ازاینرو پیدا کردن مدل مناسب برای الگوریتم می تواند کلید حل

بسیاری از این مشکلات باشد. به تازگی همکاری هایی برای فهمیدن ضوابط مدل های خواص برای حل مسائل مهندسی فرآیند با کمک کامپیوتر (Computer Aided Process Engineering (CAPE)) در مورد بهبود فرمولاسیون مسائل معکوس (reverse problem formulation (RPF)) آورده شده است [2].
به طور کلی مدل های فرآیندی از معادلات موازنه، معادلات محدودیت و معادلات بنیادی بدست می آیند. ساختار معادلات برای نمایش مدل های خواص در شرایط متغیری خاصی(دما، فشار و ترکیب درصد) استفاده می شوند. مدل های خواص پیچیده نشان دهنده غیرخطی بودن رفتار مدل فرآیندی است که منتج به افزایش محاسبات و مشکل همگرایی می شود. روش های RPF معادله بنیادی را به معادله موازنه و معادله تجزیه می کند و منجر به حل مسئله به روش سنتی به صورت دو مسئله مجزا برگشت پذیر می شود. این تکنیک مشابه روش مسئله طراحی ملکولی است که به صورت یک مسئله پیشبینی خواص معکوس است. از اینرو مسئله اول حل معادلات موازنه و محدودیت ها در شرایط خواص بنیادی معادله است که هدف طراحی را مشخص می کند. مسئله معکوس دوم (معکوس پیش بینی خواص) معادلات بنیادی را به عملیات واحد تعریف می کند مانند شرایط عملیاتی یا محصولات که مقدار خواص هدف را دارا می باشند که با مسئله معکوس ابتدایی بیان می شوند. مزیت اصلی این روش خارج کردن معادلات بنیادی است که اجازه می دهد معادلات موازنه و محدودیت به سادگی حل شوند که این معادلات معمولا خطی هستند. حال الگوریتم بدست آمده آزاد است که هر مدل خواص را در هر نقطه از مراحل حل استفاده کند تا خواص هدف بدست آیند. سابقا پس از حل معادلات بنیادی متغییر های شدتی مشخص می شد. بنابراین RPF پیچیدگی کمتری دارد بدون اینکه از میزان دقت آن کاسته شود. استفاده از RPF در طراحی اولین مرحله بسوی بهبود یک روش شبیه سازی برای حل مسائل طراحی ملکولی و فرآیندی است. اما هنوز سوال

چگونگی ارتباط این دو مسئله وجود دارد. اینجا نیاز به روشی است که بتواند جریان اطلاعات را از سطح فرآیندی به سطح ملکولی انتقال دهد و برعکس.

عملکرد واحد فرآیندی بوسیله خواصی مانند دمای جوش، گرمای تبخیر و... است. علاوه براین خاصیت ها ورودی های مورد نیاز برای حل الگوریتم طراحی ملکولی هستند. بنابراین می توان فهمید استفاده از یک چارچوب براساس خاصیت همانند یک پل ارتباطی بین روش های فرآیند و طراحی ملکولی عمل می کند. معرفی چهارچوب خوشه خواص اجازه می دهد جریان های فرآیندی و واحد را به صورت یک خاصیت قابل نمایش معرفی کرد [3] و از طرف دیگر خاصیت ها قابل بقا نیستند پس نمی توان از آنها شاخه گرفت. راهکار خوشه خاصیت شکل ایده آل اپراتورهای خاصیت هستند که تابعی از خواص فیزیکی اند. خوشه های خواص قابلیت بقایی دارند و امکان قانون اختلاط خطی را دارا هستند ولو اینکه اختلاط اپراتورهایشان خطی نباشد (معکوس دانسیته یک مخلوط برابر جمع معکوس دانسیته هریک از اجزا تشکیل دهنده آن است).

چهارچوب انتگراسیون خواص براساس فرمولاسیون مسئله معکوس است و با استفاده از خوشه های خواص یک نمایش بنیانی از متغیر های سیستم را تهیه می کند. در جاهایی که می توان سیستم را توسط سه خاصیت تعریف کرد، مسئله طرحی فرآیند را می توان با دیاگرام خوشه های خواص نمایش داد. نقاط گسسته برای نمایش مقدار خواص استفاده می شوند و یک سطح از مقادیر خواص قابل قبول بر روی نمودار برای نمایش ناحیه مطلوب مورد استفاده قرار می گیرد. ترسیم مسئله کمک می کند تا بتوان به آسانی راه حل بازیافت بهینه را تعریف نمود حال آنکه ویژگی خاص قانون مخلوط خطی اجازه می دهد تا برای حل مسئله از آنالیز بازوی اهرم ها استفاده کنیم. بنابراین یک چهارجوب برای

حل مسائل طراحی فرآیند براساس خاصیت ها بدست آمده است.

در طراحی فرآیندهای شیمیایی بطور کلی به یک مدل دقیق و قابل اطمینان برای پیشبینی خواص نیاز است. این برای حل بیشتر مسائل شبیه سازی ضروری است بخصوص در جاهائیکه همگرا شدن تابعی از واقعی بودن پیشبینی خواص فیزیکی و ترمودینامیکی است و درمورد طراحی ملکولی مدل پیشبینی خواص قلب تمام راه حل ها می باشد. اغلب روش هایی که در CAMD برای پیشبینی خواص استفاده می شوند روش های سهم گروهی Group Contribution Methods (GCM) هستند. در این روش ها خواص تابعی از یک ترم از گروها ضربدر تعداد آنها هستند.

