SOFTWARE INTEGRATION OF LIFE CYCLE ASSESSMENT AND ECONOMIC ANALYSIS FOR PROCESS EVALUATION

Sawitree Kalakul

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
The University of Michigan, The University of Oklahoma,
Case Western Reserve University, and Institut Français du Pétrole
2013

Thesis Title:	Software Integration of Life Cycle Assessment and Economic Analysis for Process Evaluation
By:	Sawitree Kalakul
Program:	Petroleum Technology
Thesis Advisors:	Asst. Prof.Pomthong Malakul
	Prof. Rafiqul Gani
	Asst. Prof. Kitipat Siemanond

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

..... College Dean

(Asst. Prof. Pomthong Malakul)

Thesis Committee:

..... (Asst. Prof. Pomthong Malakul)

..... (Asst. Prof. Kitipat Siemanond)

..... (Prof. Rafiqul Gani)

..... (Asst. Prof. Manit Nithitanakul)

.....

(Assoc. Prof Thumrongrut Mungcharoen)

ABSTRACT

5473021063: Petroleum Technology Program
Sawitree Kalakul: Software Integration of Life Cycle Assessment and Economic Analysis for Process Evaluation
Thesis Advisors: Asst. Prof. Pomthong Malakul, Prof. Rafiqul Gani, and Asst. Prof. Kitipat Siemanond 379 pp.
Keywords: Process design/ Life cycle assessment/ Economic evaluation

Creating a sustainable future offers challenges to engineers to develop chemical process designs that are not only technically and economically feasible but also environmental friendly. Life cycle assessment (LCA) is a tool for identifying and quantifying environmental impacts of the process or product in order to select an optimal design from various alternatives. In this research, a new LCA software, LCSoft, was developed for the evaluation of chemical and petrochemical processes with the option of integration with other process design tools such as sustainable design (SustainPro), economic analysis (ECON) and process simulation. The software framework contains four main parts: Tool 1, life cycle inventory (LCI) knowledge management, enabling easy maintenance and future expansion of the LCI database; Tool 2, estimation of environmental factors using the group contribution^{+} method (GC^{+}) in order to calculate environmental impacts for a wide range of chemicals; Tool 3, LCA calculation models; and Tool 4, options for tool integration. To test the program, a bioethanol production process using cassava rhizome was used as a case study. Results from LCSoft show an accurate estimation of the environmental performance in various aspects such as carbon footprint, resource and energy consumption, and other environmental impacts as compared to commercial LCA software. Thus, LCSoft can provide a systematic analysis of economic and sustainable performance and help obtain a sustainable design more efficiently.

บทคัดย่อ

สาวิตรี กาละกุล: การบูรณาการซอฟแวร์สำหรับการประเมินวัฏจักรชีวิตและการวิเคราะห์ทางเศรษฐกิจ (Software Integration of Life Cycle Assessment and Economic Analysis for Process Evaluation) อ. ที่ปรึกษา: ผศ. ดร. ปมทอง มาลากุล ณ อยุธยา, ศ.ดร. ราฟิก กานี่, และ ผศ. ดร. กิติพัฒน์ สีมานนท์ 379 หน้า

