

Forschungsprogramm  
Umgebungs- und Abwärme,  
Wärme-Kraft-Kopplung (UAW)

# **Abfalllösungsmittelbewirtschaftung in der chemischen Industrie**

## **Ein ökologischer Vergleich von Rektifikation und Verbrennung**

ausgearbeitet durch  
**Thomas B. Hofstetter**  
**Laboratorium für Technische Chemie**  
**ETH Hönggerberg**  
**8093 Zürich**  
[hofstetter@tech.chem.ethz.ch](mailto:hofstetter@tech.chem.ethz.ch)

im Auftrag des  
**Bundesamtes für Energie**



## VORWORT ZUM SCHLUSSBERICHT

Im Rahmen des Projekts 'Abfalllösungsmittelmanagement in der chemischen Industrie' wurden unterschiedliche Aspekte des ökologischen Umgangs mit Abfalllösungsmitteln (ALM) untersucht, um schliesslich aus ökologischer Sicht die Abfalllösungsmittelverbrennung und -rektifikation verschiedener Gemische zu bewerten. Dieser Bericht greift die wichtigsten Ergebnisse verschiedener Studien dieses Projekts auf, die über

- das betriebliche und ökonomische Umfeld für ein Abfalllösungsmittelmanagement (5),
- das Life-Cycle Assessment (LCA) der Abfalllösungsmittelverbrennung und deren inputabhängige Modellierung (19) (Fertigstellung im Sommer 2002) sowie
- das LCA der Rektifikation des Fallbeispiel-Lösungsmittelgemisches und einen ersten Vergleich der ALM-Verbrennung und Rektifikation (8)

angefertigt wurden. Schwerpunkt des Schlussberichtes bildet der Vergleich der beiden ALM- Behandlungsmethoden aus ökologischer Sicht. Dazu wurden ein Verfahren zur vergleichenden ökologischen Bewertung von Verbrennung und Rektifikation entwickelt und auf fünf exemplarische Gemische angewendet. Durch die Identifikation von wichtigen Lösungsmiteleigenschaften und Prozessparametern kann nun die Entscheidung, welche der beiden Behandlungsoptionen aus ökologischer Sicht vorteilhafter ist, mit dem vorgeschlagenen Verfahren wissenschaftlich abgestützt werden.

Der vorliegende Bericht ist dank der engagierten Mitarbeit von Diplomanden und Doktorierenden der Gruppe für Umwelt- und Sicherheitstechnologie der ETH Zürich zustande gekommen. Dafür danken wir Christian Bruder, Christian Capello und Christina Seyler-Jahn.

Dieses Projekt hat stark von der Zusammenarbeit mit dem Bundesamt für Energie und der chemischen Industrie, d.h. den Firmen Valorec Services AG, Hoffmann-La Roche AG, EMS Dottikon AG, und Siegfried AG profitiert. Neben dem zur Verfügung stellen wichtiger Daten über die beiden Prozesse hat die Expertise der verschiedenen Fachleute, die in verschiedenen Treffen der Begleitgruppe in dieses Projekt einfliessen konnte, entscheidend zum Gelingen des Projekts beigetragen. Unser Dank für diese Kooperation gilt den Herren

- Martin Zogg als Projektbegleiter des Bundesamtes für Energie
- Daniel Aegerter, Beat Badertscher, Niklaus Rickenbach, Roland Unger, Jürg Schneider von Valorec Services AG,
- Klaus Berger und Hans-Peter Isenring von Hoffmann-La Roche AG,
- Roland Hagebucher und Guido Huber von EMS Dottikon AG,
- Walter Fiechter, Felix Geissmann, H. Joos und Erich Weder von Siegfried AG.

Zürich, Juni 2002

Thomas Hofstetter (stv. Projektleiter)  
Konrad Hungerbühler (Projektleiter)

## ZUSAMMENFASSUNG

Sollen Abfalllösungsmittel (ALM) in der chemischen Industrie verbrannt oder wiedergewonnen werden, wenn eine solche Entscheidung nach ökologischen Kriterien getroffen werden kann? Im Projekt 'Abfalllösungsmittelmanagement in der chemischen Industrie' wurde mittels Life-Cycle Assessment (LCA, Ökobilanz) untersucht, ob die thermische oder die stoffliche Verwertung von ALM-Gemischen aus ökologischer Sicht vorteilhafter ist.

Anhand von je einem Fallbeispiele für die ALM-Verbrennung und -Rektifikation in der chemischen Industrie konnten die ökologisch relevanten Prozesse in einem Bewertungsverfahren abgebildet werden, dass verschiedene Schadensbewertungsmethoden des LCA berücksichtigt. Da die ökologische Bewertung der ALM-Behandlungsoptionen stark von Gutschriften für erzeugte Energie bzw. wiedergewonnenem Lösungsmittel abhängt, können mit dem Bewertungsverfahren verschiedene Szenarien für die werksinterne und -externe Energieversorgung evaluiert werden. Für dieses Verfahren waren Annahmen betreffend des Rektifikationsprozesses sowie der in der Rektifikation angestrebten Produktreinheit und -ausbeute nötig, die eine Anwendung der Aussagen auf beliebige ALM-Gemische allerdings einschränken.

Das Bewertungsverfahren wurde auf fünf exemplarische ALM-Gemische angewendet, die als Hauptkomponenten entweder Toluol, Aceton, Methanol, Wasser oder ein Gemisch von Benzol und Toluol enthielten. Dabei zeigte sich, dass die Rektifikation von ALM einer Verbrennung vorzuziehen ist, wenn damit Lösungsmittel wie Aceton wiedergewonnen werden können, deren petrochemische Herstellung mit einer grossen Umweltbelastung verbunden ist. Die Energieerzeugung durch die ALM-Verbrennung ist dagegen für Lösungsmittel wie Toluol aus ökologischer Sicht vorteilhafter.

Die Resultate der Evaluation von fünf ALM-Gemischen hängt von den unterschiedlichen Methoden der Schadensbewertung im LCA ab. Wird der Verbrauch von nicht-erneuerbaren Ressourcen wie in der Methode Eco-Indicator 99 oder dem Primärenergieverbrauch stark gewichtet, lohnt sich eine Rektifikation Basischemikalien wie Toluol, wenn die ALM-Gemische bei diesem Prozess nicht mit viel Energie aufgetrennt werden müssen. Steht dagegen die Bewertung von Emissionen in Luft und Wasser wie in der Methode der ökologischen Knappheit im Vordergrund, ist die Verbrennung von Basischemikalien oft ökologisch besser.

Die Auswertung der fünf sehr unterschiedlichen ALM-Gemische zeigt, dass das Verfahren für die Berechnung der Umweltbelastung der ALM-Verbrennung und -Rektifikation wichtige Lösungsmiteleigenschaften richtig bewertet. Da nur wenige Parameter des ALMs und des Rektifikationsrückstands für die Berechnung der Umweltbelastung bekannt sein müssen - die relevanten Grössen sind die Verbrennungsenthalpie, der Kohlenstoff- und Wassergehalt, der Dampfbedarf in der Rektifikation und die Umweltbelastung der petrochemischen Lösungsmittelherstellung - kann das Verfahren einfach angewendet werden. Für eine Evaluation der Praxistauglichkeit des Bewertungsverfahrens muss dieses noch an weiteren Fallbeispielen für die Rektifikation validiert werden.

Diese Untersuchung hat zudem gezeigt, dass neben Bewertungsverfahren für die ALM-Verbrennung und -Rektifikation auch zuverlässige Daten für die Stoff- und Energieflüsse der petrochemischen Lösungsmittelherstellung nötig sind. Solche Daten sind nur wenige publiziert. Deshalb müssen für eine Erweiterung der Aussagekraft und Anwendbarkeit des Bewertungsverfahrens von ALM-Behandlungsoptionen solche Datensätze neu erfasst oder modelliert werden.

Diese Arbeit ist im Auftrag des Bundesamtes für Energie entstanden. Für den Inhalt und die Schlussfolgerungen ist ausschliesslich der Autor dieses Berichtes verantwortlich.

## ABSTRACT

An important environmental issue concerning the waste solvent management in the chemical industry is the question whether waste solvents should be incinerated or distilled. The goal of this study was to evaluate different waste solvent mixtures with respect to their ecologically preferable treatment option. To this end, we analyzed two case studies, a waste solvent incineration plant and a batch distillation column, in order to set up a simplified evaluation model for these two treatment options.

The treatment options can be analyzed based on three different impact assessment method, i.e., the Eco-Indicator 99, the method of ecological scarcity, and primary energy demand. Since an evaluation of waste solvent incineration and -distillation highly depends on the type and amount of avoided products, i.e., energy produced in the incineration process, different scenarios for the energy supply can be considered in the model. However, since process conditions of solvent distillation are very case specific, our model is based on certain assumptions concerning solvent purity and -yield and, thus, cannot be applied for the evaluation of any kind of solvent mixture.

The evaluation model of waste solvent treatment was applied to five solvent mixtures, whose main components were toluene, acetone, methanol, water and a combination of benzene and toluene. Distillation is the preferable treatment option if the impact of the petrochemical solvent production is high (e.g., acetone). In general, results of the evaluation depend on the impact method chosen. If resource consumption is more important, distillation is the better option even for basic chemicals like toluene, unless distillation is energy intensive. In contrast, if emissions to air and water are considered more important, incineration of basic chemicals scores better due to the high impact of the avoided products.

The results of the project show that besides an accurate evaluation model for the two treatment options, life-cycle inventories (LCI) for the petrochemical solvent production are limited and may compromise the applicability of the model for the evaluation of other waste solvent mixtures. Future work will therefore have to address (i) the reliability of the model in the chemical industry with further case studies and (ii) the availability of solvent LCIs.

This project has been done on behalf of the Swiss Federal Office of Energy. The Swiss Federal Office of Energy assumes no responsibility for the content and the conclusions of this report.



## INHALTSVERZEICHNIS

Vorwort zum Schlussbericht	i
Zusammenfassung	ii
Abstract	iii
Inhaltsverzeichnis	v
<b>1 EINLEITUNG</b>	<b>1</b>
<b>1.1 Abfalllösungsmittelmanagement in der chemischen Industrie und umweltorientierte Fragestellungen</b>	<b>1</b>
<b>1.2 Ziele der Arbeit</b>	<b>2</b>
<b>1.3 Vorgehen</b>	<b>2</b>
1.3.1 Von der Wahl der Fallbeispiele zum Berechnungsverfahren für die Umweltbelastung der zwei ALM-Behandlungsoptionen	2
1.3.2 Wahl der Fallbeispiele	3
1.3.3 Vorgehen bei der Erstellung eines Systemmodells	5
1.3.4 Szenarien für Energieversorgung und Produktgutschriften	5
<b>2 DATEN UND METHODEN</b>	<b>9</b>
<b>2.1 Life-Cycle Assessment des Fallbeispiels</b>	<b>9</b>
<b>2.2 Daten</b>	<b>9</b>
2.2.1 Abfalllösungsmittelverbrennung	9
2.2.2 Rektifikation von Abfalllösungsmittel	10
<b>2.3 Modellierung mittels LCA-Software</b>	<b>10</b>
<b>2.4 Bewertungsmethoden</b>	<b>11</b>
<b>2.5 Aufbau von Bewertungsmodulen</b>	<b>11</b>
2.5.1 ALM-Verbrennung	12
2.5.2 ALM-Rektifikation	12
<b>2.6 Szenarien</b>	<b>12</b>
<b>2.7 Modellierung der Rektifikationskolonne mittels Aspen Plus</b>	<b>13</b>
<b>3 RESULTATE</b>	<b>14</b>
<b>3.1 Analyse der ökologisch wichtigen Prozesse des Fallbeispiels und Erkenntnisse für ein abfalllösungsmittelspezifisches Bewertungsverfahren</b>	<b>14</b>
3.1.1 Beitragsanalyse des LCAs der ALM-Verbrennung	15
3.1.2 Erstellung von Modulen zur Bewertung ALM-Verbrennung	18
3.1.3 Beitragsanalyse des LCAs der ALM-Rektifikation	21
3.1.4 Erstellung von Modulen zur Bewertung von ALM-Rektifikation	22
<b>3.2 Verfahren für die Berechnung der Umweltbelastung von ALM-Behandlungsoptionen</b>	<b>25</b>
<b>3.3 Verbrennen oder Rektifizieren?</b>	<b>25</b>
3.3.1 Bewertung der ALM-Behandlungsoptionen des Toluol-Methanol-Wasser Fallbeispiels	26
3.3.2 Exemplarische Auswahl verschiedener Abfalllösungsmittelgemische	30
3.3.3 Stoffflüsse in der ALM-Behandlung	31
3.3.4 Ökologisch bessere ALM-Behandlungsoptionen	32

3.3.5	Verallgemeinerbare Erkenntnisse aus der Evaluation der exemplarischen Abfalllösungsmittel-Gemische.....	38
3.3.6	Bedeutung des Energieversorgungsszenarios für die Bewertung der ALM-Behandlungsoptionen.....	41
<b>4</b>	<b>AUSBLICK UND WEITERER FORSCHUNGSBEDARF .....</b>	<b>42</b>
<b>5</b>	<b>LITERATUR.....</b>	<b>43</b>
<b>6</b>	<b>ANHANG .....</b>	<b>45</b>
<b>6.1</b>	<b>Tabellen Ökoinventare .....</b>	<b>45</b>
<b>6.2</b>	<b>Verzeichnis wichtiger Dokumente des Projekts Abfalllösungsmittelbewirtschaftung in der chemischen Industrie.....</b>	<b>47</b>
<b>6.3</b>	<b>Abkürzungsverzeichnis .....</b>	<b>48</b>



# 1 EINLEITUNG

## 1.1 Abfalllösungsmittelmanagement in der chemischen Industrie und umweltorientierte Fragestellungen

In der chemischen Industrie werden grosse Mengen unterschiedlichster Lösungsmittel eingesetzt. Obwohl die Nachfrage nach Lösungsmitteln in Europa im Verlauf der 90er Jahren von  $5 \cdot 10^6$  t auf ca.  $3 \cdot 10^6$  t pro Jahr sank (23, 26), gehören Lösungsmittel mengenmässig zu den wichtigsten Industriechemikalien. Deshalb ist der Umgang mit Lösungsmitteln von grosser Bedeutung für Fragen des Umwelt- und Gesundheitsschutzes in der chemischen Industrie (27).

Oft können Lösungsmittel nach ihrem Gebrauch in der chemischen Produktion nicht mehr in demselben Prozessen eingesetzt werden in denen sie ursprünglich benutzt wurden, da sie entweder verschmutzt sind, in unbrauchbarer Form vorliegen oder aufgrund betrieblicher oder behördlicher Vorschriften nicht mehr wieder verwendet werden dürfen (5). Sobald also Lösungsmittel nicht mehr ohne Aufarbeitungsprozedur wieder verwendet werden kann, spricht man von Abfalllösungsmitteln (ALM).

