DEVELOPMENT OF SOFTWARE FOR LIFE CYCLE ASSESSMENT

Sarayut Piyarak

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
2012

I 28373959

Thesis Title:	Development of software for life cycle assessment
By:	Sarayut Piyarak
Program:	Petroleum Technology
Thesis Advisors:	Asst. Prof. Pomthong Malakul
	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)

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

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

.....
(Dr. Thawach Chatchupong)

.....
(Prof. Rafiqul Gani)

บทคัดย่อ

สรายุธ ปิยะรักษ์ : การพัฒนาซอฟแวร์สำหรับการประเมินวัฏจักรชีวิต (Development of software for life cycle assessment) อ. ที่ปรึกษา: ผศ. ดร. ปมทอง มาลากุล ณ อยุธยา, ผศ. ดร. กิติพัฒน์ สีมานนท์ และ ศ.ดร. ราฟิก กานี่ 161 หน้า

เป็นที่ทราบกันดีว่าสังคมในปัจจุบันนั้นมีความเป็นห่วงและสนใจในเรื่องของสิ่งแวดล้อม และสุขภาพความเป็นอยู่ของมนุษย์มากขึ้น ดังนั้นการประเมินผลกระทบด้านสิ่งแวดล้อมจึงเป็นสิ่งจำเป็นสำหรับการออกแบบและพัฒนากระบวนการทางเคมีและการผลิตของโรงงานต่างๆ เครื่องมือที่มีประสิทธิภาพในการประเมินผลกระทบด้านสิ่งแวดล้อมอย่างหนึ่งคือการประเมินวัฏจักรชีวิต (Life Cycle Assessment) วัตถุประสงค์ของงานวิจัยนี้คือ การพัฒนาซอฟแวร์สำหรับการประเมินวัฏจักรชีวิตเพื่อใช้เป็นเครื่องมือสนับสนุนการออกแบบและจำลองกระบวนการ ซอฟแวร์ถูกออกแบบให้เป็นซอฟแวร์ที่ปฏิบัติการบนโปรแกรม Microsoft Excel และถูกพัฒนาโดยใช้ Visual Basic for Application ในการเขียนโปรแกรมบนพื้นฐานของแบบจำลองการคำนวณที่มีอยู่แล้วในปัจจุบัน ส่วนประกอบหลักของซอฟแวร์นี้ประกอบไปด้วยแบบจำลองการคำนวณสำหรับคำนวณรายการต่างๆในการประเมินวัฏจักรชีวิต แผนผังการทำงานของโปรแกรมเพื่อช่วยแนะแนวทางให้กับผู้ใช้งาน และหน้าปฏิบัติการสำหรับการสื่อสารกับผู้ใช้งาน ฐานข้อมูลของซอฟแวร์ประกอบไปด้วยแบบจำลองการคำนวณทั้งหมด 34 แบบ รวมถึงการคำนวณผลกระทบทางสิ่งแวดล้อม 8 กลุ่ม (เช่น ภาวะโลกร้อน การลดลงของชั้นโอโซน เป็นต้น) ซอฟแวร์นี้ถูกออกแบบมาเพื่อใช้งานร่วมกับ PROII ซึ่งเป็นโปรแกรมที่ใช้ในการออกแบบและจำลองกระบวนการ ในการศึกษานี้ได้เลือกแบบแปลนของกระบวนการผลิตอเซตาลดีไฮด์และเอทานอลชีวภาพ เพื่อใช้เป็นกรณีศึกษาในการคำนวณผลกระทบทางสิ่งแวดล้อม โดยการคำนวณนี้ใช้ทั้งการคำนวณโดยมือ, โดยซอฟแวร์ที่สร้างขึ้น และโดยโปรแกรม SimaPro จากนั้นจึงนำผลการคำนวณมาเปรียบเทียบกันเพื่อยืนยันความถูกต้องของกระบวนการคำนวณของซอฟแวร์ โดยผลลัพธ์ที่แสดงประกอบไปด้วยการปลดปล่อยสารจากกระบวนการ 13 ชนิด ตัวชี้วัดผลกระทบทางด้านสิ่งแวดล้อม 8 ตัวชี้วัดจากทั้งหมด 8 กลุ่ม และปริมาณการปล่อยก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์จากกระบวนการ

ABSTRACT

5373018063: Petroleum Technology Program
Sarayut Piyarak: Development of Software for Life Cycle Assessment
Thesis Advisors: Asst. Prof. Pomthong Malakul, Asst. Prof. Kitipat Siemanond, and Prof. Rafiqul Gani 161 pp.
Keywords: Process design/ Life cycle assessment/ LCA software

As modern society has become more concerned about the issues of environment and human health, an environmental impact assessment is required in addition to process design for the development of chemical processes and manufacturing plants. One effective tool for an environmental assessment is Life Cycle Assessment (LCA). The purpose of this work was to develop LCA software to be an assisting tool for process design and simulation. This software was designed to be an Excel-based program, developed by Microsoft Visual Basic for Application (VBA), based on existing calculation models. The main components of this LCA software are: a library containing models for calculations of different LCA-items, a work-flow to guide users and a user-interface. The database includes 8 impact categories (such as global warming, ozone depletion, etc.) and 34 equations. The program was designed to work with PROII simulation program to calculate the environmental impacts. In this study, the acetaldehyde production and bio-ethanol process flowsheet was selected as a model for input data to calculate environmental impact of the process. The calculation procedure was performed by hand calculations, developed software and SimaPro in order to compare the results and verify the calculation procedure of the software. The outputs were designed to include 13 emission substances, 8 impact indicators from eight impact categories as well as the carbon footprint for the designed process.