انواع مختلف قانون های اختلاط برای گروهای ملکولی و جریان های فرآیندی وجود دارد و آنها خواص مشابهی را نمایش می دهند و می توان آنها را در یک دیاگرام مشابه رسم نمود. قبلا نمایش دادن برای طراحی فرآیند ممکن بود و با معرفی خواص محصول مطابق عملکرد مطلوب فرآیند تعریف می شد. بر روی دیاگرام سه تایی خاصیت های محصول هدف، به صورت ناحیه ای رسم می شود و با استفاده از گروه های ارائه شده ملکول های کاندیدا بدست می آمدند تا اینکه خواص آنها مطابق هدف شود.

در اینجا هدف، ارائه یک الگوریتمی مشخص برای یافتن گروه های مناسب جهت انجام طراحی حلال و بهبود یک الگوریتم طراحی ملکولی بر اساس خواص مطابق چهار چوب خوشه های خواص است. در این روش نحوه انتخاب گروه ها نیز قسمتی از بدنه طراحی حلال است که این انتخاب وابسته به محدودیت های خاصیت مسئله است که در این جا بین این محدودیت ها و گروه های انتخاب شده ارتباط ایجاد شده است تا گروه ها به طور هوشمندانه تری انتخاب شوند. در روش های معمول انتخاب گروه ها بیشتر بر اساس تجربه یا بر اساس

حلال قبلی انجام می شد اما در اینجا اساس انتخاب گروه ها بر مبنای محدودیت مسئله است و ضرورت نیاز به داشتن تجربه را کمتر می کند. راهکار یافتن گروه ها ابتدا برای سیستم های سه تایی مشخص می شود و در ادامه همین روش برای سیستم هایی با بیش از سه خاصیت تعمیم داده می شود. در اینجا الگوریتم ارائه شده از هر دو روش جبری و تصادفی برای طراحی حلال استفاده می کند. در مرحله تولید تمامی ملکول های ممکن به صورت تصادفی ساخته می شوند. محدودیت های ساختمان ترکیب بر اساس روش های جبری پیدا می شوند و به همین دلیل الگوریتم ارائه شده همواره همگرا است.

2- اصول تئوری

2-1 طراحی فرآیند و محصول:

در صنعت تولید فرآیند های شیمیایی، طراحی برخاسته از یک "نیاز" است و شامل پیدا کردن یک محصول که رفتار های مطلوب ما را از خود نشان دهد یا شامل پیدا کردن یک ماده افزودنی است که هنگامی به دیگر مواد شیمیایی اضافه شود خواص مطلوب بدست می آید[4].

در طراحی محصول (تولید)، شناسایی محصول نهایی نا معلوم است هرچند رفتار کلی یا خواص محصول (هدف) شناخته شده باشد. موضوع پیدا کردن محصول شیمیایی یا مخلوط ترکیباتی که خواص هدف را تامین می کنند است. Cussler and Moggridge 2001 مراحل زیر را برای طراحی محصول پیشنهاد داده اند:

1- تعریف نیازها (تنظیم کردن مسئله)

2- ایجاد ایده برای مطابق سازی نیازها (تولید ملکول یا صفحه جریان (flowsheet) ساختار، مطابق مسئله)

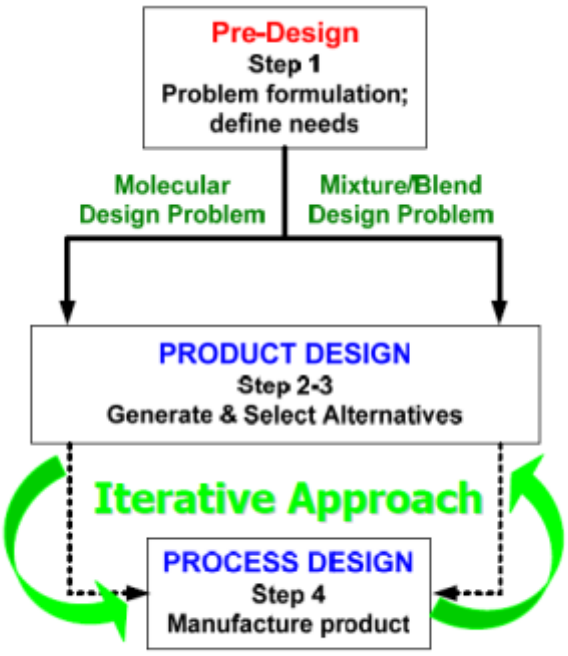
3- انتخاب یکی از میان ایده ها (طبقه بندی راه حل ها برای گرفتن بهترین راه حل)

4- درست کردن محصول

اولین مرحله دانستن هدف طراحی است. اگر این یک مسئله طراحی ملکولی یا مخلوط باشد راه حل پیشنهادی مطابق شکل 2-1 می باشد. طراحان محصول با توجه به دانش و فهم از مسئله طراحی و لیست پیشنهادی مواد خام، محصول مطلوب را معرفی می کنند. به عبارت دیگر آنها راه حل های ممکن را ایجاد و از بین آنها یکی را انتخاب می کنند.

طراحان محصول بعدا اطلاعاتشان را به طراحان فرآیند می دهند تا محصول نهایی را تولید کنند. این مرحله نهایی طراحی فرآیندها نامیده می شود. طراحان فرآیند در کنار طراحان محصول لیستی از پیشنهادها

را تهیه کرده و سپس امکان سنجی و سود آور بودن آنرا بررسی می کنند.



شکل 2-1 : طراحی محصول مطابق روش Cussler و Moggridge.