Abfalllösungsmittel sind in der chemischen Industrie meist flüssig und variieren stark bezüglich ihrer chemischen Zusammensetzung sowie ihren physikalisch-chemischen Eigenschaften. Da die ALM zu unterschiedlichen Produkten 'wiedergewonnen' werden, existieren auch diverse Aufarbeitungstechniken (z.B. (20)). Grundsätzlich lassen sich flüssige ALM thermisch, durch Verbrennung in einer Abfalllösungsmittelverbrennungsanlage (ALV) oder stofflich, durch Wiedergewinnung z.B. mittels Rektifikation, Adsorption, oder Membranverfahren, behandeln. Die thermische Verwertung von ALM geschieht oft schon am Produktionsstandort mit dem Ziel Dampf- und Strom zu erzeugen. Aus Sicht einer ökologischer Beurteilung des Abfalllösungsmittelmanagements sind die Emissionen in Luft und Wasser sowie die Qualität der Verbrennungsrückstände relevant. Bei der stofflichen Verwertung von ALM, in der eine Ersatz konventionell hergestellten Lösungsmittel angestrebt wird, spielen für eine ökologische Bewertung der Verbrauch an nicht-erneuerbaren Ressourcen sowie die Energiebereitstellung zur Aufarbeitung des ALMs eine Rolle. Aus Gründen der Produktqualität und behördlichen Auflagen kann das wiedergewonnene Lösungsmittel oft nicht dem gleichen Prozess zugeführt werden, dem es entstammt.

Um aus ökologischer Sicht die thermische und die stoffliche Abfalllösungsmittelbehandlung zu bewerten, müssen sowohl unterschiedliche Emissionen verschiedener Qualität als auch Ressourcenverbräuche evaluiert werden können. Dafür eignet sich die Methode des Life-Cycle Assessments (LCA, Ökobilanz), weil sich damit neben den Prozessen der ALM-Verbrennung und -Wiedergewinnung auch die Bereitstellung von Lösungsmitteln, Hilfsstoffen und Energien sowie allfällige Gutschriften für thermische und stoffliche Produkte (Energie- und Lösungsmittelerzeugung) bewertet lassen. Die Bewertung von Entsorgungssystemen mittels LCA ist bisher je nach Entsorgungssystem unterschiedlich intensiv untersucht worden. Für die Modellierung von Kehricht- und Sonderabfallverbrennungsanlagen (SAVA) existieren LCA-Studien (12, 14, 29). Für durchschnittliche Schweizer SAVAs wurden Life-Cycle Inventories (LCI, Inventare der Stoff- und Energieflüsse) erstellt. Darin werden die durchschnittlichen Aufwendungen an Infrastruktur und Betriebsmittel erfasst, sowie die Zusammensetzung der Inputströme und die Energiegewinnung beschrieben. Für die Emissionen der Schweizerischen SAVA's sind durchschnittliche, produktspezifische Transferkoeffizienten erarbeitet worden. Diese geben für den Input einer Menge eines bestimmten Elements die mengenmässige Aufteilung der Output-Frachten auf die drei Outputmedien Luft, Abwasser und feste Rückstände an. Diese Koeffizienten sind aber nicht für alle Verbrennungsanlagen konstant und lassen sich nicht in Abhängigkeit des Brennstoffes beschreiben (14). Deshalb eignen sich bestehende LCA-Studien zu Verbrennungsanlagen nicht für die stoff- bzw. abfallspezifische Betrachtung der Verbrennung von organischen Lösungsmitteln.

Eine Bewertung der stofflichen ALM-Aufarbeitung mittels LCA wurde bisher nicht publiziert. Dies liegt u.a. daran, dass solche Studien schlecht verallgemeinerbar wären und nur für das untersuchte System gelten würden. Solche Anlagen sind sehr produktspezifisch aufgebaut, d.h. wichtige ökologische Bewertungsgrößen, z.B. der Energiebedarf einer Rektifikationskolonne, hängen von der ALM-Zusammensetzung und der angestrebten Produktreinheit ab. Ein weiterer Grund für die geringe Zahl an LCA Studien zur ALM-Wiedergewinnung liegt am Mangel an Ökoinventaren der Lösungsmittelherstellung, mit denen die verminderte Umweltbelastung durch die Einsparung an Ressourcen im LCA quantifiziert werden könnte.

Es ist deshalb nicht bekannt, von welchen Faktoren die ökologische Bewertung der thermischen und stofflichen ALM-Behandlung abhängt. Für einen Vergleich von ALM-Behandlungsoptionen muss geklärt werden, wie stark eine Bewertung von prozessspezifischen Größen einer Anlage bzw. von Eigenschaften des ALMs abhängt. Erst danach kann festgestellt werden, inwiefern ein Vergleich verschiedener ALM-Behandlungsoptionen mittels LCA möglich und aufgrund welcher ALM-Eigenschaften aus ökologischer Sicht eine ALM-Verbrennung einer stofflichen Aufarbeitung vorzuziehen ist.

Angesichts der grossen Stoffmengen an Lösungsmitteln, die in der chemischen Industrie eingesetzt werden, ist ein Beitrag zur Entscheidungsfindung 'Verbrennen oder Wiedergewinnen' aus ökologischer Sicht wünschenswert. Wie die Arbeit von Bruder (5) im Rahmen dieses Projektes gezeigt hat, wird die Wahl der für einen Betrieb geeignetsten Behandlungsoption allerdings auch von anderen, z.B. logistischen Kriterien abhängen. Diese Kriterien lassen sich nicht mittels LCA quantifiziert, sind für einen sicheren und umweltverträglichen Umgang mit ALM aber ebenfalls von Bedeutung.

## 1.2 Ziele der Arbeit

Eine vergleichende ökologische Evaluation der thermischen und stofflichen ALM-Behandlung mittels LCA setzt also voraus, dass LCAs von ALM-Verbrennung und stofflicher Wiedergewinnung vorliegen und dass ausgehend von diesen Studien Bewertungen von ALM mit unterschiedlicher chemischer Zusammensetzung möglich sind. Um einen ökologischen Vergleich mittels LCA zu ermöglichen, wurden im vorliegenden Projekt die Untersuchung auf die *ALM-Verbrennung sowie die ALM-Rektifikation in der chemischen Industrie* als Methoden für die thermische bzw. stoffliche ALM-Aufarbeitung beschränkt. Aufgrund des Mangels an LCIs der Lösungsmittelherstellung musste zudem der Umfang der betrachteten ALM auf exemplarische Gemische limitiert werden. Unter diesen Randbedingungen lassen sich die Projektziele wie folgt umschreiben:

1. Durchführung von LCAs der Fallbeispiele für die ALM-Verbrennung und -Rektifikation in der chemischen Industrie und Identifikation umweltbelastender Prozesse.
2. Erstellung eines Verfahrens zur ökologischen Bewertung der beiden ALM-Behandlungsoptionen unter Berücksichtigung verschiedener ALM-Zusammensetzungen.
3. Exemplarischer ökologischer Vergleich verschiedener ALM-Gemische zur Formulierung verallgemeinerbarer Erkenntnisse, die zur Entscheidungsfindung 'Verbrennen oder Rektifizieren von ALM' beitragen können.

## 1.3 Vorgehen

### 1.3.1 Von der Wahl der Fallbeispiele zum Berechnungsverfahren für die Umweltbelastung der zwei ALM-Behandlungsoptionen

Die vergleichende Betrachtung von ALM-Verbrennung und -Rektifikation mittels LCA führt dazu, dass eine Vielzahl verschiedener Prozesse als Stoff- und Energieflüsse in LCIs (Ökoinventare) bewertet werden müssen. In LCI-Datenbanken sind diese Prozesse oft entweder nicht als LCIs verfügbar oder sie stimmen nur schlecht mit den untersuchten Prozessen überein. Deshalb

müssten für eine realitätsnahe Abbildung von ALM-Verbrennungs- und Rektifikationsanlagen zuerst solche Prozesse inventarisiert werden. Da diese Datenerfassung sehr aufwendig ist und u.U. nicht zu repräsentativen LCIs für die ALM-Behandlung führt, wurde in diesem Projekt aus *je einem Fallbeispiel für die ALM-Verbrennung und -Rektifikation* ein Verfahren für die Berechnung der Umweltbelastung entwickelt, das v.a. auf einfachen physikalisch-chemischen Grössen der ALM-Gemische beruht.

Das Vorgehen in diesem Projekt ist im Vorgehensschema in **Abbildung 1** dargestellt. Mit Hilfe der Partner aus der chemischen Industrie wurden ein Fallbeispiel-Gemisch gefunden (Toluol-Methanol-Hydroxyphenylpropionsäure-Wasser), das sowohl in einer ALV verbrannt als auch durch eine Rektifikation aufgearbeitet werden kann. Um zu vermeiden, dass die Aussagen der LCAs der Fallbeispiele nur für eine gewählte Bewertungsmethode gelten, erfolgte die Auswertung der LCAs mit zwei Indikatoren, die - wie aus der Literatur bekannt war - entweder Emissionen (Umweltbelastungspunkte, (6)) oder Ressourcenverbrauch (Eco-Indicator 99 (13)) stark gewichteten. Aufgrund dieser LCAs konnten die ökologisch wichtigen Beiträge zur Umweltbelastung der ALM-Behandlungsoptionen ermittelt werden. Die Aufteilung in prozess- und ALM-bedingte Beiträge diente der Zusammenstellung eines Verfahrens zur Berechnung der Umweltbelastung, dass schliesslich in die Evaluation der zwei ALM-Behandlungsoptionen unter Berücksichtigung verschiedener Szenarien für die Energiebereitstellung in der chemischen Industrie ermöglichte. Die vergleichende ökologische Bewertung von ALM-Verbrennung und -Rektifikation erfolgte schliesslich am Fallbeispiel sowie an exemplarischen, ternären ALM-Gemischen, die aus Toluol, Benzol, Aceton, Methanol und Wasser bestanden.

### 1.3.2 Wahl der Fallbeispiele

Während in der ALV verschiedene ALM zu einem (im Modell) einheitlichen Stoffgemisch zusammengeführt werden, um unter konstanten und optimierten Bedingungen zu Strom und Dampf umgesetzt zu werden, hängen die Stoff- und Energieflüsse einer ALM-Rektifikation sowohl vom behandelten ALM-Gemisch als auch von der zu erreichenden Produkt- und Nebenproduktqualität ab. Deshalb ist es nicht möglich, die Frage nach der ökologisch sinnvolleren Behandlungsoption zu beantworten, ohne die Untersuchung auf exemplarische ALM-Mischungen zu beschränken, die in einem ähnlichen Rektifikationsprozess zu gleichwertigen Lösungsmitteln destilliert werden können. In diesem Projekt wurde deshalb die Verbrennung von durchschnittlichem ALM in der ALV der Valorec Services AG mit der Rektifikation eines Gemisches verglichen, das Toluol, Methanol, Wasser und 4-Hydroxyphenylpropionsäure (Methyloxcarbonsäure) enthält. In Tabelle 1 ist die Elementarzusammensetzung der evaluierten ALM zusammengestellt.



Abbildung 1 Schematische Darstellung des Vorgehens in Projekt Abfalllösungsmittelmanagement in der chemischen Industrie

Tabelle 1 Zusammensetzung von durchschnittlichem ALM in der ALV (25) und der verschiedenen Stoffflüsse in der Rektifikation in g/g ALM (3).

Zusammensetzung	Verbrennung	Rektifikation		
	ALM	ALM	Produkt	Rückstand
<i>elementar</i>	<i>g/g ALM</i>	<i>g/g ALM</i>	<i>g/g Produkt</i>	<i>g/g Rückstand</i>
C	0.45	0.90	0.91	0.84
H	0.085	0.088	0.088	0.089
O	0.41	0.010	0.0029	0.12
N	0.020			
S	0.0083			
Cl	0.023			
Br	0.0033			
I	0.00011			
<i>molekular</i>		<i>g/g ALM</i>	<i>g/g Produkt</i>	<i>g/g Rückstand</i>
Toluol		0.98	0.995	0.65
Methanol		0.0050	0.0040	0.10
Wasser		0.0050	0.0010	0
Hydroxyphenyl- propionsäure		0.010	0	0.25

### 1.3.3 Vorgehen bei der Erstellung eines Systemmodells

Für die beiden ALM-Behandlungsoptionen musste ein Systemmodell erstellt werden, das durch die Wahl einer gemeinsamen funktionellen Einheit den Vergleich der Prozesse mittels LCA zulässt. Diese funktionelle Einheit bezieht sich auf die *Dienstleistung einer bestimmten Menge von Lösungsmittel in der chemischen Produktion (Abbildung 2)*. Zur Erbringung der Dienstleistung muss Lösungsmittel ab Petrochemie aus fossilen Rohstoffen hergestellt werden. Aus der Dienstleistung des Lösungsmittels geht das Abfalllösungsmittel hervor, dass anschliessend entweder durch Verbrennung als Energie (Dampf und Strom) genutzt wird oder durch Rektifikation zu wiedergewonnenem Lösungsmittel und Rektifikationsrückstand umgesetzt wird. Das wiedergewonnene Lösungsmittel weist im Modell die gleiche Qualität wie das Lösungsmittel ab petrochemischer Produktion auf und führt so zu einer Einsparung petrochemisch gewonnenem Lösungsmittel. Die Rektifikationsrückstände können in einer Verbrennungsanlage wie der ALV zur Energieerzeugung genutzt werden.

### 1.3.4 Szenarien für Energieversorgung und Produktgutschriften

Neben der Evaluation der Ressourcenverbräuche und Emissionen im Systemmodell für die ALM-Behandlung ist die Definition von *Szenarien* betreffend der Wahl der Energiebereitstellungsprozesse sowie möglicher Gutschriften für in der ALM-Behandlung entstehenden Produkte von grosser Bedeutung (vgl. Angaben in Abbildung 2).