การพัฒนาที่ยั่งยืนของโลกเป็นแรงผลักดันวิศวกรในการแบบแบบและพัฒนากระบวนการทางเคมีและการผลิตของโรงงานต่างๆ ที่คำนึงถึงปัจจัยด้านสิ่งแวดล้อมนอกเหนือจากปัจจัยทางด้านเทคนิคและปัจจัยทางด้านเศรษฐกิจ การประเมินวัฏจักรชีวิตเป็นเครื่องมือที่มีประสิทธิภาพในการประเมินผลกระทบด้านสิ่งแวดล้อมของกระบวนการหรือผลิตภัณฑ์และช่วยในการเลือกกระบวนการที่เหมาะสมที่สุด ในงานวิจัยนี้ซอฟแวร์สำหรับการประเมินวัฏจักรชีวิต LCSoft ได้ถูกพัฒนาขึ้นเพื่อใช้เป็นเครื่องมือสนับสนุนการออกแบบและจำลองกระบวนการ โดย LCSoftมีศักยภาพในการเชื่อมโยงข้อมูลกับผลจากการจำลองกระบวนการและซอฟแวร์เกี่ยวกับการอออกแบบกระบวนการอื่นๆ เช่น SustainPro (ซอฟแวร์เพื่อการประเมินความยั่งยืนของกระบวนการ) และ ECON (ซอฟแวร์เพื่อการประเมินความเป็นไปได้ทางเศรษฐกิจ) กรอบการทำงานของงานวิจัยนี้ประกอบด้วยสี่ส่วนได้แก่ Tool 1 (Life cycle inventory knowledge management or LCI knowledge base) สำหรับการเก็บข้อมูล LCI ของผลิตภัณฑ์อย่างเป็นระบบเพื่อสะดวกในการขยายฐานข้อมูลและการนำข้อมูลไปใช้ในการคำนวณในซอฟแวร์, Tool 2 (การประเมิณค่าต่างๆที่ใช้ในการคำนวณ LCA โดยใช้แบบจำลอง group contribution (GC), Tool 3 (การคำนวณที่เกี่ยวข้องกับ LCA) และ Tool 4 (การรวมเครื่องมือที่ใช้คำนวณเกี่ยวกับการออกแบบกระบวนการ) ทั้งนี้กระบวนการผลิตเอทานอลจากเหง้ามันสำปะหลังได้ถูกนำมาใช้เพื่อทดสอบการทำงานของซอฟแวร์และการรวมกันของซอฟแวร์ ซึ่งพบว่าผลการคำนวณของ LCSoft ที่ได้มีประสิทธิภาพเทียบได้กับซอฟแวร์เชิงพาณิชย์ ได้แก่การประเมินเกี่ยวกับสิ่งแวดล้อมในหลายด้าน เช่น คาร์บอน ฟุตพริ้นท์ (Carbon Footprint), การบริโภคทรัพยากรและพลังงาน และตัวชี้วัดผลกระทบทางด้านสิ่งแวดล้อม จึงกล่าวได้ว่า LCSoft และการบูรณาการซอฟแวร์สามารถเพิ่มศักยภาพในการวิเคราะห์ปัจจัยทางเศรษฐกิจ ความยั่งยืนและสิ่งแวดล้อมของการออกแบบกระบวนการได้อย่างมีประสิทธิภาพ

ACKNOWLEDGEMENTS

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

Initially I am indebted grateful to Asst. Prof. Pomthong Malakul, my advisor, and Asst. Prof. Kitipat Siemanond, my co-advisor, for providing invaluable knowledge, creative comments, untouchable experience in classroom, and kind support throughout this research work.

I offer my sincerest gratitude to Prof. Rafiqul Gani for giving me the best opportunity of visiting CAPEC, Computer Aided Process-Product Engineering Center, Technical University of Denmark. During I worked in Denmark, he provided invaluable knowledge, creative suggestions, and kind support throughout this research work.

I would like to thank Asst. Prof. Manit Nithitanakul and Assoc. Prof. Dr. Thumrongrut Mungcharoen for being my thesis committee. Their suggestions and comments are very beneficial for me and this work.

This thesis work is funded by the Petroleum and Petrochemical College and the Center of Excellence on Petrochemical and Materials Technology, Thailand.

I greatly appreciate all PPC staffs and my friends who gave me support and encouragement.

Finally, I am deeply indebted to my family for their love, understanding, encouragement, and support for me at all time.

