

Diss. ETH Nr. 13337

**Unsicherheits- und
Sensitivitätsberechnung in der frühen
Kostenschätzung von Batchverfahren
unter besonderer Berücksichtigung der
Abfallentsorgung**

Abhandlung

Zur Erlangung des Titels

Doktor der Technischen Wissenschaften

der

Eidgenössischen Technischen Hochschule Zürich

vorgelegt von

Pierre Dimmer

Dipl. Chem.-Ing. ETH

geboren am 1. Januar 1971

von Luxemburg

angenommen auf Antrag von

Prof. K. Hungerbühler, Referent

Prof. Ph. Rudolf von Rohr, Korreferent

Zürich, 1999

Abstract

Early cost estimation is beside ecological and safety evaluation an essential aspect of an integrated process development. Especially in the field of fine chemicals custom production such cost estimations have to be quick and efficient for the selection of commercially promising processes and for identifying commercial risks.

Purpose of this work is the extension of existing economic evaluation tools for batch processes in multiproduct plants. This was accomplished through the development of a batch process flowsheet simulator, which enables cost calculation given uncertain input parameters. The work focuses on two topics: cost estimation of a given batch process and computerized choice of the best waste treatment path.

As commercially available flowsheet simulators did neither allow to incorporate statistically distributed input parameters nor to determine automatically the most economical waste treatment path, a new flowsheet simulator was built up in MATLAB 5 to accomplish cost estimations. The modular structure of the software guarantees the flexibility required to represent batch process flowsheets. Reaction, separation and other modules are represented as linear transfer functions, which can be connected in a highly flexible way by the material streams. These transfer functions either have to be predefined or are the result of short-cut estimations.

The waste treatment selection is implemented in a specialized module, which can be used in two ways: either as a submodule of the flowsheet simulator, which calculates automatically the waste treatment costs of a given process, or as a stand alone software for evaluating disposal possibilities of a given waste. The software chooses the cheapest among legal treatments given a predefined waste treatment infrastructure. Doing this, the tool differentiates between central treatment (sewage treatment and incineration plant) and dedicated pretreatments (rectification, stripping, precipitation).

Both, the flowsheet simulator and the waste treatment selector, allow the calculation of statistically distributed output variables (e.g.

costs, product output). The calculation of the distributions is performed by means of Monte Carlo simulation in MATLAB 5. MATLAB's matrix calculation capabilities enable to use vectors as input to the model, each containing the randomly sampled values of an input variable. In this way it is possible to perform fast calculation using concise notation. Furthermore, the software conducts probabilistic sensitivity analysis allowing to identify the most important parameters. Thus the tool not only allows to estimate costs quickly, but also to increase the efficiency of the development process by indicating the relevant variables on which future investigations should focus.

The analysis of different case studies using the flowsheet simulator and the waste treatment selector showed the necessity of such flexible tools. As a result of these calculations raw material, plant and labor costs were recognized as the largest cost shares, but a generalisation of the absolute cost figures is not possible. Storage respectively change over costs show large deviations depending on the value of raw materials respectively production times. Also waste treatment costs vary strongly due to unknown component properties in the waste pretreatment operations. The sensitivity analysis revealed raw material prices, reaction yields and separation factors in the product conditioning to be the most important variables. Nevertheless, the absolute values of the sensitivity coefficients vary from case to case. Raw material prices and investment showed largely different coefficients in the examined cases. This demonstrates again, how useful the specific analysis of each process is.

The examined waste cases illustrate one major problem in the assessment of waste originating from batch processes: batch processes often produce small amounts (compared to the total amount of waste produced at a site) of specific waste, which might violate the internal concentration limits. The problem is solved by introducing daily loads allowed to be emitted by each process. An additional problem consists in the cost allocation to this kind of waste streams in central waste treatment units like the sewage treatment plant or the central incinerator. A fair cost allocation is proposed through a mixed calcu-

lation of the costs incorporating different factors like hydraulic load, salt concentration and TOC. The sensitivity analysis revealed, that the violation of concentration limits leads to drastic variations in costs, because alternative waste treatment paths have to be chosen.

The flowsheet simulator is intended to be used in very early process evaluations, especially suited for fast determination of sensitivity coefficients. There the waste treatment tool can provide a fast estimation of the waste treatment costs, but for a deeper analysis of different treatment pathes it still can be used during pilot plant operations.

Zusammenfassung

Die frühe Kostenschätzung ist neben der Beurteilung von Umweltschutz und Sicherheit ein wichtiger Bestandteil der integrierten Entwicklung chemischer Verfahren. Dies gilt insbesondere auch für die Lohnproduzenten, welche im Auftrag Wirkstoffe und Zwischenprodukte herstellen. Sie sind auf eine schnelle und effiziente Kostenschätzung angewiesen, welche frühzeitig die kommerziell vielversprechenden Projekte sowie deren wirtschaftliche Risiken identifiziert.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde, zur Erweiterung der bestehenden Tools zur ökonomischen Bewertung von Batchverfahren in Mehrproduktanlagen, ein Flowsheetsimulator entwickelt. Dieser berücksichtigt insbesondere die Unsicherheit in der Kostenschätzung sowie die Abfallentsorgung. Diese Themenschwerpunkte umfassen (1) den Aufbau des Programmes zur Abbildung und Berechnung eines Produktionsverfahrens sowie (2) die Erarbeitung einer computerunterstützten Berechnung und Auswahl des optimalen Entsorgungsweges.