مهندسان از صفحه جریان فرآیند برای درک بیشتر از فرآیند و مشخص کردن تجهیزات رایج برای فرآیند استفاده می کنند. طراحان فرآیند همچنین عواقب زیست محیطی را نیز در نظر می گیرند. بعد از بدست آوردن روش ها، آنها امکان سنجی طرح را انجام می دهند اگر طرح قابل اجرا نباشد طراحان محصول باید دوباره طراحی خود را با روش جدید شروع کنند. با بازگشت کار به طراحان محصول و دوباره مطالعه طرح توسط مهندسان فرآیند مطابق شکل 2-1 یک عمل تکرار بوجود می آید. این تکرار ممکن است بین طراحان ملکول و طراحان فرآیند یک ناکارآمدی ایجاد کند. اولین هدف مسئله توضیح روشن تعاریف و موضوعات کلی که می بایست شرح داده شوند و در قسمت های بعدی یک نگاه

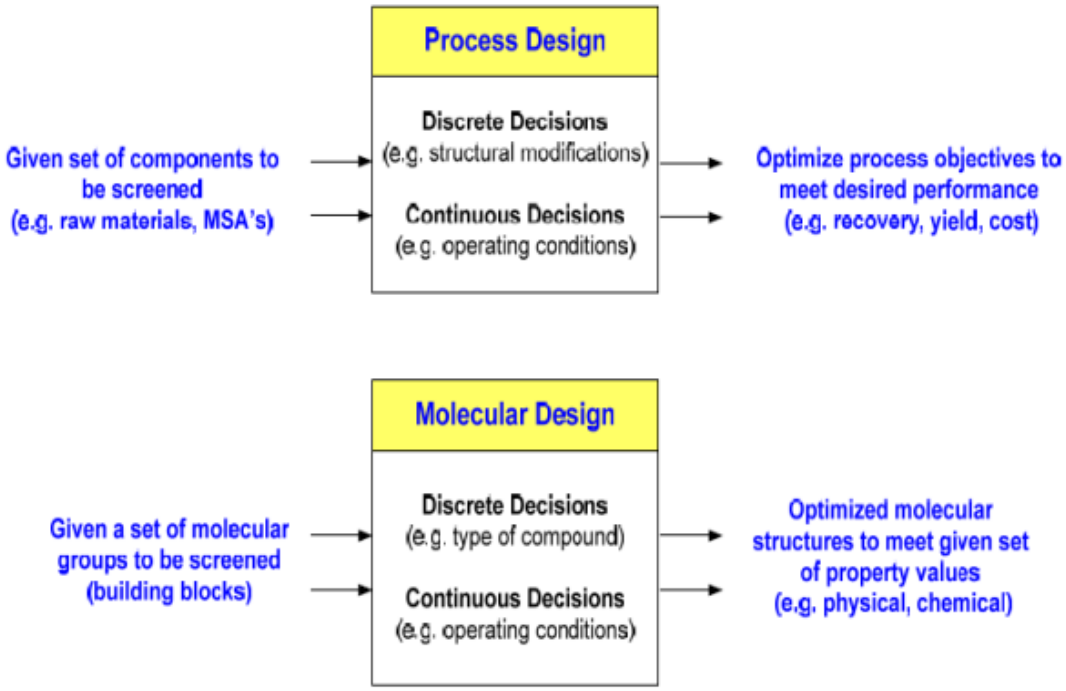
کلی بر روش های رایج و تکنیک های استفاده شده در طراحی فرآیند و محصول را توضیح می دهیم.

2-2 اهداف مسئله:

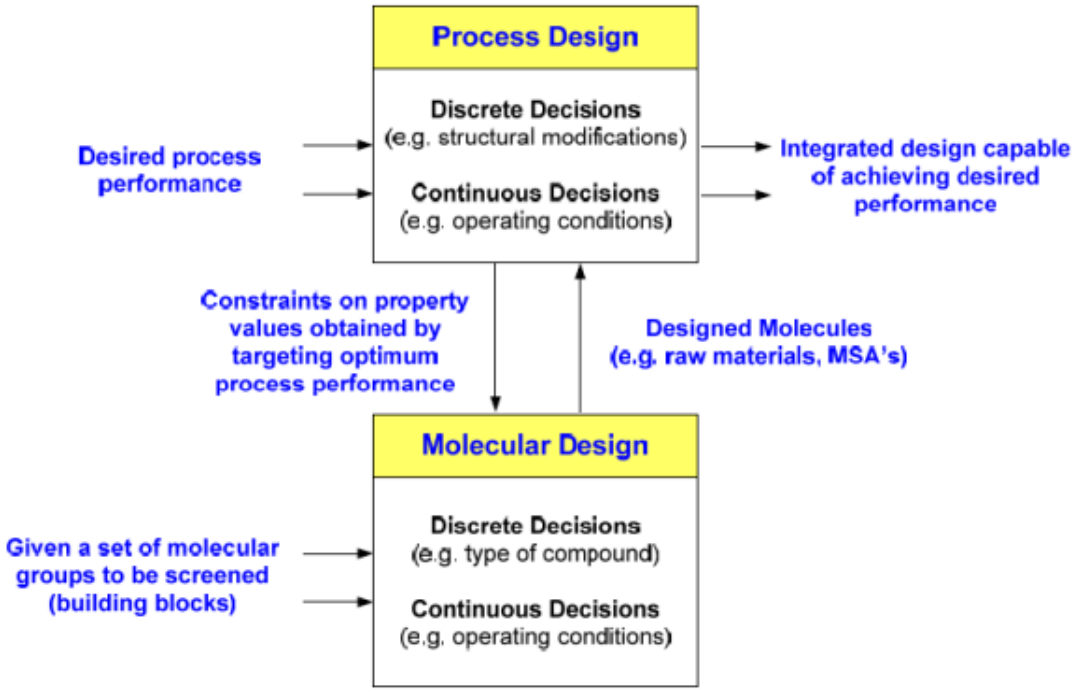
همانطور که قبلا گفته شد طراحی ملکولی و فرآیند دو مسئله مجزا هستند. در طراحی ملکولی روش کلی اغلب بر اساس حدس و خطا می باشد. اگرچه این روش کارایی ندارد اما تنها روش دردسترس است. الگوریتم (شکل 2-2) یک هدف کلی را نشان داده است و یک مجموعه از بلوک های ملکول ساخته شده را ارائه می دهد (-CH3,-OH,...). هدف تعریف مجموعه ای از ترکیب کاندید است که بتواند آن را به عنوان یک مجموعه ضرورت معرفی نمود (خواص شیمیایی یا فیزیکی). خواص مهم برای مدل سازی طراحی در قسمت 2-7 آورده می شود.

