

**DESIGN OF VINYL CHLORIDE PRODUCTION BY SIMULTANEOUS
FINANCIAL AND ENVIRONMENTAL RISK MANAGEMENT**

Ms. Mayurachat Ounjitti

A Thesis Submitted in Partial Fulfilment of the Requirements
for the Degree of Master of Science
The Petroleum and Petrochemical College, Chulalongkorn University
in Academic Partnership with
Case Western Reserve University, The University of Michigan,
The University of Oklahoma, and Institut Français du Pétrole

2004

ISBN 974-9651-28-6

I21616644

Thesis Title: Design of Vinyl Chloride Production by Simultaneous
Financial and Environmental Risk Management
By: Ms. Mayurachat Ounjitti
Program: Petrochemical Technology
Thesis Advisors: Asst. Prof. Rathanawan Magaraphan
Prof. Miguel J. Bagajewicz

Accepted by the Petroleum and Petrochemical College, Chulalongkorn University, in partial fulfilment of the requirements for the Degree of Master of Science.

K. Bunyakiat.

College Director

(Assoc. Prof. Kunchana Bunyakiat)

Thesis Committee:

Rathanawan Magaraphan

(Asst. Prof. Rathanawan Magaraphan)

Miguel J. Bagajewicz

(Prof. Miguel J. Bagajewicz)

Thevarak Rochanapruk

(Dr. Thevarak Rochanapruk)

Kitipat Siemanond

(Dr. Kitipat Siemanond)

ABSTRACT

4571007063: **PETROCHEMICAL TECHNOLOGY**
 Mayurachat Ounjitti: Design of Vinyl Chloride Production by
 Simultaneous Financial and Environmental Risk Management
 Thesis Advisors: Asst. Prof. Rathanawan Magaraphan and
 Prof. Miguel J. Bagajewicz, 91 pp. ISBN 974-9651-28-6

Keywords: Risk / Financial Risk Management / Environmental Risk
 Management / Uncertainty / Multiobjective Optimization

Typically, traditional process design is focused on the selection of process technologies and optimization of chemical process technologies and optimization of chemical processes based on economic considerations. The environmental impacts of process design have been given a lower priority. This design procedure may often overlook the production of large quantities of waste materials and pollutions. Increasingly, there is a need to broaden the scope of process design by including environmental impacts. Realizing the uncertainty present in the process systems such as forecasted demand, prices, feed composition is associated with risk. The objective of this research is to provide and develop design procedures for optimizing chemical process simultaneously based on economic aspect (net present worth; NPW), environment aspect (environmental impact), and risks using a multi-objective optimization approach and the two-stage stochastic model for planning under uncertainty. As an example, the vinyl chloride process is evaluated using the proposed methodology by using the process simulator ProII and GAMS program to create scenarios under uncertainty. The best solution should have a plant capacity of 400,000 ton/year, no heat integration, and no HCl recycle which obtains the expected net present worth of $\$334,532,151 \pm 220,223,579$ the expected environmental impact of 4.91 ± 0.54 EIU/ton of VCM, and risk of losing money which is 6.5%.

บทคัดย่อ

มยุรฉัตร อุ่นจิตติ: การออกแบบกระบวนการผลิตไวนิลคลอไรด์โดยพิจารณาการจัดการความเสี่ยงทางการเงิน และสิ่งแวดล้อม (Design of Vinyl Chloride Production by Simultaneous Financial and Environmental Risk Management) อ. ที่ปรึกษา: ผศ. ดร. รัตนาวรรณ มกรพันธุ์ และ ศ. ดร. มิเกล เจ บากาเฮวิช, 91 หน้า ISBN 974-9651-28-6