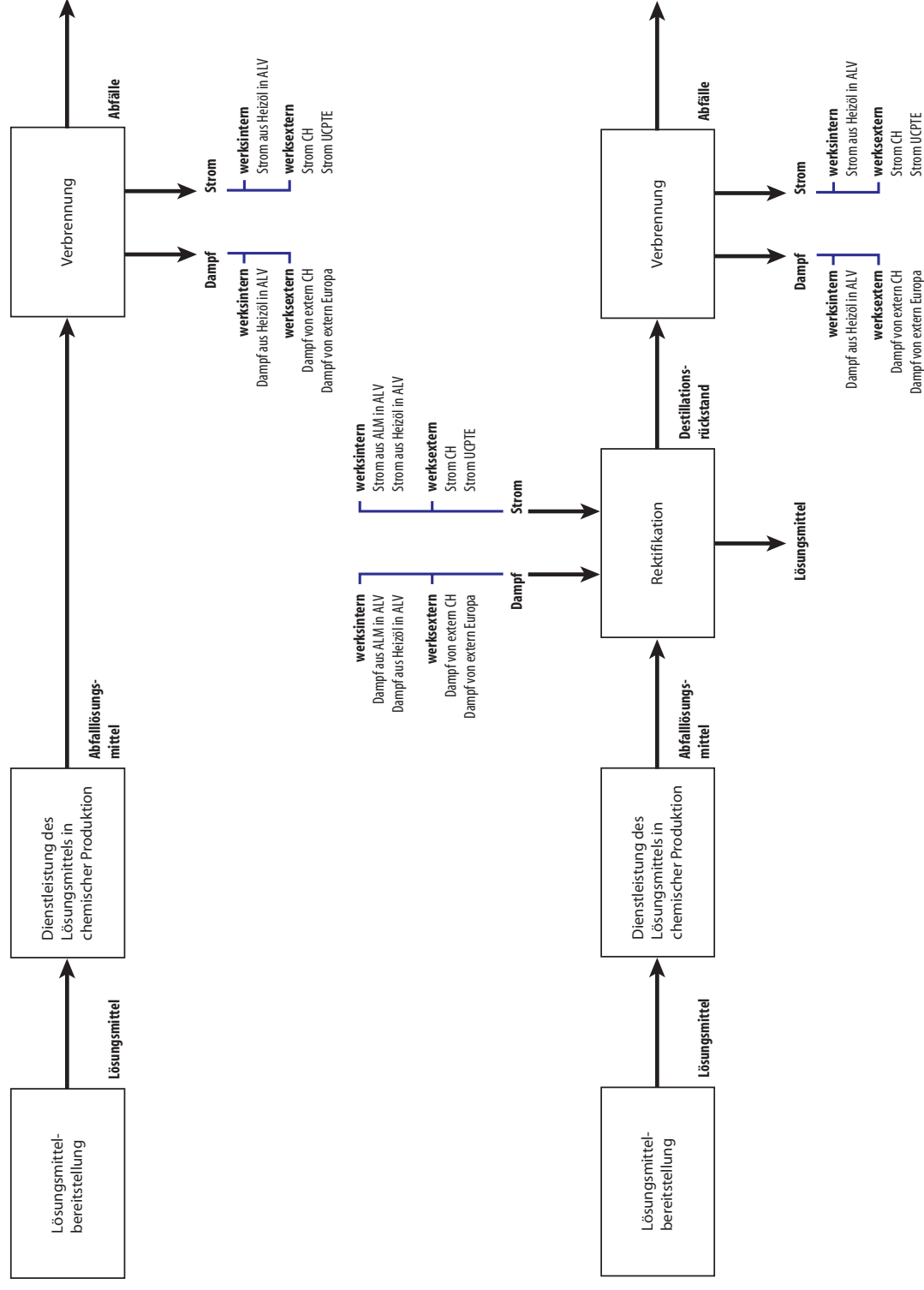


Abbildung 2 Systemmodell und funktionelle Einheit für die Modellierung der verschiedenen ALM-Behandlungsoptionen mittels LCA

Die in der *ALM-Verbrennung* produzierte Energie in Form von Dampf und Strom kann je nach Kontext des ALM-Managements auf unterschiedliche Weise gutgeschrieben werden. Im vorliegenden Projekt werden in erster Linie die *Behandlungsoptionen aus Sicht eines chemischen Produktionsbetriebes* betrachtet. Dabei leistet die ALV einen essentiellen Beitrag zur Dampf- und Stromversorgung, wenn sie wie im Werk Schweizerhalle nahezu ohne Unterbruch in Betrieb sind (24). Der ALV kommt dann die Rolle eines Kesselhauses zu, das je nach zur Verfügung stehenden Lösungsmittelabfällen entweder ALM oder - im Notfall - Heizöl verfeuert. Da die ALV auf die Verbrennung von ALM mit potentiell umweltbelastenden Chemikalien ausgerichtet ist, sorgen aufwendige, der Verbrennung nachgeschaltete Reinigungsstufen für eine emissionsarme Dampf- und Stromerzeugung. Die emissionsarme Prozessführung einer ALV fällt dann ins Gewicht, wenn sie mit der Energiebereitstellung durch konventionelle Ölfeuerungen oder gar Kohlefeuerungen verglichen wird. Bei einer solchen *Betrachtung der ALM-Behandlungsoptionen aus volkswirtschaftlicher Sicht* müssen zudem die schweizerische und europäische Stromerzeugung (als Mischung verschiedener Stromerzeugungsmethoden wie UCPTE-Mixes (12)) als mögliche Szenarien für die Energieversorgung berücksichtigt werden. In Tabelle 2 sind alle Szenarien aufgeführt, welche die unterschiedlichen Bereitstellungsmethoden für Dampf- und Strom sowie ev. damit einhergehenden ökologischen Gutschriften berücksichtigen. Das Szenarien umfassen die werksinterne Energieversorgung, (V11, V=Verbrennung) die Szenarien für werksexterne Energieversorgung innerhalb der Schweiz (V21) bzw. innerhalb Europas (V22).

In der *Rektifikation* fallen Gutschriften für die Vermeidung der Produktion neuer, d.h. petrochemisch hergestellter Lösungsmittel an. Die Gutschriften hängen von der Menge des wiedergewonnenen Lösungsmittels einer festgelegten Reinheit ab. Diese Produktausbeute hängt wiederum von den zur Verfügung stehenden Rektifikationskolonnen (Dimensionen, Anzahl theoretische Trennstufen etc.) und der Betreibungsform (z.B. Grösse der Stoffflüsse, Rücklaufverhältnis etc. (17)) ab. Der Energiebedarf für die Rektifikation in Form von Dampf und Strom kann aus verschiedenen Quellen gedeckt werden. Wie es für chemische Produktionsstätten üblich ist (9, 10, 15) sind die Stoff- und Energieströme im Werk Schweizerhalle stark integriert. Deshalb steht oft Dampf und Strom aus der ALV für das Betreiben der Rektifikationskolonnen zur Verfügung. Grundsätzlich ist aber auch eine externe Energieversorgung denkbar, indem z.B. Strom vom schweizerischen oder europäischen Netz (z.B. UCPTE Mischungen (12)) bezogen wird. In Tabelle 2 sind werksinterne (R21 und R22, R=Rektifikation) und -externe Energieversorgungsszenarien (R31 für schweizerischen Dampf und Strom, R32 für europäischen) aufgeführt, die in diesem Projekt berücksichtigt werden.

Im Folgenden wird die Evaluation der ALM-Behandlungsoptionen aus der Sicht chemischer Produktionsbetriebe, wo nicht anders erwähnt, mit werksinterner Energieversorgung diskutiert. Um die Darstellung der Vorgehensweise und der Resultate übersichtlich zu gestalten, werden die Szenarien mit externer Energieversorgung nur fallweise zur Sensitivitätsanalyse der Resultate in Bezug auf Energieversorgungsfragen eingesetzt.

Tabelle 2 Szenarien für die ökologische Beurteilung verschiedener ALM-Behandlungsoptionen. Die Szenarien unterscheiden sich in Bezug auf die gewährten Gutschriften für Energie bzw. Lösungsmittel und in Bezug auf verschiedene Varianten der Energieversorgung. Die verwendete Datenbankmodule stammen aus der SimaPro-Datenbank.

Nr.	Szenario	Beschreibung	Beschreibung des Datenbankmoduls für Quantifizierung des Energiebedarfs und allfälligen Gutschriften		
			Lösungsmittel	Dampf	Strom
V11	Verbrennung in ALV - Heizöleinsparung	Energiegutschrift für Einsparung von Heizöl als Brennstoff in ALV		Gutschrift für Dampferzeugung durch den Einsatz von Heizöl statt ALM als Brennstoff in ALV-Dampfproduktions-Modul	Gutschrift für Stromerzeugung durch den Einsatz von Heizöl statt ALM als Brennstoff in ALV-Dampfproduktions-Modul
V21	Verbrennung in ALV - Einsparung werksexterner Energieproduktion CH	Energiegutschrift für Einsparung an externer Dampf und schweizerische Stromproduktion		Gutschrift für Dampferzeugung durch den Einsatz von Heizöl statt ALM als Brennstoff in ALV-Dampfproduktions-Modul	Gutschrift für Stromerzeugung gemäss schweizerische Stromproduktion (BUWAL-Inventar (7))
V22	Verbrennung in ALV - Einsparung werksexterner Energieproduktion Europa	Energiegutschrift für Einsparung an externer Dampf und europäische Stromproduktion		Gutschrift für Dampferzeugung mittels Dampfmodul aus gemittelter europäischer Dampfproduktion (1)	Gutschrift für Stromerzeugung gemäss Inventar für UCPT- <b>Strom</b> (12)
R11	Rektifikation mit werksexterner Energieversorgung mit ALM	Gutschriften für Lösungsmittel ab Petrochemie und für Rückstandsverbrennung in ALV, Energie für Rektifikation stammt aus ALM-Verbrennung in ALV	Gutschrift für Lösungsmittel mittels Inventare aus APME-Daten für <b>petrochemische Lösungsmittelproduktion</b> (1)	Dampf aus ALM-Verbrennung in ALV Gutschrift für Dampferzeugung aus Rektifikationsrückstand gemäss Inventar für Dampfproduktion mittels ALM in ALV	Strom aus ALM-Verbrennung in ALV Gutschrift für Stromerzeugung aus Rektifikationsrückstand gemäss Inventar für Dampfproduktion mittels ALM in ALV
R12	Rektifikation mit werksexterner Energieversorgung mit Heizöl in ALV	Gutschriften für Lösungsmittel ab Petrochemie und für Rückstandsverbrennung in ALV, Energie für Rektifikation stammt aus Heizöl-Verbrennung in ALV	Gutschrift für Lösungsmittel mittels Inventare aus APME-Daten für <b>petrochemische Lösungsmittelproduktion</b> (1)	Dampf aus Heizöl-Verbrennung in ALV Gutschrift für Dampferzeugung aus Rektifikationsrückstand gemäss Inventar für Dampfproduktion mittels Heizöl in ALV	Strom aus Heizöl-Verbrennung in ALV Gutschrift für Stromerzeugung aus Rektifikationsrückstand gemäss Inventar für Dampfproduktion mittels Heizöl in ALV
R21	Rektifikation mit werksexterner Energieversorgung CH	Gutschriften für Lösungsmittel ab Petrochemie und für Rückstandsverbrennung in ALV, Energie für Rektifikation stammt aus Heizöl-Verbrennung in ALV (Näherung für CH-Dampf) und CH-Strom	Gutschrift für Lösungsmittel mittels Inventare aus APME-Daten für <b>petrochemische Lösungsmittelproduktion</b> (1)	Dampf aus Heizöl-Verbrennung in ALV Gutschrift für Dampferzeugung aus Rektifikationsrückstand gemäss Inventar für Dampfproduktion mittels Heizöl in ALV	Strom aus Heizöl-Verbrennung in ALV Gutschrift für Stromerzeugung aus Rektifikationsrückstand gemäss Inventar für schweizerischer Stromproduktion (BUWAL-Inventar (7))
R22	Rektifikation mit werksexterner Energieversorgung Europa	Gutschriften für Lösungsmittel ab Petrochemie und für Rückstandsverbrennung in ALV, Energie für Rektifikation stammt aus externer Energiebereitstellung in Europa	Gutschrift für Lösungsmittel mittels Inventare aus APME-Daten für <b>petrochemische Lösungsmittelproduktion</b> (1)	Dampferzeugung mittels Dampfmodul aus gemittelter europäischer Dampfproduktion (1) Gutschrift für Dampferzeugung aus Rektifikationsrückstand gemäss Dampfmodul aus gemittelter europäischer Dampfproduktion (1)	Strom aus UCPT-Netz Gutschrift für Stromerzeugung gemäss Inventar für UCPT- <b>Strom</b> (12)



## 2 DATEN UND METHODEN

### 2.1 Life-Cycle Assessment des Fallbeispiels

Die Ziel- und Rahmendefinition für das LCA des untersuchten Fallbeispiels lassen sich wie folgt umschreiben: die funktionelle Einheit für den Vergleich der beiden ALM-Behandlungsoptionen ist 'die Dienstleistung einer bestimmten Menge Lösungsmittel in der chemischen Produktion' (Abbildung 2). Innerhalb der Systemgrenzen liegen die Herstellung von Lösungsmittel ab Petrochemie, die Herstellung der in der ALV und für die Rektifikation benötigten Hilfsstoffe, Chemikalien und Energien sowie die ALV und Rektifikationskolonne im Werk Schweizerhalle.

Dieser Bericht baut auf LCAs der Abfalllösungsmittelverbrennungsanlage ALV-2 und einer Rektifizierkolonne der Firma Valorec Services AG in Schweizerhalle auf. Für beide Anlagen wurden im Laufe des Projekts LCIs erstellt. In den Arbeiten von Seyler-Jahn (16, 19) und Capello (8) wird auf die technischen Einzelheiten der erfassten Anlagen in Detail eingegangen. Im Anhang des Schlussberichts sind Stoff- und Energieflüsse soweit wiedergegeben, damit die Berechnungen für die verschiedenen Bewertungsmodule nachvollzogen werden können.

Die Evaluation des Fallbeispiels, d.h. die Behandlung des Toluol-Methanol-Hydroxyphenylpropionsäure-Wasser-Gemisches in der ALV bzw. deren Aufarbeitung durch die Rektifikation, erfolgte durch die Modellierung der oben diskutierten funktionellen Einheit mittels LCA-Software SimaPro (18). Die aktuelle Version enthält Daten bzw. Prozessbeschreibungen vieler aktueller LCA-Datenbanken (u.a. Ökoinventare von Energiesystemen (12)). Soweit möglich wurden auch aktuellste Datensätze aus dem laufenden Projekt Ecoinvent 2000 benutzt, welches sich bis Mitte 2003 mit der Aktualisierung und Erweiterung der zurzeit umfangreichsten LCA-Datenbank beschäftigt (11).

### 2.2 Daten

Die erfassten Stoff- und Energieströme stammen aus Jahresberichten und Betriebsvorschriften der Valorec Services AG, die während des Zeitraums von 1995 bis 2001 zusammengetragen wurden. Die Daten wurden durch Kommentare verschiedener Valorec-Mitarbeiter ergänzt. Der Einsatz der Daten zur Erstellung des LCAs der Rektifikation bzw. Verbrennung konnte in Zusammenarbeit mit verschiedenen Firmen der chemischen Industrie in regelmässigen Treffen zur Diskussion gestellt werden.

#### 2.2.1 Abfalllösungsmittelverbrennung

Die Abfalllösungsmittelverbrennungsanlage ALV-2 ist für die Nutzung der bei der Verbrennung von ALM freiwerdenden Energie in Form von Dampf und Strom optimiert. Aufwendige Reinigungsverfahren der Abgase sind für die Einhaltung der gesetzlichen Emissionsgrenzwerte erforderlich. Die Anlage gilt als repräsentativ für die Abfalllösungsmittelverbrennung in der Schweiz ((16, 19), weitere Anlagen zur Abfalllösungsmittelverbrennung stehen z.B. in Dottikon (EMS-Dottikon), Visp (Lonza)). Aufgrund der repräsentativen Stoff- und Energieflüsse gilt 1998 als Referenzjahr für die ökologische Bewertung (24). Ausgehend von diesen Daten konnte eine Energiebilanz der ALV für die verschiedenen Brennstoffe erstellt werden (Tabelle 3). Die 1998 erzeugten 215 GWh Energie stammen zu 82% vom ALM. Das im Überhitzer eingesetzte Regenerat weist einen Heizwert von ca. 27 MJ/kg auf und entspricht dem Einsatz von 1929 t Heizöl EL. Somit werden im Überhitzer 2906 t Heizöl und Heizölersatz eingesetzt. Zur Inbetriebnahme (Anfahren) der Anlage waren 829 t Heizöl nötig.