Da die bestehenden kommerziellen Flowsheetsimulatoren von Batchverfahren weder den direkten Einbezug von statistischen Verteilungen in die Berechnung noch die automatisierte Auswahl des Entsorgungsweges ermöglichen, wurde ein eigener Simulator in MATLAB entwickelt. Der modulare Aufbau dieses Flowsheetsimulators erlaubt die Darstellung von flexibel konfigurierten Batchverfahren. Die Anlageeinheiten (Kessel, Zentrifugen, Trockner, ...) sowie die Operationen (Mischen, Reagieren, Trennen, Belegen) bilden jeweils eigenständige Module, welche über die Materialströme verbunden sind. Die Massenbilanzen werden jeweils an die maximale Kapazität des Anlagebottlenecks angepasst. Basierend auf der berechneten Leistung wird die Kostenrechnung erstellt.

Das entwickelte Instrument zur Auswahl des Entsorgungsweges der Abfälle und zur Berechnung der Entsorgungskosten kann als Untermodul des Flowsheetsimulators eingesetzt werden oder als eigenständiges Programm zur Beurteilung der Entsorgung der Abfälle von Batchverfahren genutzt werden. Innerhalb einer gegebenen Entsorgungsinfra-

struktur bestimmt es den billigsten, legalen Weg zur Entsorgung eines Abfallstromes. Bei Bedarf wird der Abfall einer dezentralen Vorbehandlung (Rektifikation, Stripping, Fällung,...) unterzogen, bevor er den zentralen Behandlungen (ARA, RVA) zugeführt wird.

Beide Tools, Gesamtprogramm und Entsorgung, erlauben die Berechnung einer statistisch verteilten Kostenzielfunktion, aufgrund der Angabe von verteilten Variablen und Verfahrensparametern. Diese Berechnung erfolgt mittels Monte-Carlo Simulation, welche durch die Matrizenberechnungen in MATLAB 5 sehr zeiteffizient durchgeführt werden kann. Problematisch kann die Bestimmung der Verteilung der Eingabevariablen sein: oft fehlen historische Daten oder Literaturwerte. Dank den mit Monte-Carlo Simulation generierten Daten kann in einem ersten Schritt eine Sensitivitätsanalyse zur Bestimmung der Relevanz der einzelnen Variablen durchgeführt werden. Damit kann abgeklärt werden, ob es wichtig ist die Verteilung einer bestimmten Variable zu kennen. Für die als einflussreich erkannten Variablen können dann in einem zweiten Schritt vertiefte Untersuchungen angestellt werden. Somit lässt sich das Programm nicht nur zur schnellen Kostenabschätzung, sondern auch zur optimalen Allokation der Entsorgungsmittel einsetzen.

Anhand verschiedener Fallbeispiele konnte die praktische Einsatzfähigkeit des Gesamtprogrammes und des Entsorgungstools bestätigt werden.

Die untersuchten Abfallbeispiele illustrieren das Problem der Bewertung mengenmässig kleiner (im Vergleich zur gesamten Werksabfallmenge), dafür aber öfters die internen Konzentrationsgrenzwerte überschreitenden Abfallströme, welche charakteristisch für Batchverfahren sind. Um dieses Problem zu umgehen, wird anstatt der Konzentrationswerte die Tageslast pro Verfahren und Problemstoff zur Beurteilung eingesetzt. Zudem wird die Berechnung der Kosten der zentralen Abfallbehandlung (in Kläranlage und Reststoffverbrennung) dieser Abfälle mit einer Mischrechnung, welche mehrere Faktoren wie hydraulische Last, Masse, Menge einzelner Substanzen etc. miteinbezieht, um eine möglichst gerechte Kostenallokation zu erlauben. Es wurde festgestellt,

dass die Überschreitung von Grenzwerten zu markanten Kostenschwan-
kungen in der Abfallentsorgung führt, da dies zur Wahl eines alterna-
tiven Entsorgungsweges zwingt.

Die Berechnung der beiden Verfahrensbeispiele Aspirin- und Keto-
profensynthese mit dem Flowsheet Simulator zeigen die Notwendigkeit
dieses flexiblen Tools. Rohmaterial-, Anlage- und Personalkosten sind
die grössten Kostenblöcke, eine Verallgemeinerung bezüglich konkreter
Kostenanteile lässt sich aber nicht machen. So können z. B. Lager bzw.
Umstellungskosten abhängig von Art der Rohmaterialien bzw. Kam-
pagnenlänge sehr stark schwanken. Auch die Entsorgungskosten zeigen
eine grosse Variationsbreite aufgrund unbekannter Stoffeigenschaften in
der Abfallaufbereitung. Die gesamten Kosten zeigen eine starke Sensi-
tivität bezüglich der Eduktpreise, der Ausbeuten und der Trennungsko-
effizienten in der Produktaufarbeitung. Dabei muss aber beachtet wer-
den, dass die Werte der Sensitivitätskoeffizienten von Fall zu Fall vari-
ieren. So zeigen z. B. Eduktpreis und Investition stark unterschiedliche
Koeffizienten im Aspirin- bzw. Ketoprofenbeispiel. Dies zeigt wie sinn-
voll eine spezifische Untersuchung der einzelnen Fallbeispiele ist.

Der Einsatzbereich des Gesamtprogrammes liegt sicher in der sehr
frühen Verfahrensbewertung (erste Kundenanfrage, Vorevaluation) und
Bestimmung der Sensitivitäten. Das Entsorgungstool kann auch im
frühen Stadium zu einer schnellen Kostenschätzung eingesetzt werden.
Wird es zusätzlich zu vertieften Untersuchungen der Entsorgungswege
eingesetzt, kann sich sein Einsatzbereich bis zur Verfahrenspilotierung
erstrecken.