การออกแบบกระบวนการโดยทั่วไปจะเลือกเทคโนโลยีในการผลิต และกระบวนการทางเคมี โดยพิจารณาจากความคุ้มค่าในด้านเศรษฐศาสตร์เป็นหลักซึ่งการออกแบบระบบแบบนี้จะให้ความสำคัญต่อผลกระทบต่อสิ่งแวดล้อมต่ำกว่าซึ่งทำให้เกิดการผลิตของเสียและมลพิษออกมาเป็นจำนวนมาก จึงมีความต้องการมีมากขึ้นเรื่อยๆ ที่จะขยายขอบเขตของการออกแบบกระบวนการโดยผนวกผลกระทบต่อสิ่งแวดล้อมไว้ด้วย โดยการตระหนักว่ามีความไม่แน่นอนอยู่ในการออกแบบระบบ เช่น การคาดการณ์อุปสงค์, ราคาและส่วนผสมของสารตั้งต้น ที่สัมพันธ์กับความเสี่ยง วัตถุประสงค์ของงานวิจัยนี้คือแสดงและพัฒนาวิธีการออกแบบสำหรับกระบวนการทางเคมีที่เหมาะสมควบคู่ไปกับปัจจัยทางเศรษฐกิจ(มูลค่าปัจจุบัน), ปัจจัยทางสิ่งแวดล้อม (ผลกระทบต่อสิ่งแวดล้อม) และความเสี่ยง โดยใช้วิธีประมวลผลจุดประสงค์และต้นแบบการประมวลผลความไม่แน่นอน 2 ขั้นตอน การศึกษากระบวนการผลิตไวนิลคลอไรด์ได้ใช้เป็นตัวอย่างประเมินโดยใช้โปรแกรม ProII ในการจำลองแบบและ GAMS ในการสร้างสถานการณ์ความไม่แน่นอน พบว่ากระบวนการที่ดีที่สุดคือกระบวนการที่มีกำลังการผลิต 400,000 ตันต่อปี, ไม่มีการแลกเปลี่ยนความร้อนและไม่มีการย้อนใช้กรดไฮโดรคลอริก ซึ่งจะทำให้ได้รับมูลค่าเงินปัจจุบันสุทธิเฉลี่ยเท่ากับ $334,532,151 \pm 220,223,579$ ดอลลาร์ และผลกระทบต่อสิ่งแวดล้อมเฉลี่ยเท่ากับ 4.91 ± 0.54 หน่วย/ตันของไวนิลคลอไรด์โมโนเมอร์ และ ความเสี่ยงที่จะขาดทุนเท่ากับ 6.5%

ACKNOWLEDGEMENTS

This work would not have been possible without the assistance of the following individuals.

First of all, I would like to give a special thank to Professor Miguel J. Bagajewicz and Asst. Prof. Rathanawan Magaraphan for providing useful recommendations, creative comments, and encouragement throughout the course of this work. Without them, this thesis might not be occurred.

The author would like to thank Dr. Thevarak Rochanapruk and Dr. Kitipat Siemanond for his kind advice and for being on the thesis committee. Their suggestions and comments are vary valuable for me and this work.

I would like to thank Ms. Waraporn Pumpaisanchai, Mr. Surasee Chutipanich, and Ms. Jirawadee Pipattanatorkul who gives me useful information, helpful explanation and practical techniques throughout my work.

The author is grateful for the partial scholarship and partial funding of the thesis work provided by Postgraduate Education and Research Programs in Petroleum and Petrochemical Technology (PPT Consortium).

During the period in the Petroleum and Petrochemical College, Chulalongkorn University will be meaningless to me, if there will not be my friends and PPC staffs who support, encourage and welcome me all the time. Thank you very much to have all of you in this college.

Last but not least, throughout twenty years of study, I am deeply indebted to my family for their forever and unconditionally love, understanding, encouragement and support me all the time. Thank you very much.