Tabelle 3 Referenzdaten für die Energieproduktion der ALV-2 (24, 25) aufgeteilt nach Brennstoffen, Jahresproduktion sowie Dampf- und Stromanteil (Annahmen: Wirkungsgrad ALV = 86%, 1 t Niederdruckdampf = 0.897 MWh (6 bar/220°C), Dichte von Erdgas = 0.9 kg/m<sup>3</sup>, (12, 19, 28))

Brennstoffeigenschaften und -mengen im Jahr 1998	Verbrennungsenthalpie, $\Delta H_{\text{comb}}$		C-Gehalt	Menge	
ALM (Durchschnitt)	21	MJ/kg	45.0%	33350	t
Heizöl in Stützfeuerung	42	MJ/kg	86.3%	829	t
Heizöl im Überhitzer	42	MJ/kg	86.3%	977	t
Regenerat als Heizölersatz im Überhitzer	42	MJ/kg	86.3%	1929	t
Erdgas	40	MJ/m <sup>3</sup>		47000	m <sup>3</sup>
Total				37132	t

Energieproduktion 1998	Energiegehalte	Anteile	Anteil Energie Niederdruckdampf (93%)		Anteil Energie Strom (7%)
	(MWh/a)	(%)	(MWh/a)	(t/a)	(MWh/a)
ALM	194542	81.5%	155594	173461	11711
Heizöl Stützfeuerung	9672	4.1%	7735	8624	582
Heizöl Überhitzer	11398	4.8%	9116	10163	686
Regenerat als Heizöl im Überhitzer	22505	9.4%	17999	20066	1355
Erdgas	522	0.22%	418	466	31
Total	238639	100%	190863	212780	14366

### 2.2.2 Rektifikation von Abfalllösungsmittel

Bei der in dieser Studie evaluierten Rektifikationsanlage handelt es sich um eine Schlitzbodenkolonne, die im Batchbetrieb unter Normaldruck arbeitet (3). Die Rektifikation wird so betreiben, dass die Rückstände aus dem Trennungsprozess (Vorlauf und Blasensumpf inkl. Methanol, welches zum Reinigen der Blase eingesetzt wird) in der ALV-2 als Brennstoff im Überhitzer einsetzen werden können. Die in Anhang zusammengefassten Daten (Tabelle A2) wurden 1995 erhoben und gelten für eine Lösungsmittelcharge von 13760 kg (Details vgl. (8)).

## 2.3 Modellierung mittels LCA-Software

Die Modellierung der funktionellen Einheit mittels LCA-Software SimaPro (18) erfolgte, indem Rektifikations- und Verbrennungsprozesse als neue Prozesse in der Datenbank erstellt wurden. Die im Anhang in Tabelle A1 und A2 zusammengestellten Ressourcenverbräuche, Hilfsstoffen und Emissionen konnten weitestgehend berücksichtigt werden. Da die Erstellung zusätzlicher Ökoinventare für Basischemikalien sehr zeitintensiv ist und den Rahmen dieses Projekts überschreiten würde, blieben einzelne Stoffflüsse unberücksichtigt. Sie sind in Tabelle A1 rot hervorgehoben und betreffen die Hilfsstoffe Phosphat, NH<sub>4</sub>OH, CaCl<sub>2</sub>, FeCl<sub>3</sub>, TMT (Tri-mercaptoptriazin, Fällungsmittel in Abwasserbehandlung) sowie SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> als Emission ins Wasser. Auch wenn nicht ausgeschlossen werden kann, dass in den Prozessketten (v.a. Herstellung) besonders umweltschädigende Ressourcenverbräuche und/oder Emissionen vorkommen, sind deren - hier vernachlässigten - Effekte vermutlich gering, da die erwähnten Hilfsstoffe nur in geringen Mengen zu den Stoff- und Energieflüssen der ALV-2 beitragen.

In SimaPro werden drei verschiedene Prozesstypen benutzt, um die funktionelle Einheit zu modellieren (vgl. Anordnung in Abbildung 2 und (8)). Produktionsprozesse (*process*) werden verwendet, um ein Produkt (Materialien, Energie oder Dienstleistungen) herzustellen. Innerhalb dieses Prozesstyps können Inputströme und Prozessemissionen definiert werden. Wird dabei Abfall produziert, so kann dieser mit einem Entsorgungsprozess verknüpft werden. Mit Entsorgungsprozessen (*waste treatment process*) kann die Entsorgung von Produkten modelliert werden. Das im Input als Abfall spezifizierte Produkt bringt keine ökologische Belastung mit sich, da diese vollumfänglich dem Produkt eines vorgelagerten Produktionsprozesses angelastet wird. Neben dem als Abfall definierten Input können zur Entsorgung benötigte Hilfsstoffe und Energien aus der Technosphäre sowie die Prozessemissionen definiert werden. Es können aber keine Produkte aus einem Entsorgungsprozess hervorgehen. Sogenannte vermiedene Prozesse und Produkte (*avoided products*) können sowohl in Produktions- als auch in Entsorgungsprozessen definiert werden. Damit werden Produktionsprozesse bezeichnet, die durch die Produktion bzw. Entsorgung eines Gutes vermieden oder eingespart werden. Die Belastungen aus sog. vermiedenen Prozessen werden *als Gutschriften dem Prozess angerechnet, mit dem sie vermieden werden*. Die Prozessbäume sind in SimaPro hierarchisch gegliedert. Auf der obersten hierarchischen Stufe liegt die funktionelle Einheit, auf die alle hierarchisch tiefer gelegenen Prozesse normiert werden. Details zur Anwendung von SimaPro für die Fallbeispiele sind bei Capello (8) zu finden.

## 2.4 Bewertungsmethoden

Bewertungsmethoden dienen im LCA dazu, Stoff- und Energieströme des LCI zu bewerten und damit effektive und potentielle Umweltgefährdungen zu quantifizieren. Neben verschiedenen Konzepten unterscheiden sich Bewertungsmethoden auch in Bezug auf die Umwelteffekte, die darin berücksichtigt werden. Für die Beurteilung der ALM-Behandlungsoptionen werden hier die Methode der ökologischen Knappheit (Bewertung in Umweltbelastungspunkten, UBP) und diejenige des Eco-Indicators 99 (in ei99-Pt) benutzt. Erstere orientiert sich an der schweizerischen Umweltzielen in der Gesetzgebung (6), letztere berücksichtigt durchschnittliche europäische Verhältnisse (13). Als Ergänzung im hier vorgeschlagenen Bewertungsverfahren wird der Primärenergiebedarf separat aufgeführt (hier nicht weiter erläutert).

Die Methode der ökologischen Knappheit erlaubt eine Gewichtung der in einer Sachbilanz erfassten Grundlagedaten. Sie beruht auf dem distance-to-target-Prinzip. Dabei werden die gesamten gegenwärtigen Flüsse einer Umweltwirkung und andererseits die im Rahmen der umweltpolitischen Ziele als maximal zulässig erachteten, sog. kritischen Flüsse derselben Umweltwirkung verwendet. Je grösser die Differenz zwischen aktuellem Wert einer Umweltwirkung und deren Zielwert ist, desto gravierender ist der Effekt. Die Methode ist in Bezug auf die schweizerischen Stoff- und Energieflüsse definiert.

Die Methode des Eco-Indicators 99 beruht auf dem Konzept der Schadensmodellierung und quantifiziert eine Beeinträchtigung der drei Schutzgüter 'Menschliche Gesundheit', 'Ökosystemgesundheit' und 'Ressourcenentwertung'. Ausgehend von diesen drei Schutzgütern werden Umweltschadensmodelle für die als wichtig erachteten Umweltwirkungen entwickelt. Eine Besonderheit dieser Methode ist die Berücksichtigung von Modellunsicherheiten, die auf verschiedene Werthaltungen der LCA-Anwender zurückzuführen sind. Zur Quantifizierung unterschiedlicher Werthaltungen werden drei Kulturtypen eingeführt: (a) solche, die eine Langzeitperspektive bei der Bewertung einnehmen und zukünftige Generationen gleich stark gewichten wie heutige (sog. Egalitäre), (b) solche, denen kurzfristige Ziele wichtiger sind als längerfristige (sog. Individualisten), und (c) solche, die zwischen Gegenwart und Zukunft abwägen und so Risiken und Nutzen abwägen (13). In dieser Arbeit werden alle Bewertungen, die auf dem Eco-Indicator 99 beruhen aus der *egalitären Perspektive* (Variante (a)) gemacht.

## 2.5 Aufbau von Bewertungsmodulen

Bewertungsmodule für die Evaluation verschiedener ALM-Gemische liessen sich nach einer Analyse der wichtigen Beiträge zur Bewertung des Fallbeispiels erstellen. Dabei wurden die Inventare für die Verbrennung bzw. Rektifikation ohne Berücksichtigung von Gutschriften betrachtet. Wie unten geschildert werden zur Bewertung einzelner Prozesse des LCAs von Verbrennung bzw. Rektifikation einzelne Teile des LCI separat bewertet. Die Auswertung erfolgte mittels Methode der ökologischen Knappheit, mittels Eco-Indicator 99 sowie für die Berechnung des Primärenergiebedarfs und führte zur Berechnung von sog. Bewertungsfaktoren für ausgewählte Eigenschaften (Parameter) eines ALM-Gemisches.

### 2.5.1 ALM-Verbrennung

Die Berechnung der Grundbelastung wurde wie folgt durchgeführt:

1. Bewertung eines LCI der ALV (Tabelle A1) ohne Einsatz von NaOH, ohne Brennstoffe und ohne CO<sub>2</sub>-Emissionen (Grundbelastung).
2. Bewertung des LCI der Grundbelastung sowie derjenigen Brennstoffe, die zum Anfahren des Ofens und für den Betrieb des Überhitzers notwendig sind inkl. der CO<sub>2</sub>-Emissionen aus diesen Brennstoffen (Heizöl und Regenerat).
3. Die Differenz der berechneten Umweltbelastung (in Umweltbelastungspunkten) der LCI von 1. und 2. stellt die Umweltbelastung aus dem Brennstoffeinsatz (ohne ALM) dar. Gemäss Tabellen 3 und A1 werden 22% des Brennstoffes zur Stützfeuerung und 78% im Überhitzer eingesetzt. Die Umweltbelastung aus den 22% wird der Grundbelastung zugeschlagen.

Die Umweltbelastung aus dem Heizöleinsatz im Überhitzer wird mittels linearer Beziehung mit der Verbrennungsenthalpie des ALM korreliert. Dabei wird hier angenommen, dass ein ALM mit einer Verbrennungsenthalpie von 21 MJ/kg den Einsatz der unter 3. quantifizierte Heizölmenge verursacht. Bei einer Verbrennungsenthalpie von 42 MJ/kg ist kein Stützbrennstoff mehr nötig. Schliesslich werden in drei weiteren LCI die Anteile der Umweltbelastung des NaOH-Einsatzes, der CO<sub>2</sub>-Emissionen aus ALM und die Gutschriften für produzierten Dampf- und Strom berechnet.

Die Gutschriften für die Energieerzeugung (Dampf und Strom aus ALV) wurden abgeschätzt, indem das LCA der ALM-Verbrennung mit Heizöl statt ALM errechnet wurde. Die dafür nötige Heizölmenge entspricht den Energiegehalt (Verbrennungsenthalpie) der ALM-Menge. Die CO<sub>2</sub>-Emissionen wurden proportional zum Kohlenstoffgehalt des Heizöls berechnet, die übrigen Emissionen der heizölbefeuerten ALV wurden proportional zur Brennstoffmenge des eingesetzten Heizöls reduziert.

### 2.5.2 ALM-Rektifikation

Die betriebsbedingten Beiträge der Umweltbelastung der ALM-Rektifikation stammen aus der Bewertung der Betriebsemissionen sowie des Hilfsstoffeinsatzes (Bereitstellung von Methanol und Stickstoff zur Reinigung der Kolonne). Separat berechnet wurden die Beiträge Umweltbelastung der Dampf- und Stromerzeugung in der ALV, wobei dazu entweder ALM oder Heizöl als Brennstoff eingesetzt wurden. Die Gutschriften entsprechen der Vermeidung der Herstellung von Lösungsmittel aus Rohöl in der Petrochemie. Die entsprechenden Daten stammen von APME (1).

## 2.6 Szenarien

Die geschilderten Szenarien für die Energieversorgung und die verschiedenen Gutschriften für ALM-Verbrennung bzw. -Rektifikation wurden mit verschiedenen Datenmodulen aus der LCA-Datenbank berechnet. Tabelle 2 bezeichnet die Module für die einzelnen Szenarien und

beschreibt sie anhand der zur Verfügung stehenden Informationen. Die Szenarien in Tabelle 2 erlauben eine erste Analyse wichtiger Beiträge der Energiebereitstellungsprozesse zum gesamten LCA der Fallbeispiele. Zuerst werden die Umweltwirkungen der Prozesse mit dem Szenario für die werksinterne Energieversorgung betrachtet (Szenario Nr. V11 und R11, V=Verbrennung, R=Rektifikation), indem Gutschriften für die Vermeidung des Heizöleinsatzes in der ALV (anstatt ALM) quantifiziert werden. Anschliessend erfolgte Berechnung für die Rolle der werksexternen schweizerischen bzw. europäischen Energieversorgung. Die in dieser Arbeit verwendeten LCI für werksexterne Dampf- und Strombereitstellung stammen aus der LCA-Datenbank in SimaPro. Da kein LCI für eine durchschnittliche schweizerische Dampferzeugung vorliegt, wurde dafür das Inventar der heizölbefeuerten ALV verwendet.

## 2.7 Modellierung der Rektifikationskolonne mittels Aspen Plus

Die Modellierung der Rektifikation von fünf ausgewählten ALM-Gemischen, deren Hauptkomponente Toluol, Aceton, Methanol, Wasser oder Benzol und Toluol waren (vgl. später), wird zur Berechnung

- der *Zusammensetzung der Stoffströme* (Komponenten, Reinheit) nach der Rektifikation des ALMs und
- zur *Quantifizierung des Dampfbedarfs* für die Auftrennung in wieder verwendbares Lösungsmittel und in der ALV verbrennbaren Rückstand benutzt.

