

DISS. ETH No. 22077

**Energy analysis of chemical batch plant through advanced
integration of energy conversion, production system and
waste management**

A thesis submitted to attain the degree of

DOCTOR OF SCIENCES of ETH ZURICH
(Dr. sc. ETH Zurich)

presented by

Claude André Rérat

Ing. Chim. Dipl. EFP, Swiss federal Institute of Technology Lausanne

born 19.02.1981

citizen of Fahy (JU)

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. Konrad Hungerbühler, examiner

Prof. Dr. Alexander Wokaun, co-examiner

Dr. Stavros Papadokonstantakis, co-examiner

2014

Abstract

The growing awareness of the society for the environment increasing the pressure for stricter environmental regulations and the increasing energy prices have modified the way chemical industry designs new processes and optimizes existing ones. In response to these challenges process design is moving towards a wider “cradle-to-gate” scope considering the interactions of the main production process with the material and energy supply chains and the waste treatment processes, from a life cycle perspective. This thesis adopts this “cradle-to-gate” scope to study the energy consumption and the life cycle environmental impacts associated with the design and operation of chemical batch plants. The thesis consists of three main blocks of increasing complexity in the modelling and design of chemical batch plants, namely (i) the accurate model-based estimation of the heating and cooling energy consumption in single and multiproduct batch plants, (ii) the optimized waste management and production planning, and (iii) the optimized waste management, production planning and heat integration.

In a first phase a detailed analysis of the energy consumption of several batch processes was performed using model-based estimations and industrial data. This analysis focuses on the modelling of the thermal losses calculated from the difference between the real energy consumption and the theoretical energy demand. The theoretical energy demand is defined based on a detailed energy balance of each unit operation using dynamic plant data. Thermal losses are determined using an empirical parametric equation. The modelling framework has been developed in previous works (Bieler et al., 2005, Bieler et al., 2004, Szijjarto et al., 2008) but was extended to several more batch operations, equipment types and energy utilities. Moreover, several methods to estimate the real energy consumption have been assessed based on valve openings regulating utility flows. This analysis was carried out in two chemical batch production buildings and a bottom-up model of the utility consumptions was built for both theoretical and real energy demand allowing the comparison with the measured consumption of the production building over several weeks. This approach has demonstrated the possibility to monitor the energy consumption of a chemical batch plant with acceptable accuracy (i.e., average relative error of 20%).

In a second phase, the waste management optimisation is addressed. A superstructure consisting of several waste treatments options was generated (i.e., including material recovery from distillation, waste-to-energy thermal oxidation, and waste water treatment). The models for the waste treatment options of the superstructure have been developed in previous works (Capello et al., 2005, Koehler et al., 2006, Seyler et al., 2005) and provide a comprehensive list of life cycle inventories including material and energy utility consumptions and pollutant emissions which are a function of the composition of waste streams. Operating constraints were added to these models to represent empirical industrial limitations for the waste treatment. A multi-objective optimisation was conducted according to financial and ecological objectives to obtain the most promising mixing of waste streams within the superstructure. Two case studies were analyzed. The first one focused on the optimisation of the waste management system independently from the chemical batch plant operation, considering a small set of typical waste streams of the chemical batch plant. It is used as a benchmark to exemplify the optimisation potential for the waste management system. The second one focused on the actual set of waste streams coming from five products divided into two production periods in a multiproduct batch plant. Different allocations of products to the two production periods were studied in the form of a scenario-based analysis. Important reductions in both objectives were demonstrated in the second case study compared to both the standard plant operation and the independent waste management optimisation (first case study). One of the main reduction potential from economic point of view is the use of waste water streams instead of fresh water to dilute streams sent to oxidation processes leading to a reduction of the total amount of waste. The dilution is necessary to fulfil the operating limitations of these treatments. From environmental point of view the distribution of streams with high salts content between oxidation processes reduces both pollution emissions and auxiliaries. The selection of the solvents in the distillation units also presents trade-offs between economic and environmental objectives.