TABLE OF CONTENTS

	PAGE
Title Page	i
Abstract (in English)	iii
Abstract (in Thai)	iv
Acknowledgements	v
Table of Contents	vi
List of Tables	ix
List of Figures	x
CHAPTER	
I INTRODUCTION	1
II BACKGROUND AND LITERATURE SURVEY	3
2.1 Environmental Impact	3
2.1.1 Calculation of Environmental Impact Units	3
2.2 Economic Analysis	5
2.2.1 Estimation of Total Capital Investment	5
2.2.2 Estimation of Total Product Cost	6
2.2.3 Methods for Calculating Profitability	7
2.3 Environmental Impact and Uncertainty	8
2.4 Background on Two-stage Decision Making Stochastic Models	9
2.5 Risk	10
2.5.1 Managing Risk at the Design Stage	12
2.6 Multiobjective Optimization	14
III PROCEDURES	16
3.1 Implementing of Process Design Programs with Financial and Environmental Risk Management	16

CHAPTER	PAGE
3.2 Case Study: the Manufacture of Vinyl Chloride Monomer	
Production Process	17
3.2.1 Direct Chlorination Process	19
3.2.2 Oxychlorination Process	20
3.2.3 Pyrolysis Process	21
3.2.4 EDC Purification Process	21
3.2.5 VCM Purification Process	24
3.3 Treatment System	25
3.3.1 Vapor and Liquid Byproduct Treatment	26
3.3.2 Water Treatment	27
3.4 Uncertainty, Risk Analysis, and Probability	26
IV RESULTS AND DISCUSSION	29
4.1 Financial and Environmental Impact Assessment	29
4.1.1 Optimization Variables and Uncertainty Parameters	29
4.1.2 Expected Net Present Worth and Expected Environmental Impact	31
4.2 Financial and Environmental Risks	34
4.2.1 Financial Risks	34
4.2.2 Environmental Risks	38
4.3 Multiobjective Optimization	40
V CONCLUSIONS AND RECOMMENDATIONS	42
REFERENCES	43
APPENDICES	46
Appendix A Reactor modeling procedure.	46
Appendix B Sizing and cost estimation of equipment.	57

CHAPTER		PAGE
Appendix C	Forecasted value and reference data.	61
Appendix D	The method of calculations of financial and environmental risks.	66
Appendix E	Potential environmental impact.	75
Appendix F	Keyword input file for the VCM plant.	78
Appendix G	Reference data of VCM plant from Dr. Thevarak Rochanapruk.	90
CURRICULUM VITAE		91

LIST OF TABLES

TABLE		PAGE
2.1	Ratio factors for estimating capital investment items based on delivered-equipment cost	6
2.2	Estimation of total product cost	7
4.1	Definition of optimization variables and uncertainty parameters	30
4.2	Design specification	31
4.3	Expected net present worth, environmental impact, and their standard deviations	32
4.4	Optimization results for the VCM plant	41

LIST OF FIGURES

FIGURE	PAGE
2.1 Profit histogram for two cases of resource allocation.	10
2.2 Definition of risk. Discrete case.	11
2.3 Risk curve. Continuous case.	12
2.4 Different kinds of risk curves.	12
2.5 Multiobjective Approach.	13
2.6 Spectrum of solutions.	14
3.1 Proposed methodologies general diagram.	17
3.2 Principle steps in a balance vinyl chloride process.	18
3.3 Direct chlorination process.	19
3.4 Oxychlorination process.	20
3.5 Pyrolysis process.	21
3.6 EDC purification process.	23
3.7 VCM purification process.	24
3.8 Flowsheet of treatment process system.	26
3.9 Procedure of risk analysis.	28
4.1 Relationship between expected net present worth, $E(NPW)$, environmental impact, $E(EI)$ in each design.	33
4.2 Relationship between expected net present worth, $E(NPW)$, environmental impact, $E(EI)$ in the designs with treatment system.	33
4.3 Financial risk curves without the treatment system.	35
4.4 Financial risk curves with the treatment system.	36
4.5 Relationship between plant capacities and financial risk.	37
4.6 Relationship between %HCl recycles and financial risk.	37
4.7 Relationship between with and without treatment systems and financial risk.	38
4.8 Relationship between with and without heat integrations and financial risk.	38
4.9 Environmental risk curves without the treatment system.	39

FIGURE	PAGE
4.10 Environmental risk curves with the treatment system.	39
4.11 Comparison among %HCl recycles.	40
4.12 Comparison among plant capacities.	40