در طراحی پروسه به طور کلی موضوع یافتن تعادل بین ملزومات واحد و استفاده مناسب از مواد خام و فرآیند های شیمیایی است به عبارت دیگر ماگزیمم سود و حداقل ضرر (شکل 2-2). مواد شیمیایی ورودی به الگوریتم پروسه از لیست اولیه ترکیبات انتخاب می شوند بنابراین محدودیت عملکرد لیست ترکیبات است. در اینجا مسئله این است که طراحان ملکول ها یا محصولات یک توضیح برای پیش برد فرآیند ارائه می دهند که براساس کفیت دانش فرآیندی یا تجربی هستند بنابراین به هیچ وجه یک طراحی بهینه بدست نمی آید. ازاین رو یک مانع عمده، پیدا کردن یک طراحی بهینه است که مسئله طراحی ملکولی و فرآیند را با یکدیگر ترکیب کند. محققانی مانند Cussler&Moggride شناختن پتانسیل مفید بوسیله اتصال اطلاعات بین الگوریتم طراحی پروسه و ملکول به روشنی توضیح داده اند و در

اینجا هدف این است که با تعریف یکپارچه از طراحی ها بتوان بر محدودیت ها غلبه کرد. شکل 2-3 روش پیشنهادی برای حل مسائل طراحی را نشان می دهد.



شکل 2-2 : روش های معمول برای طراحی ملکول و فرآیند



شکل 2-3 : روش جامع برای طراحی ملکول و فرآیند

در اینجا الگوریتم طراحی فرآیند، شرایط لازم عملکرد مطلوب فرآیند و مسئله طراحی برای بهینه سازی شرایط عملیاتی فرآیند و عاملیت مطلوب را دربر دارد. این ملزومات همراه با یک مجموعه از بالک ساختمانی ملکولی ورودی الگوریتم طراحی ملکولی هستند. اینجا هدف منظم کردن ترکیبات کاندیدا هست که ممکن است خواص مطلوب را دارا باشند. لیست ایجاد شده از ترکیبات ممکن باید خواص مورد نیاز را داشته باشند و از معیار های سنجش خواص برای مرتب کردن ترکیبات استفاده می شود.

3-2 تعریف کلی مسئله

فرمول کلی طراحی فرآیند و ملکول می تواند بصورت مجموعه ای از معادلات x و y شرح داده شود به نحوی که بتوان متغییر ها را بهینه کرد یا انتگرال گرفت:

Fobj = min $\{AT\, y + f(x)\}$	Objective function	(1-2)
$h_1(\frac{\partial x}{\partial z}$ x,y)=0	process/product model	(-2 2)
h2 (x,y) = 0	Equality constraints	(3-2)
g1 (x) > 0	Process inequality constraints	(4-2)
g2 (x) > 0	Product inequality constraints	(5-2)
B . y + C . x > d	Structural constraints	(6-2)

بسیاری از فرمول های ریاضی بالا می توانند در مسائل مختلف به صورت متفاوت نشان داده شوند. بعضی از معادلات یا ترم ها ممکن است تنها تابع نوع مسئله باشند. اگر هدف تولید یک حل ساده مسئله فرآیند یا طراحی ملکولی باشد، پس مساوی ها، نامساوی ها و محدودیت های ساختمانی به تنهایی در نظر گرفته می شوند. هر چند بعضی از ابزارهای بهینه سازی ریاضی مورد استفاده قرار می گیرند و هدف آنها معرفی حل بهینه است که نیازمند حل معادلات 2-1 تا 2-6 است. روش ها مختلفی برای طراحی فرآیند و ملکول در قسمت های بعدی آورده شده است.

2-4 سنتز فرآیند و روش های طراحی:

فرآیند سنتز تابعی از عوامل مختلفی مانند انتگراسیون و صفحه جریان سیستم است. برای بدست آوردن جزئیات چگونگی رفتار فرآیند و اینکه آیا اهداف فرآیند قابل دستیابی هستند از ابزار های آنالیز فرآیند مانند ASPEN Plus، PRO/II و HYSYS استفاده می شود [5]. به طور معمول هدف تعیین امکان سنجی و ساختار بهینه سازی در قسمت انتخاب تجهیزات و شرایط فرآیندی برای هر پروسه است [6]. قبلا مسیر صفحه جریان قابل قبول تعریف می گردید و سپس مورد آنالیز و تست قرار می گرفت تا اطمینان حاصل شود که اهداف فرآیند بدست آمده است.