In a third phase a more complex problem including production processes, waste treatments and utility generation was analysed. A multi-objective, multi-period problem was defined dealing with the production planning of several batch processes, the recovery of material and mixing of the resulting waste streams and the heat integration between all hot and cold

streams of the production and waste treatment processes. To increase the computation efficiency, the optimisation procedure is decomposed into a “master” problem for the production planning, and two independent slave sub-problems, for the mixing of waste streams and for the heat integration, following a hierarchical approach. The effect of various optimisation parameters, such as the number of periods, the environmental impact indicator used as objective function and the influence of the real energy consumption for the processes vs. the theoretical one, has been investigated in a scenario based analysis. With respect to the influence of the environmental impact indicators, it was observed that similar Pareto optimal solutions are found in all scenarios, although the trade-off extents between optimal cost and environmental performance is different for each indicator. Therefore, an interesting conclusion is that similar future studies with emphasis on energy use could consider, for example, the less data intensive CED indicator as optimisation objective for an initial screening of high-level design decisions, without significant loss optimality in more holistic environmental impact indicators, such as the EI99.

A higher production planning flexibility (i.e. more production periods) resulted in more feasible and Pareto optimal solutions, which, however, included those of the scenarios with less periods, showing that the integrated system is not locally sensitive to this production planning parameter. Moreover, the influence of more accurate estimations for the energy demand of production processes resulted in different patterns of feasible solutions in the performance domain without however affecting the Pareto-front solutions.

Finally, it should also be mentioned that the analysis of the optimisation results, and especially the decomposition of the operation costs and environmental impacts in various categories, has provided important insights for the design of the system, e.g., the cost-environmental impact trade-offs with respect to the use of excess natural gas, the interdependencies between energy demand as a result of the production planning, incineration capacity and use of wet air oxidation, etc. These findings were not straightforward to infer on the basis of empirical knowledge. This shows the importance of systematic methods to deal with complicated systems to find the optimal solutions and not only those with only a slight improvement.

Résumé

La prise de conscience croissante de la société civile envers l'environnement, a conduit à une pression croissante pour le renforcement de la réglementation environnementale qui, avec la hausse des prix de l'énergie, ont modifiées la manière dont l'industrie chimique conçoit de nouveaux procédés et optimise ceux existants. En réponse à ces défis, la conception des procédés s'est orientée vers un champ plus large d'application, dans une approche incluant le cycle de vie ou du "cradle-to-gate" qui tient compte des interactions du procédé de production principal avec l'approvisionnement en énergie et en matières premières ainsi que du traitement des déchets. Cette thèse utilise cette approche "cradle-to-gate" pour étudier la consommation d'énergie et les impacts environnementaux du cycle de vie associés à la conception et l'exploitation de sites de production chimique batch. La thèse se compose de trois grands blocs de complexité croissante, à savoir (i) l'estimation de la consommation de l'énergie de chauffage et de refroidissement basée sur des modèles détaillés des sites de production chimique batch travaillant en mono- et multi-produits, (ii) la gestion optimisée des déchets et la planification de la production, et (iii) la gestion optimisée des déchets, la planification de la production et de l'intégration de la chaleur.

Dans une première phase, une analyse détaillée de la consommation d'énergie de plusieurs procédés batch a été effectuée à l'aide des estimations basées sur des modèles et des données industrielles. Cette analyse se concentre sur la modélisation des pertes thermiques calculées à partir de la différence entre la consommation d'énergie réelle et la demande d'énergie théorique. La demande d'énergie théorique est définie sur la base d'un bilan énergétique détaillé de chaque opération unitaire en utilisant les données dynamiques des bâtiments de production. Les pertes thermiques sont déterminées en utilisant une équation paramétrique empirique. Le cadre de la modélisation a été développé dans des travaux précédents (Bieler et al., 2005, Bieler et al., 2004, Szijjarto et al., 2008) , mais a été étendu à plusieurs procédés batch, avec des équipements différents et des utilitaires différents dans le cadre de ce travail. En outre, plusieurs méthodes pour estimer la consommation d'énergie réelle ont été évaluées sur la base des ouvertures de vannes de régulation contrôlant les débits des utilitaires.

Cette analyse a été réalisée sur deux bâtiments de production batch et un modèle "bottom-up" des consommations d'utilitaires a été construit pour la demande d'énergie à la fois

théorique et réelle permettant la comparaison avec la consommation mesurée des bâtiments de production sur plusieurs semaines. Cette approche a démontré la possibilité de suivre la consommation d'énergie d'une installation batch avec une précision acceptable (avec une erreur relative moyenne de 20%).