TABLE OF CONTENTS

		PAGE
Title Page		i
Abstract (in English)		iii
Abstract (in Thai)		iv
Acknowledgements		v
Table of Contents		vi
List of Tables		viii
List of Figures		ix
CHAPTER		
I	**INTRODUCTION**	1
II	**LITERATURE REVIEW**	3
	2.1 Life cycle assessment (LCA) for process evaluation	3
	2.2 Sustainability analysis for process evaluation	8
	2.3 Economic evaluation for process evaluation	12
III	**EXPERIMENTAL**	12
	3.1 Materials and Equipment	15
	3.2 Experimental Procedures	15
	3.2.1 Tool 1: Knowledge management and module development	16
	3.2.2 Tool 2: Calculation factor estimation	16
	3.2.3 Tool 3: Calculation of LCA	16
	3.2.4 Tool 4: Integration of LCSoft, ECON and SustainPro	16
	3.2.5 Validation of LCSoft version 2.0	17
	3.2.6 Write manual	17

CHAPTER		PAGE
IV	**RESULTS AND DISCUSSION**	18
	4.1 Tool 1: LCI knowledge management	18
	4.1.1 LCI KB's first level	18
	4.1.2 LCI KB's second level	19
	4.2 Tool 2: Calculation factor estimation	21
	4.2.1 Database	22
	4.2.2 Model performance statics	24
	4.3 Tool 3: Calculation of LCA	25
	4.3.1 Step 1: Check existence	26
	4.3.2 Step 2: Retrieve LCI data	26
	4.3.3 Step 3: Calculate resource and energy consumption	26
	4.3.4 Step 4: Calculate carbon footprint	27
	4.3.5 Step 5: Impact assessment	28
	4.3.6 Additional features	30
	4.4 Tool 4: Integration of LCSoft, ECON and SustainPro	30
	4.4.1 Case study	31
	4.4.2 SustainPro results	31
	4.4.3 LCSoft results	33
	4.4.4 ECON results	36
	4.4 Validation of LCSoft version 2.0	38
	4.5.1 Modeling consideration in LCSoft	38
	4.5.2 Modeling consideration in SimaPro	39
	4.5.3 TRACI method	39
	4.5.4 Cumulative Energy Demand (CED) method	39
	4.5.4 Comparison with commercial software (SimaPro)	40

CHAPTER		PAGE
V	CONCLUSIONS AND RECOMMENDATIONS	41
	REFERENCES	43
APPENDIX		
Appendix A	LCSoft version 2.0 manual	44
Appendix B	Interface of tools integration manual	103
Appendix C	Bioethanol conversion process flowsheet and data for process evaluation	132
Appendix D	LCSoft version 2.0 and interface for SustianPro, LCSoft, and ECON source codes	137
CURRICULUM VITAE		379

LIST OF TABLES

TABLE		PAGE
2.1	Indicators calculated by SustainPro	11
2.2	Most sensitive indicators	11
4.1	Input processes of rice straw production in LCI KB's second level	20
4.2	Resources for rice straw production in LCI KB's second level	21
4.3	Emitted substances of rice straw production in LCI KB's second level	21
4.4	Characterization factors and compartments of environmental impacts	28
4.5	Indicator results of the case study after ordering in SustainPro	33
4.6	Energy consumption results of the case study in LCSoft	34
4.7	Comparative results of bioethanol process between SimaPro and LCSoft	40

LIST OF FIGURES

FIGURE		PAGE
2.1	Input/output data show in inventory data section in LCSoft version 1.0	6
2.2	Carbon footprint and environmental impacts in LCSoft version 1.0	6
2.3	Sustainability metrics	9
2.4	Safety indices	9
2.5	Top indicators ordered by their potential for improvement	11
2.6	Design Sensitivity Analysis	12
2.7	ECON pie chart of equipment cost calculation	13
2.8	Capital cost	14
2.9	Operating cost and total product cost	14
2.10	Economic evaluation	14
3.1	The framework of LCSoft and tools integration	15
4.1	Structure of LCI KB's first level	19
4.2	Structure of LCI KB's second level	20
4.3	Residual distribution plot of $HTNC_{EUA}$	25
4.4	The structure of LCSoft version 2.0	29
4.5	The structure of tools integration	30
4.6	Flowsheet of the case study	31
4.7	LCA boundaries of the case study	34
4.8	Carbon footprint results	35
4.9	Impact assessment results	35
4.10	Total capital investment calculation details	36
4.11	Operating cost calculation details	37
4.12	Pie chart of utility cost	37