Mittels der Software Aspen Plus (2) wurde eine Rektifikationskolonne so spezifiziert, dass die *modellierte Rektifikation des Fallbeispiel-Gemisches* (Toluol-Methanol-Wasser) möglichst ähnliche Betriebsdaten (Reinheit, Energiebedarf) aufwies wie die reale Rektifikation des Fallbeispiels (Toluol-Methanol-Hydroxyphenylpropionsäure-Wasser-Gemisch, Tabelle 1) im WSH (8). Tabelle 4 zeigt die Betriebsdaten der Rektifikation im WSH (3) und Vorgaben für die Modellierung der Rektifikationskolonne.

Wichtigste Randbedingung für das Modell der Rektifikation des Toluol-Methanol-Wasser-Gemisches war die Übereinstimmung des Energiebedarfes pro Charge ALM (13760 kg), da diese Grösse gemäss der Analyse der Umweltbelastung der Rektifikation die wichtigste Belastungsquelle darstellt. Die Energie wird vollumfänglich in Form von Dampf (überhitzter Niederdruckdampf 220°C, 6 bar) bezogen, was einer Dampfmenge von 15 t entspricht (16, 19). Das Modell der Rektifikationskolonne, mit dem die Rektifikation des Fallbeispiel-Gemisches abgebildet werden konnte, wurde anschliessend für die Berechnung der Stoffflüsse und des Dampfbedarfes der exemplarischen ALM-Gemischen eingesetzt.

Es ist im Folgenden zu beachten, dass die *Modellierung primär für die Berechnung der Stoffstromzusammensetzung nach der Rektifikation und für eine grobe Abschätzung des Dampfbedarfs* dient. Die Randbedingung, dass alle ALM-Gemische auf derselben Rektifikationskolonne mit ähnlichen Betriebsdaten aufgetrennt werden sollen, ist für eine ökologische Bewertung sinnvoll, führte aber auch zu nur bedingt realitätsnahen Resultaten für den Rektifikationsprozess. So wird hier eine kontinuierliche Rektifikation modelliert, obwohl die Daten des Fallbeispiels für einen Batchprozess gelten. Zudem wird aus einzelnen ALM-Gemische das Produkt aus dem Kolonnensumpf (Toluol, Wasser, Benzol/Toluol) und nicht als Destillat (Aceton, Methanol) gewonnen. Die Betriebsdaten des Fallbeispiels und des Modells in Tabelle 4 dargestellt. Es ist zu beachten, dass dieses Modell für die Berechnung der Stoffflüsse und des Energiebedarfes der Rektifikation mit weiteren Fallbeispielen noch stark verbessert werden muss.

Tabelle 4 Betriebsdaten der Rektifikation im WSH. In der Simulation der Rektifikation des Toluol-Gemisches werden ebenfalls 15 t Dampf benötigt. Mit dieser Vorgabe wurde eine Rektifikationskolonne spezifiziert, mit welcher alle ALM-Mischungen rektifiziert wurden.

	Einheit	Rektifikation Fallbeispiel	Modell Rektifikation
Energiebedarf	t Dampf	15	15.5 (nur Toluol-Methanol-Wasser-Gemisch)
Produktausbeute <sup>a</sup>	Massen %	85	80-90
Reinheit 1 Produkt	Massen %	99.5	>99.5
Reinheit 2 Produkte	Massen %		>97
Produkt	L/Stunde	bis 1300	1000
Trennstufenzahl		40	10
ALM Zufluss		Kolonnenboden	Kolonnenboden (Stufe 10)
Rücklaufverhältnis		1-4	39
Eintrittstemperatur des ALM in Kolonne	°C	130	100
Austrittstemperatur des ALM aus Kolonne	°C	112	variabel <sup>b</sup>

<sup>a</sup> berechnet aus dem Quotient der Masse des Produktgemisches und des ALM-Gemisches

<sup>b</sup> Variable in Modell der Rektifikationskolonne

Um mit der Modellierung die realen Gegebenheiten im Batchreaktor anzunähern, wurden im Modell Sumpfpfprodukte durch einen nachgeschalteten Verdampfer ebenfalls in die Gasphase gebracht. Der gesamte Energieaufwand der Rektifikation dieser ALM-Gemische setzt sich nun aus der Energie für den Reboiler und der Energie der Heizung zusammen. Unter der Annahme, dass dem System sämtliche Energie durch Niederdruckdampf zugeführt wird, lässt sich der Dampfaufwand pro Charge ALM (13760 kg) berechnen. Die durch die Kondensation des Destillates freiwerdende Energie wird nicht dem Prozess gutgeschrieben. Falls damit bei der Trennung eines ALM-Gemisches die Vorgaben an Ausbeute und Reinheit des Produktes nicht erreicht werden konnten, wurden nur Kolonnenparameter verändert, welche sich nicht sensitiv auf die Heizleistung auswirken. Somit sollten die unterschiedlichen Heizleistungen, die je nach ALM-Gemisch berechnet wurden, nur auf Grund der ALM-Eigenschaften resultieren und nicht weil die Kolonne angepasst werden musste (8).

Aus dem ALM-Gemisch mit Benzol und Toluol als Hauptkomponenten werden zwei Lösungsmittel zurückgewonnen. Dafür muss das ALM-Gemisch zweifach rektifiziert werden, was im (kontinuierlichen) Modell mit zwei aufeinander folgenden Rektifikationskolonnen geschah. Die Gemische mit Aceton und Methanol als Hauptkomponenten konnten mit der spezifizierten Modellkolonne nicht gemäss obigen Vorgaben aufgetrennt werden; es wurde keine befriedigende Reinheit erreicht, da das Wasser nur unzureichend von Aceton bzw. Methanol getrennt werden konnte. Um die Produkte mit einer Reinheit von 99.5% zu erhalten, musste die Anzahl Böden der Kolonne von 10 auf 30 erhöht werden. Das Aceton-Gemisch konnte durch diese Modifizierung der Kolonne gut aufgetrennt werden und dessen Ausbeute von 80% liegt innerhalb der Vorgaben (Tabelle 4). Die Methanol-Mischung erreichte mit dieser Kolonnenspezifizierung ebenfalls die geforderte Produktreinheit von mindestens 99.5%, doch ist die Ausbeute mit 55% ungenügend. Für die Rektifizierung der Methanol- und Aceton-Gemische in dieser Simulation wird sehr viel Energie gebraucht (97 bzw. 79 t Dampf / Charge, vgl. später in Tabelle 9). Dieser grosse Energiebedarf lässt sich mit den relativ stärkeren zwischenmolekularen Wechselwirkungen in diesen Gemischen erklären, zu deren Trennung mehr Energie benötigt wird. Durchschnittsdaten aus der chemischen Industrie geben zeigen, dass der Dampfbedarf für die Rektifikation eines ALM-Gemisches im allgemeinen 2 kg pro kg behandeltes ALM nicht übersteigt (4).

### 3 RESULTATE

#### 3.1 Analyse der ökologisch wichtigen Prozesse des Fallbeispiels und Erkenntnisse für ein abfalllösungsmittelspezifisches Bewertungsverfahren

Um festzustellen, welche Emissionen und Ressourcenverbräuche in der Bewertung der ALM-Behandlung vom ALM bzw. vom Anlagenbetrieb abhängen, muss die Bewertung der beiden Behandlungsoptionen auf die wichtigsten, ihr zugrunde liegenden Bewertungsbeiträge hin untersucht werden. Diese Bewertungsbeiträge können unterschiedlichen Prozessen im Werk Schweizerhalle oder vorgelagerten Prozessen zugeordnet werden. Danach ist es möglich festzustellen, ob die Nachfrage nach einem Hilfsstoff oder einer Energiedienstleistung mit der Zusammensetzung des ALMs zusammenhängt (z.B. NaOH-Bedarf für die Neutralisation von  $\text{SO}_x$  im Rauchgas, das aus schwefelhaltigem ALM gebildet wurde) oder lediglich für den Betrieb der Verbrennungs- bzw. Rektifikationsanlage nötig ist (z.B. Methanol zur Reinigung der Rektifikationskolonne). Gutschriften wurden bei dieser Beitragsanalyse wichtiger Prozesse nicht berücksichtigt, da sie einerseits einfach entsprechenden Prozessen zugeordnet werden können und bei der Energieversorgung vom gewählten Szenario abhängen (Tabelle 2). Die analysierten Bewertungsbeiträge umfassen somit nur Umweltbelastungen.

Es zeigt sich, dass wenige Emissionen und Ressourcenverbräuche in beiden Bewertungsmethode für einen grossen Teil des Gesamtergebnisses verantwortlich sind. In **Abbildung 3** wird ersichtlich, dass mit der Bewertung von vier Emissionen  $\text{CO}_2$ ,  $\text{SO}_x$ ,  $\text{NO}_x$  und NMVOC mittels UBP 91% des Gesamtergebnisses der ALM-Verbrennung erfasst werden können. Die restlichen 9% entfallen auf die verbleibenden 102 bewerteten Emissionen und Ressourcenverbräuche. Ein ähnliches Bild ergibt sich bei der gleichen Auswertung nach dominanten Emissionen und Ressourcenverbräuchen der Rektifikation von ALM (**Abbildung 4**). Hier können die wichtigsten 7 von 108 Emissionen und Ressourcenverbräuche zur Erfassung von 91% des Gesamtergebnisses benutzt werden. Die Auswertung mittels Eco-Indicator 99 führt zu einem vergleichbaren Resultat (Daten nicht gezeigt).

##### 3.1.1 Beitragsanalyse des LCAs der ALM-Verbrennung

Die Zuordnung der Emissionen aus der Bewertung der ALM-Verbrennung zu den dazu verantwortlichen Prozessen ist in Tabelle 5 gezeigt. Darin ist dargestellt, wie gross der Anteil von Emissionen und Ressourcenverbräuchen pro Prozess in Prozent des Gesamtergebnisses ist. Durch den Betrieb der ALV mit durchschnittlichem ALM wird  $\text{CO}_2$  freigesetzt, dass für 58% des Gesamtergebnisses aus dem LCA des Fallbeispiels mittels Umweltbelastungspunkten (UBP) verantwortlich ist. Wie in **Abbildung 3** gezeigt, sind 65% der gesamten Umweltbelastung mit  $\text{CO}_2$ -Emissionen zu erklären. Die gesamten  $\text{CO}_2$ -Emissionen stammen aus lediglich vier Prozessen des LCAs, dem Betrieb der ALV, der Bereitstellung von Heizöl, NaOH und Strom (hier schweizerischer Strommix). Diese vier Prozesse beinhalten auch jeweils mindestens 97% der Beiträge der anderen drei wichtigen Emissionen,  $\text{SO}_x$ ,  $\text{NO}_x$  und NMVOC zur gesamten Umweltbelastung der ALM-Verbrennung. Werden nur diese vier Prozesse herangezogen, um das System ALM-Verbrennung zu modellieren und nur vier Emissionstypen ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{SO}_x$ ,  $\text{NO}_x$  und NMVOC) pro Prozess berücksichtigt, können schon 90% der Umweltbelastung der ALM-Verbrennung quantifiziert werden.

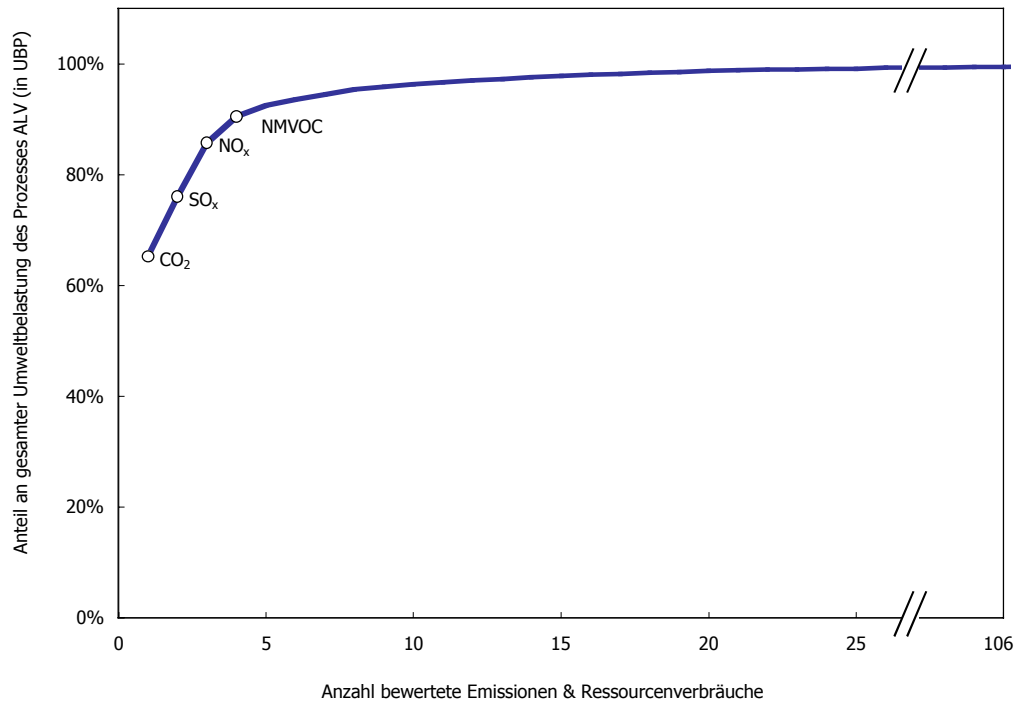


Abbildung 3 Beiträge einzelner Emissionen und Ressourcenverbräuche zur Gesamtbewertung des Prozesses ALM-Verbrennung mittels UBP. Mit der Bewertung der vier wichtigsten Emissionen CO<sub>2</sub>, SO<sub>x</sub>, NO<sub>x</sub> und NMVOC (von total 106 bewerteten Emissionen und Ressourcenverbräuchen) werden 91% des Gesamtergebnisses erfasst.

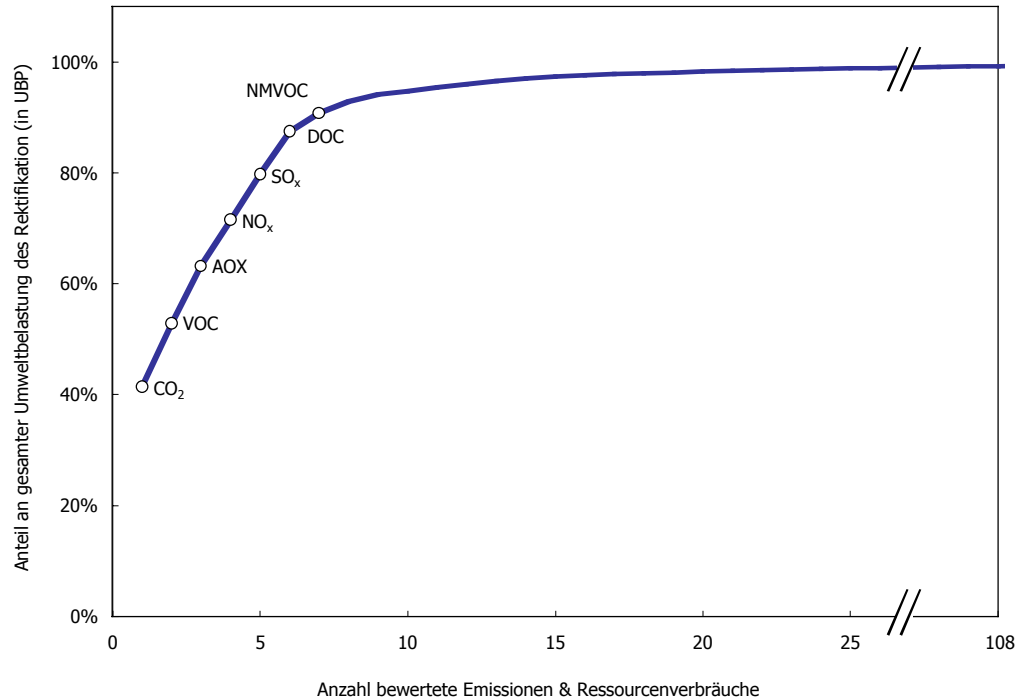


Abbildung 4 Beiträge einzelner Emissionen und Ressourcenverbräuche zur Gesamtbewertung des Prozesses ALM-Rektifikation mittels UBP. Durch die Bewertung der wichtigsten 7 von 108 Emissionen und Ressourcenverbräuche werden 91% des Gesamtergebnisses erfasst.