Dans une deuxième phase, l'optimisation de la gestion des déchets est étudiée. Une superstructure composée de plusieurs traitements de déchets a été construite (comprenant le recyclage des solvants via la distillation, le traitement thermique des déchets en énergie, et le traitement des eaux usées). Les modèles des traitements de déchets ont été développés sur la base de travaux antérieurs (Capello et al., 2005, Koehler et al., 2006, Seyler et al., 2005) et fournissent un inventaire exhaustive des consommations de matières premières et d'énergie, de même que les émissions de polluants, qui sont fonction de la composition des flux de déchets. Les contraintes d'exploitation ont été incluses aux modèles empiriques représentant les limites industrielles propres à chaque traitement de déchets. Une optimisation multi-objectifs a été réalisée en fonction d'indicateurs financier et écologique pour obtenir les mélanges des flux de déchets les plus intéressants au sein de la superstructure. Deux études de cas ont été analysées. La première a porté sur l'optimisation du système de gestion des déchets indépendamment du fonctionnement discontinu de l'usine chimique, en tenant compte d'un petit ensemble de flux de déchets typiques d'un site de production. Elle est utilisée comme point de référence pour illustrer le potentiel d'optimisation pour le système de gestion des déchets. La seconde est axée sur la gestion de l'ensemble des flux de déchets provenant de cinq procédés divisés en deux périodes de production. Différentes allocations de procédés sur les deux périodes de production ont été étudiées dans le cadre d'une analyse basée sur des scénarios définis. D'importantes réductions des deux indicateurs ont été démontrées dans la deuxième étude de cas comparée au fonctionnement standard de l'installation et à l'optimisation de la gestion des déchets sans contraintes (première étude de cas). L'une des principales réductions potentielles du point de vue économique est l'utilisation des eaux usées à la place d'eau propre pour diluer les flux envoyés aux procédés de traitement thermique permettant une réduction de la quantité totale de déchets à traiter. La dilution est nécessaire pour respecter les limites de fonctionnement de ces traitements. Du point de vue environnemental, la distribution de flux avec une teneur en sels élevée entre les procédés de traitement

thermique réduit les émissions polluantes et la consommation des auxiliaires. Le choix des solvants traités dans les unités de distillation implique également des solutions contradictoires en terme d'objectifs économiques et environnementaux.

Dans une troisième phase, un problème plus complexe comprenant les procédés de production, les traitements de déchets et la production d'utilitaire a été analysé. Un problème multi-périodes a été défini traitant de la planification de plusieurs procédés batch avec dans chaque période la gestion des déchets et l'intégration de chaleur entre les courants chauds et froids (issus des procédés de production et des traitements de déchets). Pour simplifier la résolution de ce système complexe, le problème d'optimisation est décomposé en un problème maître pour la planification de la production, et deux sous-problèmes esclaves indépendants, pour le mélange des flux de déchets et pour l'intégration de la chaleur, suivant une approche hiérarchique.

Ce problème a été ensuite utilisé pour comparer différents paramètres d'optimisation tels que le nombre de périodes, le choix de l'indicateur environnemental ou l'influence de la consommation réelle d'énergie pour les procédés par rapport celle théorique. L'effet du choix de l'indicateur environnemental montre que plusieurs solutions optimales se retrouvent dans toutes les courbes de Pareto, mêmes si des solutions sont propres à chaque indicateur. Ainsi, on peut conclure qu'il est possible de traiter des problèmes d'optimisation avec l'indicateur sur la demande cumulative en énergie (CED, cumulative energy demand) comme première approche de sélection, avec comme avantage une réduction des besoins en données, sans perdre les solutions optimales que fournirait un indicateur holistique tel que l'éco-indicateur 99.

Une plus grande flexibilité dans la planification via un plus grand nombre de périodes conduit à plus de solutions optimales, incluant toutefois les solutions déjà obtenues dans le cadre d'une planification à faible nombre de période. Ceci indique que le système n'est pas sensible à la planification en tant que paramètre d'optimisation. De plus, l'influence d'une meilleure estimation des besoins énergétiques dans la production modifie l'ordre des solutions possible sans toutefois affecter les solutions du front de Pareto.

Finalement, l'analyse des résultats and plus particulièrement la décomposition des coûts de fonctionnement et des impacts environnementaux en plusieurs catégories montre plusieurs effets dans le design du système (comme le compromis de la consommation de gaz naturel en

terme économique et environnementaux, les conséquences du choix de la planification sur la demande énergétique et les différentes manières d'y répondre par l'incinération, l'oxydation par voie humide ou la production de vapeur, etc.) qui ne se déduisent pas de manière directe sur la base d'une connaissance empirique. Ceci montre l'importance d'une méthode systématique pour traiter des systèmes de grande complexité et pour dépasser le choix des solutions les plus simples via une utilisation complète du potentiel de l'optimisation.