تکرار بین سنتز فرآیند و آنالیز تا زمانیکه اهداف بدست آیند ادامه می یافت [7]. Biegler(1997) اصول مراحل در صفحه جریان و سنتز فرآیند را به صورت زیر ارائه کرد: 1- جمع آوری اطلاعات 2-ارائه پیشنهادات 3- ارزیابی اولیه طراحی 4- تحقیق در میان پیشنهادات.

چندین روش که سعی در بهبود و توسعه ایده های طراحی فرآیند در ادامه آورده شده است:

راهکارهای متفاوت بوسیله انتخاب یک گروه از مهندسین ماهر در زمینه فرآیند تبادل می شود. بهینه سازی این روش با ارائه روش های مختلف و جلوگیری از سو گرفتن طراحی به یک حل خاص حاصل می شود.

روش دیگر برای حل مسئله طراحی فرآیند وفق دادن یک حل قدیمی به یک طراحی مشابه و سپس بهبود در آن است [5]. محدودیت این روش این است که ضمانتی برای بهینه بودن روش وجود ندارد.

روش هایی بر اساس ابتکار و خلاقیت نیز وجود دارند. مهندسان فرآیند، اغلب فرآیند را به گروه های مختلفی طبقه بندی می کنند و هر یک از این گروها یک گروه از راه حل های ممکن را دارا می باشند. این روش با استفاده از آنالیز مسئله بسیاری از متغییر های گسسته را ثابت می کند که منجر به کاهش سطح جستجو می شود. در اینجا با مشاهده تکرار رفتار مسائل گوناگون برای انتخاب تصمیم بهینه استفاده می شود. این روش برای مسائلی مفید است که با مسئله قبل بسیار شبیه باشد[7].

روش بهینه سازی ریاضی از دیگر روش هاست و برای نیاز های طراحی فرآیند بکار گرفته می شوند. فرمولاسیون مسئله می تواند اهداف را توضیح دهد. همچنین باید توانایی بررسی تمام پیشنهاد ها را دارا باشد و بتواند با کم کردن تعداد پیشنهادات،

فضای جستجو را کاهش دهد. روش های بهینه سازی ریاضی می توانند حل بهینه سازی را تضمین کنند. اما نمی تواند همگرایی را تضمین کند. معمولا مسائل بهینه سازی به صورت مسائل غیر خطی یکپارجه Mixed Integer Non-Linear Programs (MINLPs) هستند. الگوریتم با متغییر های صحیح و پیوسته تعریف می شود که طراحی و پارامترهای عملیاتی مانند دما، فشار، دبی و اندازه تجهیزات در آن معین می شوند.

مرور سنتز فرآیند در مقالات به راحتی در دسترس هستند. روش های مختلف به دو دسته تقسیم بندی می شوند: آنهایی که مستقل از ساختار هستند و آنهایی که براساس ساختار هستند. تمام روش ها و مراحل اساس آتها توسط Biegler و همکارانش معرفی شده است.

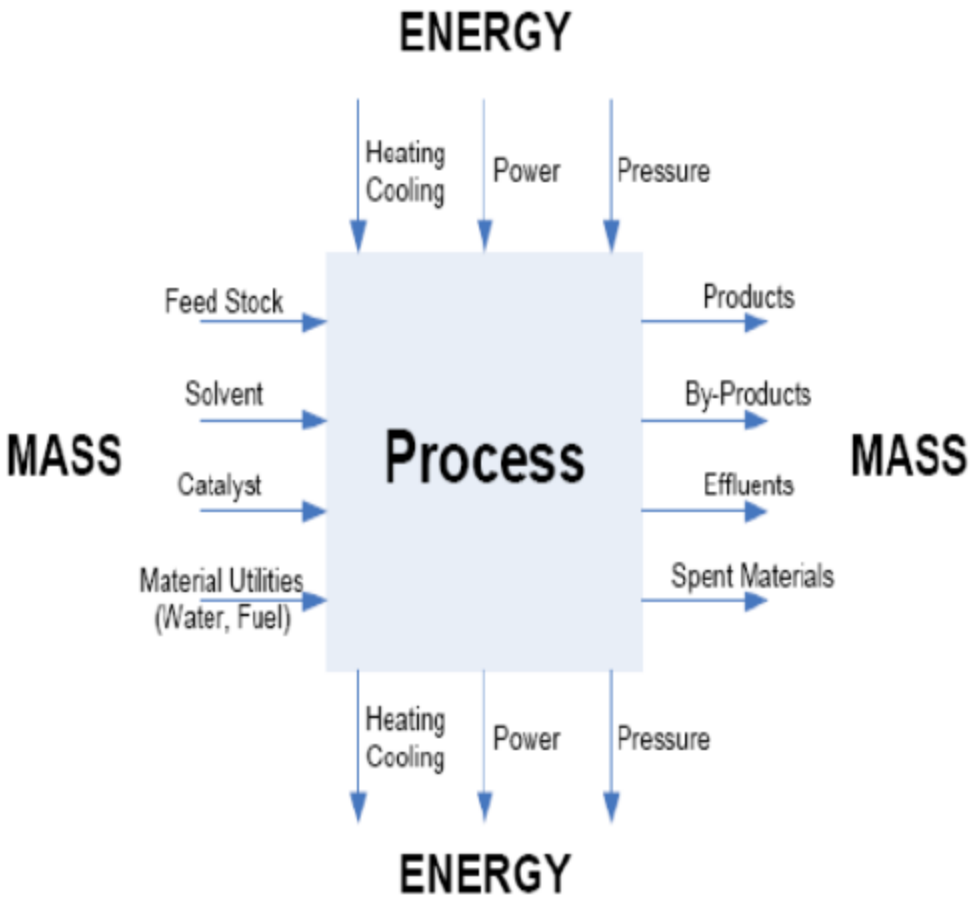
روش جدید خوشه های خواص ابزار طراحی است که از El-Halwagi(1997) و Westerberg(2004) برداشت شده است[2],[3] . روش های خوشه ای خواص پیچیدگی کمتری در مورد طراحی مسئله دارند. با رسم خواص در یک دامنه کمتر و با قرار دادن مرزها بر روی فضای جستجو انجام می گیرد. این روش به تفصیل در بخش 3-1 ارائه می گردد.