Tabelle 5 Analyse der wichtigsten Prozesse und Emissionen bei der Bewertung der ALM-Verbrennung mittels Methode der ökologischen Knappheit und Eco-Indicator 99. Die Angaben beziehen sich auf den prozentualen Beitrag eines Prozesses bzw. einer Emission oder eines Ressourcenverbrauchs auf die Bewertung des Prozesses ALM-Verbrennung.

Analyse der Umweltbelastung in UBP des Prozesses ALM-Verbrennung									
	Emissionstyp				Ausswertung				
	CO <sub>2</sub>	SO <sub>x</sub>	NO <sub>x</sub>	NM VOC	übrige Emissionen	Beitrag Prozess zu Gesamtbewertung	Beitrag Prozess zu Gesamtbewertung ohne übr. Emissionen	Prozessbewertung	Prozessbewertung ohne übr. Emissionen
Betrieb ALV	58%	0.23%	4.1%	0%	1.7%	64%	97%		
Heizöl	4.2%	6.7%	2.5%	0.36%	4.1%	18%	77%		
NaOH	1.4%	2.2%	2.2%	4.2%	2.4%	12%	81%		
Strom	1.0%	1.4%	0.73%	0.10%	1.7%	4.9%	65%		
übrige Prozesse	0.29%	0.28%	0.15%	0.027%		0.75%			
Beitrag Emissionstyp zu Gesamtbewertung	65%	11%	10%	4.7%					
Anteil der vier Prozesse am Beitrag des Emissionstyps	100%	97%	98%	99%					<b>90%</b>
Analyse der Umweltbelastung in ei99-Pt des Prozesses ALM-Verbrennung									
	Ressourcentyp				Emissionstyp		Ausswertung		
	Rohöl	Kohle	Erdgas	CO <sub>2</sub>	SO <sub>x</sub>	NO <sub>x</sub>	übrige Emissionen	Beitrag Prozess zu Gesamtbewertung	Prozessbewertung ohne übr. Emissionen
Betrieb ALV	0%	0.00%	0%	22%	2.7%	0%	2.5%	28%	91%
Heizöl	40%	0.21%	0.06%	0.53%	1.4%	0.91%	1.6%	44%	96%
NaOH	3.0%	4.1%	2.1%	1.6%	1.6%	2.8%	6.2%	21%	71%
Strom	0.82%	1.1%	0.41%	0.37%	0.47%	0.57%	1.2%	5.0%	76%
übrige Prozesse	0.18%	0.24%	0.57%	0.16%	0.11%	0.22%		1.5%	
Beitrag Ressource/Emission zu Gesamtbewertung	44%	5.7%	3.1%	25%	6.3%	4.5%			
Anteil der vier Prozesse am Beitrag des Emissionstyps	100%	96%	82%	99%	98%	95%			<b>87%</b>

Die Analyse der Bewertungsbeiträge zur ALM-Verbrennung mittels Eco-Indicator 99 kann mit den gleichen vier Prozessen Betrieb der ALV, der Bereitstellung von Heizöl, NaOH und Strom ebenfalls zu grossen Teilen abgebildet werden. Die Auswertung mittels Eco-Indicator 99 zeigt, dass diese Prozesse nicht nur für die wichtigsten Luftemissionen ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{SO}_x$ ,  $\text{NO}_x$ ) verantwortlich sind, sondern auch die im Eco-Indicator 99 stark bewerteten Ressourcenverbräuche aus nichterneuerbaren Quellen (Rohöl, Kohle und Erdgas) verursachen. Die Analyse der Bewertungsbeiträge bestätigt die Erkenntnis aus der Analyse der Bewertung mittels UBP, dass eine Modellierung der vier Prozesse ausreicht, um das System ALM-Verbrennung repräsentativ im LCA abzubilden: 87% des Gesamtergebnisses werden durch vier Prozesse unter Berücksichtigung von sechs Ressourcenverbräuchen und Emissionen abgedeckt.

### 3.1.2 Erstellung von Modulen zur Bewertung ALM-Verbrennung

Ziel der Erstellung eines Bewertungsverfahrens ist es, die ökologische Bewertung des ALM-Verbrennungsprozesses in Abhängigkeit der ALM-Zusammensetzung durchzuführen und Umweltbelastungen und Gutschriften separat auszuweisen. Dazu werden die vier in der Beitragsanalyse in Tabelle 5 identifizierten Prozesse geprüft, ob die ihnen zugrunde liegende Umweltbelastung von der ALM-Zusammensetzung abhängt. Kann kein solcher Zusammenhang hergestellt werden, gelten sie als ALM-unabhängige Beiträge.

Beim *Betrieb der ALV* wird  $\text{CO}_2$  freigesetzt, das durch die nahezu vollständige Oxidation von Brennstoff-Kohlenstoff zustande kommt. Diese Emission kann durch die Charakterisierung des Kohlenstoffgehaltes des ALMs abgeschätzt werden. Alle weiteren wichtigen Emissionen der ALV ( $\text{SO}_x$ ,  $\text{NO}_x$ , NMVOC, Tabelle 5) sind entweder von geringerer Bedeutung für die Bewertung (NMVOC,  $\text{SO}_x$ ) oder können nicht eindeutig ALM-Inhaltsstoffen ( $\text{NO}_x$ ) zugeordnete werden. Sie gelten deshalb hier als betriebsbedingt. Es ist zu beachten, dass die Umweltbelastung, die mit dem Schwefelgehalt des ALM zusammenhängt, nicht primär die Emission von  $\text{SO}_x$  (0.23% des Gesamtergebnisses in UBP, 2.7% des Gesamtergebnisses in ei99-Pt) sondern die Bereitstellung von Natronlauge zu deren Neutralisation in der Rauchgaswäsche ist.

Der *Einsatz von Heizöl* dient einerseits der Inbetriebnahme (Anfahren) des Ofens und andererseits zur Aufrechterhaltung eines minimalen Brennwerts im Überhitzer (24). Deshalb ist ein Teil des Heizöleinsatzes betriebsbedingt. Der ALM-abhängige Teil - als Heizöl werden im LCA sowohl Heizöl im Überhitzer als auch Rektifikationsrückstände mit Überhitzerqualität zusammengefasst - wird in Abhängigkeit des Brennwerts zugegeben. Die Menge an Heizöl im Überhitzer wurde nach einer Analyse der Energieproduktion aus der ALV ermittelt (8) und ist in Tabelle 3 dargestellt. Die Analyse der Brennstoffmengen und deren Beiträge zur Energieproduktion der ALV ist schwierig zu erstellen, da im Werk Schweizerhalle zwei ALM-Verbrennungsanlagen in Betrieb sind. Die in Tabelle 3 zusammengestellten Daten gelten als Berechnungsgrundlage für diese Arbeit, können sich aber je nach Betriebsjahr ändern. Aus Tabelle 3 ist ersichtlich, dass rund 2900 t Heizöl und Heizölersatz pro Jahr im Überhitzer eingesetzt wurden. Die Bereitstellung dieser Heizölmenge wurde im LCA separat als Umweltbelastung ausgewiesen. Für die Berechnung der ALM-abhängigkeit dieses Überhitzerbrennstoffes wird angenommen, dass dieser Bedarf linear vom Brennwert des ALM abhängt und dass mit einem hypothetischen Brennstoff mit Brennwert von 42 MJ/kg keine Stützfeuerung nötig wäre. Je nach benötigter Menge Stützbrennstoff werden in Funktion des Brennwertes des ALMs proportional Umweltbelastungspunkte berechnet.

Der *NaOH-Bedarf* trägt durch die Umweltbelastung der NaOH-Herstellung 12% (UBP) bzw. 21% (ei99-Pt, Tabelle 5) zur Bewertung der ALM-Verbrennung bei. Dieser Bedarf stammt aus der Neutralisation von schwefelhaltigen Säuren sowie Halogenwasserstoffen in der Abwasserreinigung und Rauchgaswäsche (24). Nach Abzug von schwefel- und/oder halogenhaltigen Betriebsmitteln (Tabelle A1) kann diese Umweltbelastung direkt den Schwefel- und Halogengehalt des ALM zugewiesen werden. Aufgrund der Stöchiometrie der Neutralisation von

Schwefelsäure und Halogenwasserstoffen wird davon ausgegangen, dass pro mol Schwefel zwei mol NaOH eingesetzt werden, bei der Neutralisation von HCl, HBr oder HI hingegen äquimolare Mengen.

Der *Strombedarf* der ALM-Verbrennung spielt eine weniger wichtige Rolle bei der ALV-Bewertung (4.9% des Gesamtbeitrages, Tabelle 5). Stromverbrauch wird als betriebsbedingte Grösse angesehen und trägt daher einen konstanten Beitrag zur Umweltbelastung bei.

Die *Gutschriften für in ALV produzierten Dampf und Strom* kann zu unterschiedlichen Resultaten des LCAs führen. Bei der Betrachtung der werksinternen Perspektive, wie sie bei Valorec Services AG an sinnvollsten erscheint, wird im Folgenden angenommen, dass ALM den Einsatz von Heizöl in der ALV substituiert. Damit lässt sich quantifizieren, wie gross die ökologische Gutschrift - als negative Umweltbelastung - in Abhängigkeit des Brennwertes des ALM ist. Diese Gutschrift wird um den Anteil des Wassers im ALM korrigiert, der in der ALV verdampft werden muss.

Aufgrund der Charakterisierung der Abhängigkeit dieser LCA-Prozessbeiträge von Eigenschaften des ALM kann die Umweltbelastung für die Verbrennung einer bestimmten Menge ALM,  $U_{\text{ALM-Verbrennung}}$ , wie folgt in Umweltbelastungspunkten verschiedener Bewertungsmethoden ausgedrückt werden (Gleichung 1).

$$U_{\text{ALM-Verbrennung}} = U_{\text{G}}^{\text{Verbr}} + U_{\text{CO}_2} + U_{\text{NaOH}} + U_{\text{Überhitzer}} + U_{\text{Energie}} \quad (1)$$

wobei  $U_{\text{G}}^{\text{Verbr}}$  die Grundbelastung mit ALM-unabhängigen Beiträgen aus dem Betrieb der ALV und der Vorprozesskette ist,  $U_{\text{CO}_2}$  die Umweltbelastung aus der Emission von  $\text{CO}_2$  darstellt,  $U_{\text{NaOH}}$  für diejenige aus dem Einsatz von NaOH steht und  $U_{\text{Überhitzer}}$  die Umweltbelastung aus dem Einsatz von Heizöl und Heizölersatzstoffe im Überhitzer und  $U_{\text{Energie}}$  die Gutschriften für die in der ALV produzierte Energie quantifizieren. Es ist zu beachten, dass in Gleichung 1 alle Beiträge als Umweltbelastungen pro kg ALM formuliert sind, so dass Gutschriften mit einem negativen Betrag eingesetzt werden.

Mit dem im Kapitel 'Daten und Methoden' beschriebenen Vorgehen konnten Bewertungsfaktoren für die fünf geschilderten Beiträge zur Umweltbelastung der Verbrennung einer Menge ALM abgeleitet werden. Wie Tabelle 6 zeigt (Gleichungen 1a bis 1d), lassen sich diese Bewertungsfaktoren  $b_i$ , mit Parametern des ALM multiplizieren, um so den Umweltbelastung eines Beitrages (z.B. durch  $\text{CO}_2$ -Emissionen) zu berechnen. Für eine Bewertung der ALM-Verbrennung müssen lediglich die Kohlenstoff- ( $f_{\text{C}}$ ) und Schwefelgehalte ( $f_{\text{S}}$ ), die Halogenanteile ( $f_{\text{Cl}}$ ,  $f_{\text{Br}}$ ,  $f_{\text{I}}$ ) und die Verbrennungsenthalpie ( $\Delta H_{\text{comb}}^{\text{ALM}}$ , ohne Wasseranteile) pro kg ALM bekannt sein.

In Tabelle 6 sind Bewertungsfaktoren für die Methode der ökologischen Knappheit und des Eco-Indicators 99 sowie für die Bewertung mittels Primärenergiebedarf (MJ PE) angegeben. Sie beruhen auf der Bewertung der identischen LCAs (vgl. Daten und Methoden) und sind als Umweltbelastungspunkte der jeweiligen Methode pro angegebenen Einheiten des ALM angegeben. Die Bewertungsfaktoren für Energiegutschriften,  $U_{\text{Energie}}$ , sind in Abhängigkeit des Energieversorgungsszenarios angegeben (vgl. Abkürzungen in Tabelle 2).

Tabelle 6 Verfahren für die Berechnung der Umweltbelastung aus der Verbrennung eines kg ALM in der ALV. Vom ALM müssen die Eingabeparameter (Eigenschaften des ALM) bekannt sein. Zur Berechnung können Bewertungsfaktoren von Bewertungsmethoden (a) Methode der ökologischen Knappheit, (b) Eco-Indicator 99 und (c) Primärenergieverbrauch herangezogen werden.