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 Dr. Thawach Chatchupong 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**	2
III	**EXPERIMENTAL**	17
	3.1 Materials	17
	3.2 Methodology	17
	3.2.1 Literature Review	17
	3.2.2 Develop Calculation Model of LCI and LCIA for Program	17
	3.2.3 Software Design and Development	18
	3.2.4 Final Validation	18
	3.2.5 Write Manual	18
IV	**RESULTS AND DISCUSSION**	19
	4.1 Calculation Model	19
	4.1.1 Emission Calculation Model	20
	4.1.2 Energy and Fuel Consumption Model	26
	4.1.3 Environmental Impact Model	27

CHAPTER **PAGE**

4.2 Software Design 31
4.2.1 Software Architecture 31
4.2.2 Activity Diagram 33
4.3 LCSoft Development 36
4.3.1 Main Menu 36
4.3.2 Input Data 37
4.3.3 Generate Inventory Data 41
4.3.4 Carbon Footprint 42
4.3.5 Impact Assessment 43
4.3.6 Result 43
4.3.6.1 Carbon Footprint Result 43
4.3.6.2 Impact Assessment Result 43
4.4 Validation 45
4.4.1 Comparative Inventory Data 46
4.4.2 Comparative Carbon Footprint Results 48
4.4.3 Comparative Impact Assessment Results 49
4.4.4 SimaPro Comparison 50

V **CONCLUSIONS AND RECOMMENDATIONS** 52

REFERENCES 53

APPENDIX 54
Appendix A LCSoft Manual 54
Appendix B Acetaldehyde Production Process 75
Appendix C Hand Calculation 83
Appendix D LCSoft Source Code 99

CURRICULUM VITAE 164

LIST OF TABLES

TABLE		PAGE
2.1	List of Impact Categories and Endpoints that Identify the Impacts	6
2.2	Impact Categories and Impact Characterized Detail	8
4.1	Equations Use to Develop LCSoft	19
4.2	Comparative Emission from Raw Material of Acetaldehyde Process between Hand Calculation and LCSoft	46
4.3	Comparative Emission from Energy of Acetaldehyde Process between Hand Calculation and LCSoft	47
4.4	Comparative Emission from Utility of Acetaldehyde Process between Hand Calculation and LCSoft	47
4.5	Comparative Total Energy Consumption of Acetaldehyde Process between Hand Calculation and LCSoft	48
4.6	Comparative Energy Consumption for Product of Acetaldehyde Process between Hand calculation and LCSoft	48
4.7	Comparative Fuel Consumption of Acetaldehyde Process between Hand Calculation and LCSoft	48
4.8	Comparative Carbon Footprint of Acetaldehyde Process between Hand Calculation and LCSoft	49
4.9	Comparative Impact Assessment of Acetaldehyde Process between Hand Calculation and LCSoft	49
4.10	Comparative Results of Bio-Ethanol Process between SimaPro and LCSoft	50
B1	Stream Summary of Acetaldehyde Production Process	76
B2	Equipment Table of Acetaldehyde Production Process	80

LIST OF FIGURES

FIGURE		PAGE
2.1	Life Cycle and Input/Output Material for One Product/Process.	3
2.2	User Interface of Microsoft Excel ver.2010 Program.	15
2.3	Visual Basic for Application Interface.	16
4.1	LCSoft Architecture.	31
4.2	Activity Diagram of LCSoft.	34
4.3	Main Menu Interface.	36
4.4	Input Data Interface.	37
4.5	Define Input/Output Stream Page.	38
4.6	Utility Entry Page.	38
4.7	Utility Entry Form.	39
4.8	Define Product and Functional Unit Page.	39
4.9	Add by Product Form.	40
4.10	Fuel Use Form.	40
4.11	Input/Output Data Show in Inventory Data Page.	41
4.12	Inventory Data.	41
4.13	Carbon Footprint Estimation Page.	42
4.14	Results Form.	43
4.15	Carbon Footprint Result.	44
4.16	Impact Assessment Results.	44
4.17	Acetaldehyde Production Process Flowsheet.	45
A1	Main Menu Page.	54
A2	Input Data Interface.	55
A3	Import Stream Table Button.	56
A4	Open File Window.	56
A5	Stream Table Format.	57
A6	Confirmation Form.	57

FIGURE **PAGE**

A7	Import Equipment Table Button.	58
A8	Equipment Table Format.	59
A9	Define Stream Name Button.	59
A10	Define Stream Page.	60
A11	Hot/Cold Utility Button.	60
A12	Utility Entry Form.	61
A13	Utility Entry Page.	61
A14	Define Product and Functional Unit Page.	62
A15	Add by Product Form.	62
A16	Type of Fuel Button.	63
A17	Fuel Use Form.	63
A18	Energy and Type of Fuel Use in Process Show on Input Data Page.	64
A19	Select Country Box.	64
A20	Text Box for Input Energy from Renewable.	65
A21	Main Menu Interface with Enabled Button.	66
A22	Input/Output Data Show in Inventory Data Page.	66
A23	Calculated Inventory Data and "Calculate" Button.	67
A24	Carbon Footprint Page.	68
A25	Equipment Data from Equipment Table.	68
A26	Define Energy Source Form.	69
A27	Specified Information.	70
A28	Impact Assessment Button.	71
A29	Impact Assessment Result.	71
A30	Results Form.	72
A31	Carbon Footprint Result Page.	72
A32	Modify Database Button.	73
A33	Modify Database Form.	73
A34	Restart Button.	74

FIGURE **PAGE**

B1 Acetaldehyde Production Process Flowsheet. 75