5-2 انتگراسیون فرآیند

انتگراسیون فرآیند "یک روش کل نگر برای طراحی فرآیند و بهینه سازی است که شامل طراحی، به روز رسانی و عملیات فرآیندی است" [7]. ابتدا سعی براین است تا یک تصویر کلی از فرآیند ساخت و بعد از آن به جزئیات آن پرداخته شود. انتگراسیون لازم است توانایی ایجاد یک حالت را که در آن کمیت پارامترهای مهندسی مشخص باشد را ایجاد کند (بدست آوردن حداکثر سود یا حداقل کردن مواد خام مصرفی و هدر رفت). طراح نیازمند معرفی اهداف عملکرد کلی است تا بتواند راهکار رسیدن به آن را ارائه کند و توسعه موثری را انجام دهد.

فرآیند ها به طور کلی به جریان های جرمی و انرژی تقسیم می شوند. جریان ها جرمی شامل جریانی از مواد خام، حلال ها و... می باشند که درون فرآیند مورد استفاده قرار می گیرند و محصول ساخته می شود. جریان انرژی در شکل آب به صورت انرژی گرمایشی یا سرمایشی به جریان های جرمی فرآیند منتقل می شوند (شکل 2-4).

انتگراسیون جرم و انرژی روش های سیستماتیک برای تعیین اهداف عملکرد جرم و انرژی هستند. انتگراسیون انرژی تلاش می کند که جریان از درون فرآیند بازیابی شود به عبارت دیگر بهینه سازی پیکربندی سیستم برای حداقل سازی انرژی مصرفی تعریف می شود. تکنیک های انتگراسیون جرمی به وسیله اختصاص دادن مکان های مناسب برای دبی مواد در فرآیند، عملکرد جریان ها را بهینه می سازد. بعضی از ابزار های اصولی مورد استفاده برای زمینه های انتگراسیون حرارتی و جرمی در زیر آورده شده است.



شکل 2-4: قالب انرژی و جرم یک فرآیند[9]

2-5-1 انتگراسیون انرژی:

معمولا هر جریانی در فرآیند برای استفاده در واحد نیازمند یک گرمایش یا سرمایش است که این گرمایش یا سرمایش از نظر اقتصادی قابل قبول نیست. برای بهینه کردن این عملیات می بایست با افزایش انتقال حرارت از مصرف انرژی در ابتدای واحد جلوگیری کرد که این کار از نظر اقتصادی بسیار مطلوب است. Heat Exchanger Network (HEN) با افزایش مقدار حرارت انتقالی از

جریان گرم به سرد این کار را انجام می دهد. در انتگراسیون شبکه های حرارتی اطلاعات زیر لازم است:

- تعداد جریان های سرد و گرم
- ظرفیت حرارتی جریان گرم (HH) و سرد (HC) = دبی جریان * ظرفیت حرارتی
- دمای جریان گرم ورودی (T^s) و دمای خروجی مورد نظر(T^t) و جریان سرد (t^s) و (t^t)
- T^s وT^t دمای منبع بیرونی موجود گرمایش و سرمایش است

طراحی کار به صورت زیر انجام می شود[5]:

- در کدام واحد سرمایش یا گرمایش باید استفاده شود؟

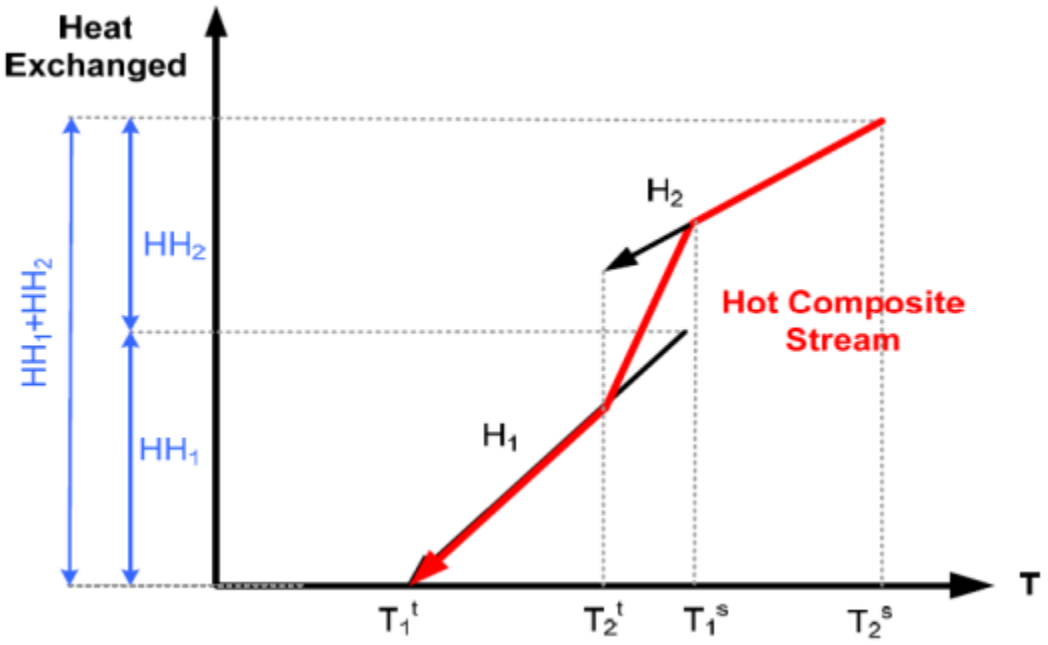
- بهینه حرارت داده شده یا گرفته شده از هر منبع چیست؟