Beitrag	Symbol	Berechnung	Gleichung	Eingabeparameter	Einheit	Bewertungsfaktoren $b_i$			Punkte /
Grundbelastung	$U_G$	$U_G$		Bezeichnung		UBP	EI99	MJ PE	
CO <sub>2</sub> -Emissionen	$U_{CO_2}$	$U_{CO_2} = f_C \cdot b_{CO_2}$	(1a)	C-Gehalt	$f_C$	$U_G$			kg ALM
NaOH-Bedarf <sup>a</sup>	$U_{NaOH}$	$U_{NaOH} = \sum_{i=S, Cl, Br, I} f_i \cdot b_i$	(1b)	S-Gehalt	$f_S$	$b_{CO_2}$	0.0162	0	kg C/
				Cl-Gehalt	$f_{Cl}$	$b_S$	0.394	91.4	kg S
				Br-Gehalt	$f_{Br}$				
				I-Gehalt	$f_I$				
Brennstoffe im Überhitzer	$U_{\text{Überhitzer}}$	$U_{\text{Überhitzer}} = b_{\text{Überhitzer}} \cdot \Delta H_{\text{comb}}^{\text{ALM}} + a_{\text{Überhitzer}}$	(1c)	Verbrennungs-enthalpie ALM	$\Delta H_{\text{comb}}^{\text{ALM}}$	$b_{Cl}$	0.178	41.3	kg Cl
						$b_{Br}$	0.079	18.3	kg Br
						$b_I$	0.0498	11.5	kg I
						$b_{\text{Überhitzer}}$	-0.000643	-0.205	MJ
Energieproduktion	$U_{\text{Energie}}$	$U_{\text{Energie}} = \left( \Delta H_{\text{comb}}^{\text{ALM}} - \Delta H_{\text{vap}}^{\text{H}_2\text{O}} \cdot f_{\text{H}_2\text{O}} \right) \cdot b_{\text{Energie}}$	(1d)	Verbrennungs-enthalpie ALM	$\Delta H_{\text{comb}}^{\text{ALM}}$	$a_{\text{Überhitzer}}$	0.0270	8.61	kg ALM
				H <sub>2</sub> O-Gehalt	$f_{\text{H}_2\text{O}}$	$b_{\text{Energie}}^{\text{H}_2\text{O}}$	-0.00443	-1.40	MJ
				Verdampfungs-enthalpie H <sub>2</sub> O <sup>b</sup>	$\Delta H_{\text{vap}}^{\text{H}_2\text{O}}$	$b_{\text{Energie}}^{\text{H}_2\text{O}}$	-0.00423	-1.47	MJ
						$b_{\text{Energie}}^{\text{H}_2\text{O}}$	-0.00552	-1.50	MJ

<sup>a</sup> Der NaOH-Bedarf für die Neutralisation weiterer, säurebildender ALM-Inhaltsstoffe (z.B. Fluor) könnte auf gleiche Weise berechnet werden.

<sup>b</sup> Die Verdampfungsenthalpie von H<sub>2</sub>O,  $\Delta H_{\text{vap}}^{\text{H}_2\text{O}}$ , bei 1200 °C beträgt 5 MJ/kg H<sub>2</sub>O

### 3.1.3 Beitragsanalyse des LCAs der ALM-Rektifikation

Für die Analyse der wichtigsten Beiträge zur Bewertung der ALM-Rektifikation wurden beide Szenarien mit werksinterner Energieversorgung berücksichtigt. Die Resultate sind in Tabelle 7 dargestellt. Auf eine Aufschlüsselung der Beiträge nach wichtigsten Emissionen und Ressourcenverbräuche wurde verzichtet, da die direkten Emissionen der Rektifikation einfach zu ermitteln sind (AOX und DOC in Abwasserbehandlung, vgl. Anhang). Die Relevanz der verschiedenen Prozesse wurde wiederum als prozentualer Anteil zur Gesamtbelastung der Rektifikation ohne Berücksichtigung der Gutschriften dargestellt. AOX und DOC verursachen 18% der Gesamtbelastung in UBP (Tabelle 7, oberer Teil), wenn davon ausgegangen wird, dass die Energie (Dampf- und Strom) für den Betrieb der Rektifikation aus der Verbrennung von ALM in der ALV (Szenario R11, Tabelle 2) stammt. Die Betriebsmittel, Methanol und Stickstoff zum Reinigen der Kolonne und der Leitungen verursachen 25% der Gesamtbelastung. Die Beiträge des Rektifikationsprozesses und der Betriebsmittel bleiben gleich, wenn statt ALM Heizöl in der ALV zur Dampf- und Strombereitstellung (Szenario R12) verbrannt werden. Die Wahl des Energieversorgungsszenarios beeinflusst aber die relative Bewertung der Dampf- und Strombereitstellung. Während im ersten Fall mit ALM als Brennstoff in der ALV die Umweltbelastung der Dampf- und Strombereitstellung alleine auf einer Aufteilung der Emissionen aus der ALV beruht, kommt im zweiten Fall (Heizöl als Brennstoff in ALV) die Umweltbelastung aus der Bereitstellung von Heizöl hinzu. In dieser Arbeit erfolgte die Aufteilung der Umweltbelastung auf Dampf- und Strom proportional zur Exergiegehalt dieser beiden Produkte (12). Bei einer Bewertung der Rektifikation mittels UBP wird die Dampfbereitstellung zum anteilsmässig wichtigsten Prozess (>56% der Gesamtbelastung).

Tabelle 7 Analyse der wichtigsten Prozesse Bewertung der ALM-Rektifikation mittels Methode der ökologischen Knappheit und Eco-Indicator 99. Die Angaben beziehen sich auf den prozentualen Beitrag eines Prozesses zur Bewertung der ALM-Rektifikation.

#### Analyse der Umweltbelastung in UBP des Prozesses ALM-Rektifikation

		Energieversorgung mit ALM in ALV	Energieversorgung mit Heizöl in ALV
Prozess	Rektifikation	18%	15%
	Betriebsmittel	25%	21%
	Dampf	56%	63%
	Strom	0.80%	1%

#### Analyse der Umweltbelastung in EI99-Pt des Prozesses ALM- Rektifikation

		Energieversorgung mit ALM in ALV	Energieversorgung mit Heizöl in ALV
Prozess	Rektifikation	0.0090%	0.0047%
	Betriebsmittel	43%	22%
	Dampf	56%	77%
	Strom	0.84%	1.1%

Die Auswertung der Bewertung mittels Eco-Indicator 99 weist ebenfalls die Dampfbereitstellung für die Rektifikation als ökologisch wichtigsten Prozess aus (Tabelle 7). Da mit dieser Bewertungsmethode Ressourcenverbräuche stark gewichtet werden, spielen die Betriebsemissionen der Rektifikation eine vernachlässigbare Rolle. Die Umweltbelastung aus der Vorprozesskette verursacht mehr als 99.9% der Gesamtbewertung der Rektifikation (Tabelle 7). Die Bedeutung des Energieversorgungsszenarios beeinflusst die relative Bewertung der Dampf- und Strombereitstellung in ähnlicher Weise wie bei der Bewertung

mittels UBP, so dass die Dampfbereitstellung den wichtigsten Beitrag zur Umweltbelastung durch die ALM-Rektifikation darstellt.

### 3.1.4 Erstellung von Modulen zur Bewertung von ALM-Rektifikation

Wie bei der Analyse der Umweltbelastungsbeiträge der ALM-Verbrennung geht es bei der Erstellung von Modulen zur Bewertung von ALM-Rektifikation darum, ein Bewertungsverfahren zu erstellen, das von der Zusammensetzung des ALMs abhängt. Aufgrund der Beitragsanalyse in Tabelle 7, müssen dazu vier ökologisch relevante Prozesse aus dem LCA der Rektifikation berücksichtigt werden.

Die *Emissionen aus dem Betrieb* der Rektifikationskolonne zur Auftrennung eines Toluol-Methanol-Hydroxyphenylpropionsäure-Wasser-Gemisches können sowohl vom behandelten ALM als auch von den zur Reinigung eingesetzten Hilfsstoffen stammen. Diese Beiträge, die von geringer Bedeutung für die gesamte Umweltbelastung durch die Rektifikation sind (Tabelle 7), werden sie hier als betriebsbedingt betrachtet. Gleiches gilt für die *Hilfsstoffe* Methanol und Stickstoff, die unabhängig von der ALM-Zusammensetzung zum Einsatz kommen.

*Dampf- und Strombedarf* für den Rektifikationsprozess sind dagegen stets von der Art und der Zusammensetzung des bearbeiteten ALM abhängig. Wichtige Randbedingungen der Rektifikation, die sich auf die Quantifizierung des Dampf- und Strombedarfs auswirken sind etwa

- die angestrebte Reinheit des Rektifikationsproduktes
- die Qualität des Rektifikationsrückstandes (z.B. Brennstoff mit Überhitzerqualität für die ALV)
- anlagespezifische Größen wie die Grösse der Kolonne, deren Aufbau, Füllkörper etc.

*Gutschriften für wiedergewonnenes Lösungsmittel* lassen sich durch die Vermeidung der Lösungsmittelherstellung aus der Petrochemie quantifizieren. Dieser Beitrag hängt stark von der Trennleistung und Ausbeute der Kolonne ab. Im Fallbeispiel (Toluol-Methanol-Hydroxyphenylpropionsäure-Wasser-Gemisch) beträgt die Ausbeute ca. 85% (Tabelle A2). Weitere Gutschriften entstehen bei der Rektifikation von ALM durch die *Verbrennung der Rektifikationsrückstände* in der ALV, wo mit Rektifikationsrückstand Heizöl als Brennstoff für die Dampf- und Stromerzeugung eingespart werden kann.

Wie für den Verbrennungsprozess von ALM lässt sich für die Rektifikation ein Berechnungsverfahren ableiten, dass die Beiträge zur Umweltbelastung für die in Tabelle 7 aufgeführten Prozesse in Abhängigkeit der ALM-Zusammensetzung bzw. als betriebsbedingte Größen berücksichtigt. Die gesamte Umweltbelastung einer Menge ALM in der Rektifikation,  $U_{\text{ALM-Rektifikation}}$ , lässt sich aus den verschiedenen Beiträgen in Gleichung 2 beschreiben.

$$U_{\text{ALM-Rektifikation}} = U_{\text{G}}^{\text{Rekt}} + U_{\text{Dampf}} + U_{\text{Strom}} + U_{\text{Rückstand}} + U_{\text{Lösungsmittel}}(\text{Produkt}) \quad (2)$$

wobei  $U_{\text{G}}^{\text{Rekt}}$  die Umweltbelastung aus betriebsbedingten Emissionen und Hilfsstoffen,  $U_{\text{Dampf}}$  der Umweltbelastung der Dampfbereitstellung und  $U_{\text{Strom}}$  der entsprechende Beitrag der Strombereitstellung pro kg ALM.  $U_{\text{Rückstand}}$  stellt die Umweltbelastung bzw. Gutschrift aus der Rückstandsverbrennung in der ALV dar,  $U_{\text{Lösungsmittel}}(\text{Produkt})$  entspricht der Umweltbelastung aus der petrochemischen Lösungsmittelherstellung des wiedergewonnenen Produktgemisch. Wie in Gleichung 1 sind alle Beiträge in Gleichung 2 als Umweltbelastungen pro kg ALM formuliert sind, so dass Gutschriften mit einem negativen Betrag eingesetzt werden. Dies gilt hier für  $U_{\text{Rückstand}}$  und  $U_{\text{Lösungsmittel}}(\text{Produkt})$ .

Tabelle 8 Verfahren für die Berechnung der Umweltbelastung aus der Rektifikation eines kg ALM. Für die Bewertung des Rektifikationsrückstandes muss das Verfahren für die ALM-Verbrennung und die entsprechenden Eingabeparameter (Eigenschaften des ALM, Tabelle 6) bekannt sein. Zur Berechnung können Bewertungsfaktoren von Bewertungsmethoden (a) Methode der ökologischen Knappheit, (b) Eco-Indicator 99 und (c) Primärenergieverbrauch herangezogen werden.

Beitrag	Symbol	Berechnung	Gleichung	Eingabeparameter	Einheit	Bewertungsfaktoren $b_i$	Punkte /
Grundbelastung	$U_G$	$U_G$		Bezeichnung		UBP	MJ PE
Dampfbedarf	$U_{\text{Dampf}}$	$U_{\text{Dampf}} = h_{\text{Dampf}} \cdot b_{\text{Dampf}}$	(2a)	Dampfbedarf $h_{\text{Dampf}}$	kg Dampf/kg ALM	$U_G$ $b_{\text{Dampf}}(R11)$ $b_{\text{Dampf}}(R12)$ $b_{\text{Dampf}}(R21)$ $b_{\text{Dampf}}(R22)$	1.37 1.25 3.67 3.67 4.21 kg Dampf
Strombedarf	$U_{\text{Strom}}$	$U_{\text{Strom}} = h_{\text{Strom}} \cdot b_{\text{Strom}}$	(2b)	Strombedarf $h_{\text{Strom}}$	kWh/kg ALM	$b_{\text{Strom}}(R11)$ $b_{\text{Strom}}(R12)$ $b_{\text{Strom}}(R21)$ $b_{\text{Strom}}(R22)$	4.92 14.45 7.98 11.63 kWh Strom
Rückstandsbehandlung	$U_{\text{Rückstand}}$	$U_{\text{Rückstand}} = U_{\text{Rückstand in ALM-Verbrennung}}$	(2c)			vgl. Verfahren für ALM-Verbrennung	
Lösungsmittelproduktion	$U_{\text{Lösungsmittel}}$	$U_{\text{Lösungsmittel}} = U_{\text{LM-Herstellung Petrochemie}}$	(2d)			Umweltbelastung der Lösungsmittelherstellung	kg ALM

Tabelle 8 stellt die einzelnen Schritte für die Bewertung der Umweltbelastung aus der Rektifikation von ALM dar. Diese Umweltbelastung setzt sich aus einem konstanten Beitrag für die Grundbelastung sowie variable Beiträge für den Hilfsstoffbedarf ( $h_i$ ) an Dampf und Strom (Gleichungen 2a und 2b). Der Hilfsstoffbedarf wird mit den Bewertungsfaktoren ( $b_i$ ) für die Methode der ökologischen Knappheit und des Eco-Indicators 99 sowie für die Bewertung mittels Primärenergiebedarf (MJ PE) multipliziert, um die Umweltbelastung der Rektifikation pro kg ALM zu berechnen. Die Gutschriften für die Rückstandsverbrennung, können mit Gleichung 1 und entsprechendem Berechnungsverfahren in Tabelle 6 berechnet werden. Sie hängen, wie die Gutschriften für die Lösungsmittelproduktion, von der Ausbeute des Lösungsmittelproduktes in der Rektifikation ab.