- ساختار بهینه سیستم چیست و چطور مبدل های حرارتی منظم می شوند؟ باید جریان را مخلوط کرد یا جدا؟

Hohmann (1971) یک روش بهینه سازی حرارتی ترسیمی معرفی کرد. اولین روش ترسیمی که تلاش می کرد حداقل حرارت اولیه مورد نیاز Utility (مصارف جانبی) را تعریف کند. Linnhoff و همکارانش یک روش بهبود یافته ترسیمی را معرفی کردند. این روش براساس توانایی ترمودینامیکی انتقال حرارت از هر جریان گرم با دمای T به هر جریان سرد با دمای t با یک حداقل نیرو محرکه ΔT_{min} بود. حداقل دمای جریان گرم که امکان دارد انتقال حرارت رخ دهد از معادله 2-7 بدست می آید:

$$T= t+\Delta T \qquad 7-2$$

اول، یک جریان مرکب از تمام جریان های گرم در تمام پروسه باید ساخته شود. نمودار مقدار آنتالپی تغییر یافته بوسیله هر خط جریان گرم نسبت به دما نمایش می دهد. با فرض ایده ال ترمودینامیک و ثابت بودن ظرفیت حرارتی می توان فرض کرد جریان مرکب، نمایش کلی تمام جریان های گرم فرآیند است بطوریکه تابعی از گرمای انتقالی آنها با دما است. یک مثال از جریان گرم مرکب برای دو جریان گرم در شکل 2-5 نمایش داده شده است. در اینجا ابتدا و انتهای هر جریان با T^s و T^t نمایش داده می شود. مقدار انرژی یا گرمای از دست رفته جریان (HH) افزایش حرارت جریان سرد (HC) مطابق معادلات 2-8 و 2-9 محاسبه می شود. ترکیب جریان گرم توسط انطباق ساخته می شود (شکل 2-5).



شکل 2-5: نمایش جریان مرکب گرم

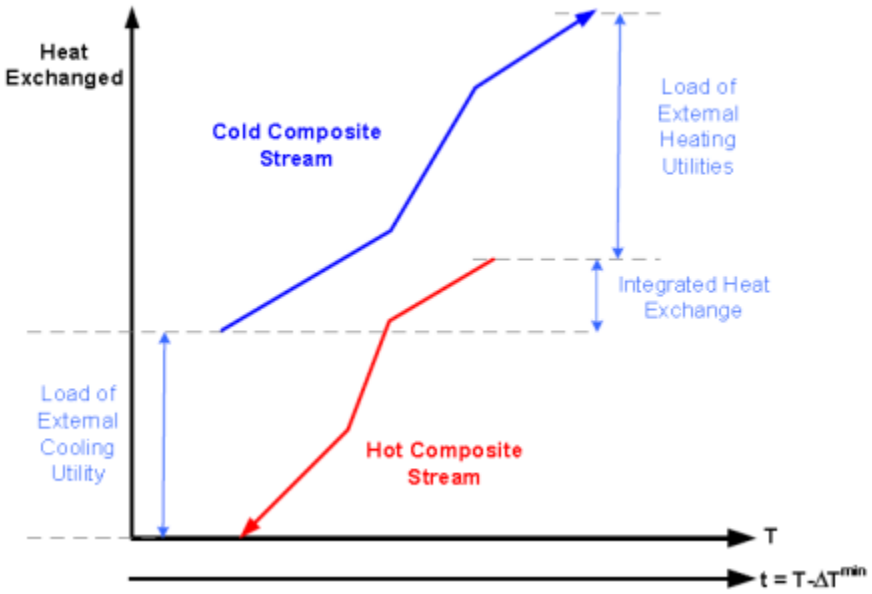
به همین روش ترکیب جریان سرد ساخته می شود. بعد هر دو جریان مرکب سرد و گرم در یک نمودار رسم می شوند. که باید نمودار دما دارای دو مقیاس باشد که

بتوان هر دو جریان را با هم کشید. اینجا مقیاس دمای جریان مرکب سرد با ΔT_{min} تغییر می کند. موقعیت جریان گرم همیشه سمت راست جریان سرد است زیرا دمای آن همیشه بیشتر یا حداقل به اندازه ΔT_{min} از جریان سرد بیشتر است (مطابق معادله 2-7).

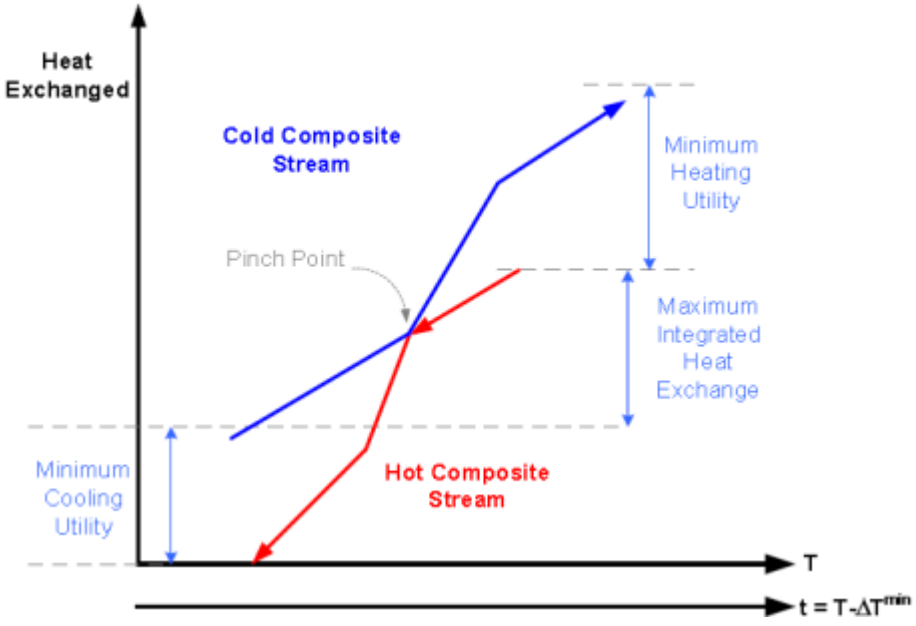
از هم پوشانی بین دو نمودار جریان مرکب گرم و سرد یک ناحیه بدست می آید که این ناحیه مرزی برای بازیافت انرژی یا انتقال حرارت کلی است (شکل 2-6 الف). بنابراین آنتالپی قرار گرفته بین ناحیه همپوشانی(overlap) دو نمودار نمایانگر این است که خطوط سرد و گرم می توانند بدون نیاز به واحد های جانبی و تنها با انتقال حرارت بین خودشان به دمای مطلوب فرآیند برسند. نقاط دیگر که خارج این ناحیه هستند نمی توانند با بازیافت داخلی حرارتی به دمای مطلوب برسند و ناچارا باید از سرویس های جانبی برای سرمایش یا گرمایش استفاده کرد. جریان سرد می تواند به بالا یا پایین نمودار حرکت کند. از این رو این امکان ایجاد می شود که با جابجایی نمودار سرد حداکثر ناحیه بهینه را ایجاد نمود. حداقل امکانات جانبی مورد نیاز بوسیله لغزش نمودار سرد است تا اینکه دو نمودار به هم برخورد کنند. این نقطه، نقطه حرارتی پینچ نامیده می شود. اگر نمودار سرد از نطقه پینچ عبور کند یک خطا در مقدار حرارت ناحیه بهینه و علاوه بر آن مقدار حرارت مورد نیاز از واحد جانبی رخ می دهد. اگر نمودار سرد پایین نقطه پینچ باشد ناحیه بهینه پتانسیل خود را از دست می دهد و نیازهای حرارتی جانبی افزایش می یابد.
برای جلوگیری از هدر رفت پتانسیل کلی Linnhoff (1982) قوانینی برای تعریف حداقل گرمایش و سرمایش بیرونی واحد جانبی را بهبود بخشید. در این روش یک نقطه پینچ به صورت زیر تعریف می گردد:

1. هیچ حرارتی از نقطه پینچ نباید عبور کند

2. هیچ سرمایشی نباید از بالای پینچ استفاده شود
3. هیچ گرمایشی نباید در زیر نقطه پینچ اتفاق بیافتد.



شکل 2-6 الف: دیاگرام مرکب حرارتی با انتگراسیون جزئی



شکل 2-6 ب: دیاگرام پینچ حرارتی- حداکثر انتگراسیون گرما

بایستی در نظر گرفته شود که حداقل کردن نیاز به واحدهای جانبی(utility) الزاما به معنی حداقل کردن هزینه ها نیست. مقدار مورد نیاز سرویس جانبی خارجی با کاهش ΔT_{min} پایین می آید. اگرچه کاهش نیرو محرکه به معنی افزایش سطح مبدل حرارتی است و منجر به افزایش قیمت واحد مبدل ها می شود. اینجا باید یک ارزیابی بین حداقل سرویس مورد نیاز و تعداد و اندازه های مبدل ها صورت گیرد. حل بهینه مسئله انتگراسیون حرارتی با روش های بهینه سازی ریاضی امکان پذیر است که مسائل غیر خطی (NLP) و خطی(LP) به مدل های ساختاری تبدیل می کند[10].

آنالیز پینچ یک وسیله مفید است که تجمع سرمایش و گرمایش مورد نیاز فرآیند را در یک دیاگرام واحد نشان می دهد. اگرچه این براساس فرض ترمودینامیک ایده ال و ثابت بودن ظرفیت گرمایی است. برای عبور از این محدودیت ها روش های بهتر با بکارگیری جزئیات ترمودینامیک در همبسته سازی خواص بکار برده می شود [11].

2-5-2 انتگراسیون جرم:

امروزه به دلیل مسائل زیست محیطی مسئله انتگراسیون جرمی مطرح می شود. این مسئله بخصوص در زمینه آب مصرفی در فرآیندها از اهمیت ویژه ای برخوردار است. برای طراحی شبکه انتقال جرم از فلسفه آنالیز حرارتی شبکه مبدل ها استفاده می شود. طراحی موضوع در بازیافت آب، مینیمم کردن آب مصرفی بوسیله حداکثر کردن آب بازیافتی است. این به توسعه یک روش طراحی جدید به خصوص شکل آنالیز جرمی پینچ و منابع نمایش طرح منجر گردید.