### 3.2 Verfahren für die Berechnung der Umweltbelastung von ALM-Behandlungsoptionen

Die Berechnung der Umweltbelastung einer ALM-Behandlungsoption pro kg ALM in Umweltbelastungspunkten der verschiedenen Bewertungsmethoden lässt sich wie in Abbildung 2 dargestellt als Umweltbelastung der funktionellen Einheit berechnen. Die Umweltbelastung der funktionellen Einheit,  $U_{\text{ALM-Behandlungsoption}}$ , setzt sich aus Beiträgen für die Umweltbelastung der petrochemische Lösungsmittelherstellung,  $U_{\text{Lösungsmittel}}(\text{ALM})$ , und einem Beitrag für die Umweltbelastung der ALM-Behandlung zusammen (Gleichung 3).

$$U_{\text{ALM-Behandlungsoption}} = U_{\text{Lösungsmittel}}(\text{ALM}) + U_{\text{ALM-Behandlung}} \quad (3)$$

Die Umweltbelastung der petrochemische Lösungsmittelherstellung eines ALM-Gemisches besteht aus der Summe der Umweltbelastungen der ALM-Komponenten. Die Umweltbelastung einer Komponente  $i$  entspricht dem Produkt aus  $U_{\text{Lösungsmittel}, i}$  und ihrem Massenanteil,  $m_i$ . Oft wird  $U_{\text{Lösungsmittel}}(\text{ALM})$  vom Beitrag der Hauptkomponente (z.B. Toluol) dominiert.

$$U_{\text{Lösungsmittel}}(\text{ALM}) = \sum_i U_{\text{Lösungsmittel}, i} \cdot m_i \quad (4)$$

Die Umweltbelastung der *funktionellen Einheit der ALM-Verbrennung*,  $U_{\text{Verbrennung}}$ , lässt sich mit Gleichungen 1 und 3 wie folgt berechnen:

$$U_{\text{Verbrennung}} = U_{\text{Lösungsmittel}}(\text{ALM}) + U_{\text{ALM-Verbrennung}} \quad (5a)$$

$$U_{\text{Verbrennung}} = \sum_i U_{\text{Lösungsmittel}, i} \cdot m_i + U_{\text{G}}^{\text{Verbr}} + U_{\text{CO}_2} + U_{\text{NaOH}} + U_{\text{Überhitzer}} + U_{\text{Energie}} \quad (5b)$$

Die Umweltbelastung der *funktionellen Einheit der ALM-Rektifikation*,  $U_{\text{Rektifikation}}$ , lässt sich in ähnlicher Weise mit Gleichungen 2 und 3 ausdrücken als:

$$U_{\text{Rektifikation}} = U_{\text{Lösungsmittel}}(\text{ALM}) + U_{\text{ALM-Rektifikation}} \quad (6a)$$

$$U_{\text{Rektifikation}} = \sum_i U_{\text{Lösungsmittel}, i} \cdot m_i + U_{\text{Lösungsmittel}}(\text{Produkt}) + U_{\text{G}}^{\text{Rekt}} + U_{\text{Dampf}} + U_{\text{Strom}} + U_{\text{Rückstand}} \quad (6b)$$

Wie für Gleichungen 1 und 2 angegeben, sind alle Beiträge als Umweltbelastungen pro kg ALM zu formulieren, wobei Gutschriften mit dem negativen Betrag eingesetzt werden.

### 3.3 Verbrennen oder Rektifizieren?

Welches Verfahren zur Behandlung eines ALM-Gemisches ist aus ökologischer Sicht sinnvoller, die Verbrennung oder die Rektifikation? Das im vorangegangenen Kapitel eingeführte Berechnungsverfahren für die beiden ALM-Behandlungsoptionen erlaubt eine Abschätzung der Umweltbelastung ausgehend von Informationen über die Umweltbelastung der petrochemischen Lösungsmittelherstellung, über die Zusammensetzung und physikalisch-chemische Eigenschaften des ALMs und des Rektifikationsrückstandes sowie über den



Dampfbedarf des Rektifikationsprozesses. Im Folgenden wird zuerst die ökologische Bewertung der ALM-Verbrennung und -Rektifikation des Fallbeispiels im Detail anhand ihrer Beiträge in Gleichungen 1 und 2 für verschiedene Szenarien der Energieversorgung ausgewertet. Um anschliessend zu prüfen, inwiefern die aus dem Fallbeispiel gewonnenen Erkenntnisse auch für andere ALM-Gemische gelten, werden fünf exemplarische ALM-Gemische mit dem Verfahren zur Abschätzung der Umweltbelastung mittels Gleichungen 5 und 6 bewertet.

### 3.3.1 Bewertung der ALM-Behandlungsoptionen des Toluol-Methanol-Wasser Fallbeispiels

Die Auswertung des Fallbeispiel-Gemisches aus Toluol, Methanol, Hydroxyphenylpropionsäure und Wasser in der ALM-Verbrennung und -Rektifikation erfolgte durch die Modellierung eines Toluol-Methanol-Wasser-Gemisches (im folgenden als Toluol-Gemisch bezeichnet). Die Beiträge der Hydroxyphenylpropionsäure sind aufgrund ihres geringen Massenanteiles im Gemisch für die ökologische Bewertung vernachlässigbar (8). Die Zusammensetzung des modellierten, ternären ALM-Gemisches sowie des Rektifikationsrückstandes, die im Folgenden diskutiert werden, ist in Tabelle 9 pro Charge (13760 kg) aufgeführt.

**Abbildung 5** zeigt die Bewertung des Toluol-Gemisches mit Bewertungsfaktoren für UBP (Tabelle 6) pro Charge des Szenarios mit werksinterner (V11), schweizerischer (V21) und europäischer (V22) Energieversorgung. Wie die Bewertungsfaktoren für Gleichung 1 in Tabelle 6 zeigen, *unterscheiden sich die Szenarien nur in Bezug auf die Gutschriften für die in der ALV erzeugte Energie* (Dampf und Strom). Die Bewertung der Verbrennung des Gemisches mit einer Gutschrift für eingespartes Heizöl in der ALV (V11) beläuft sich auf  $-13.3 \cdot 10^6$  UBP/Charge und wird von der Gutschrift für die Energieerzeugung,  $U_{\text{Energie}}$ , dominiert (Abbildung 5). Die Bewertung der Verbrennung des Gemisches mit Gutschrift für die schweizerische Energieversorgung unterscheidet sich lediglich aufgrund der Gutschriften für schweizerischen Strom, da auch die Bewertungsfaktoren für die erzeugte Energie,  $b_{\text{Energie}}$ , sehr ähnlich sind ( $-43.6$  UBP/MJ für V11,  $-42.2$  UBP/MJ für V21, Tabelle 6). Die Verbrennung des Toluol-Gemisches schneidet aus ökologischer Sicht noch besser ab, wenn damit durchschnittlicher europäischer Dampf (1) und Strom (UCPTE, (12)) eingespart werden können. Ein qualitativ ähnliches Bild ergibt die Bewertung der Verbrennungsszenarien des Toluol-Gemisches nach Gleichung 1 mit Bewertungsfaktoren, die auf dem Eco-Indicator 99 beruhen (**Abbildung 6**). Die Bewertung der Szenarien V11 und V21 für die werksinterne bzw. schweizerische Energieversorgung ( $-2110$  bzw.  $-2000$  ei99-Pt/Charge) unterscheiden sich aber im Vergleich zur Bewertung mit UBP-Bewertungsfaktoren weniger stark vom Resultat für das Szenario der europäischen Energieversorgung (V21,  $-2710$  ei99-Pt).

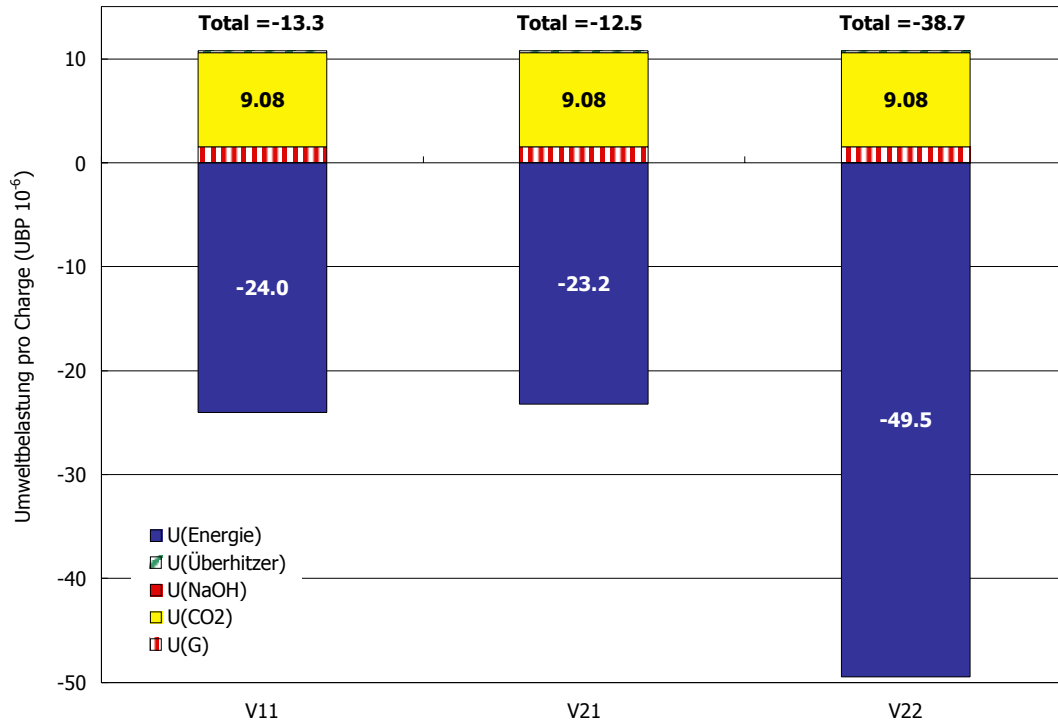


Abbildung 5 Bewertung der verschiedenen Szenarien für die Verbrennung von Toluol-Methanol-Wasser in der ALV-2 mit dem Berechnungsverfahren für die ALM-Verbrennung (Gleichung 1), das auf der Methode der ökologischen Knappheit beruht (V11 werksintern, V21 schweiz., V22 europ. Energieversorgung).

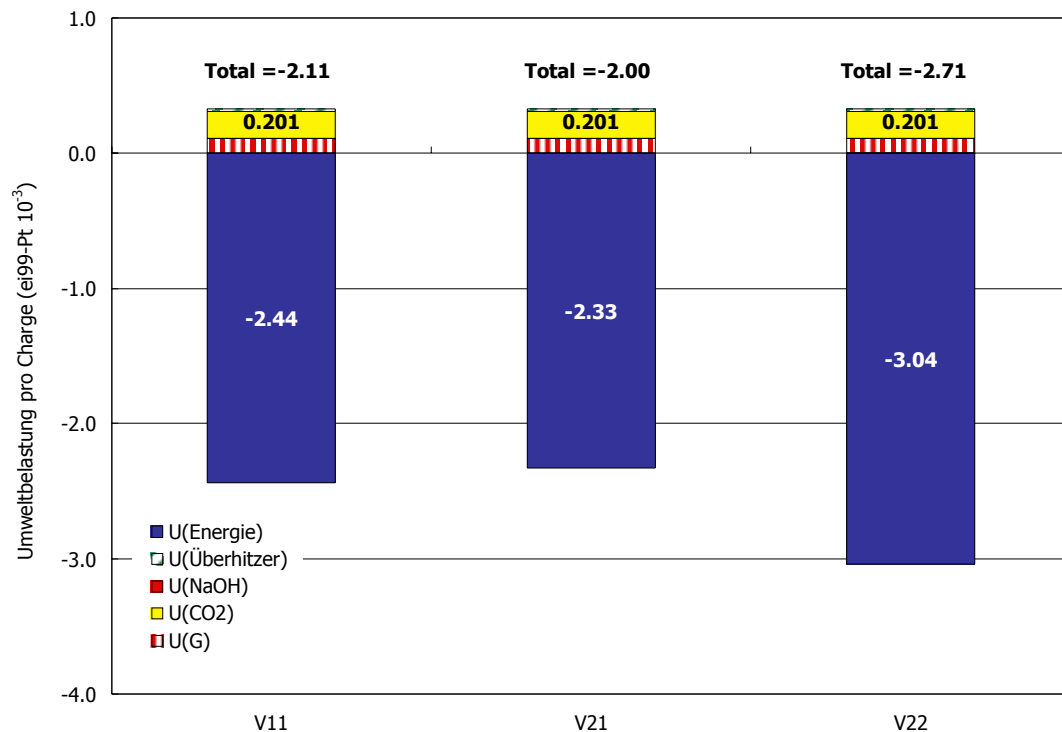


Abbildung 6 Bewertung der verschiedenen Szenarien für die Verbrennung von Toluol-Methanol-Wasser in der ALV-2 mit dem Berechnungsverfahren, das auf der Methode Eco-Indicator 99 beruht (V11 werksintern, V21 schweiz., V22 europ. Energieversorgung).

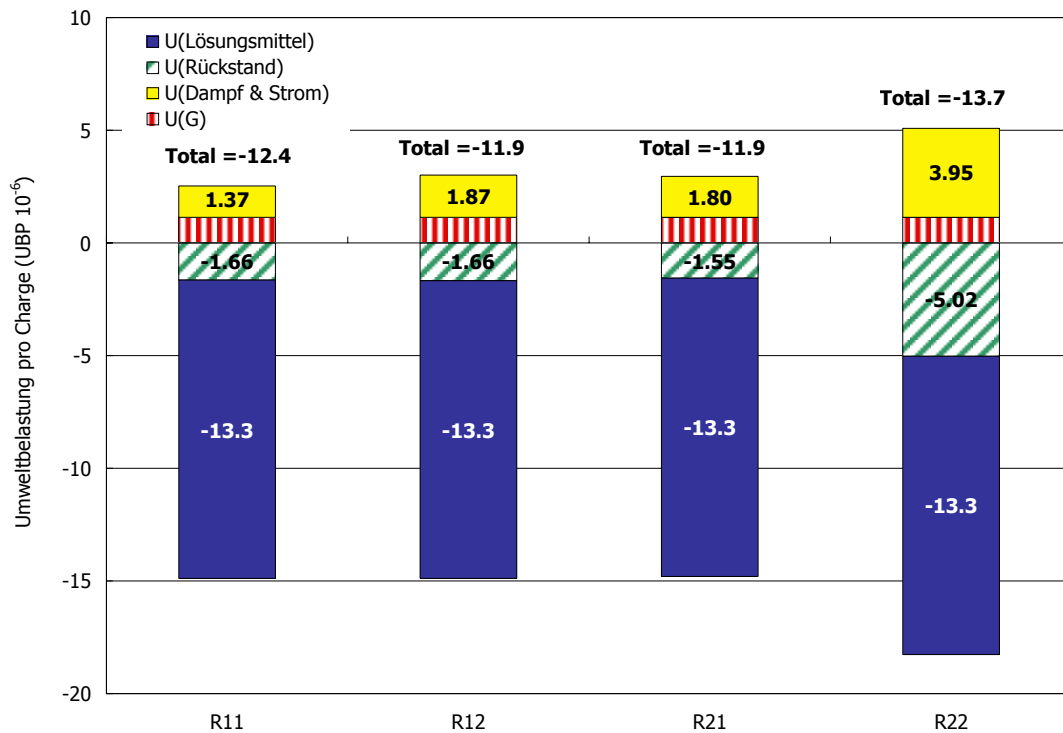


Abbildung 7 Bewertung der verschiedenen Szenarien für die Rektifikation des Toluol-Methanol-Wasser Gemisches mit dem Berechnungsverfahren, das auf der Methode der ökologischen Knappheit beruht (R11 werksintern mit ALM als Brennstoff in ALV, R12 werksintern mit Heizöl als Brennstoff in ALV, R12 schweiz., R22 europ. Energieversorgung).

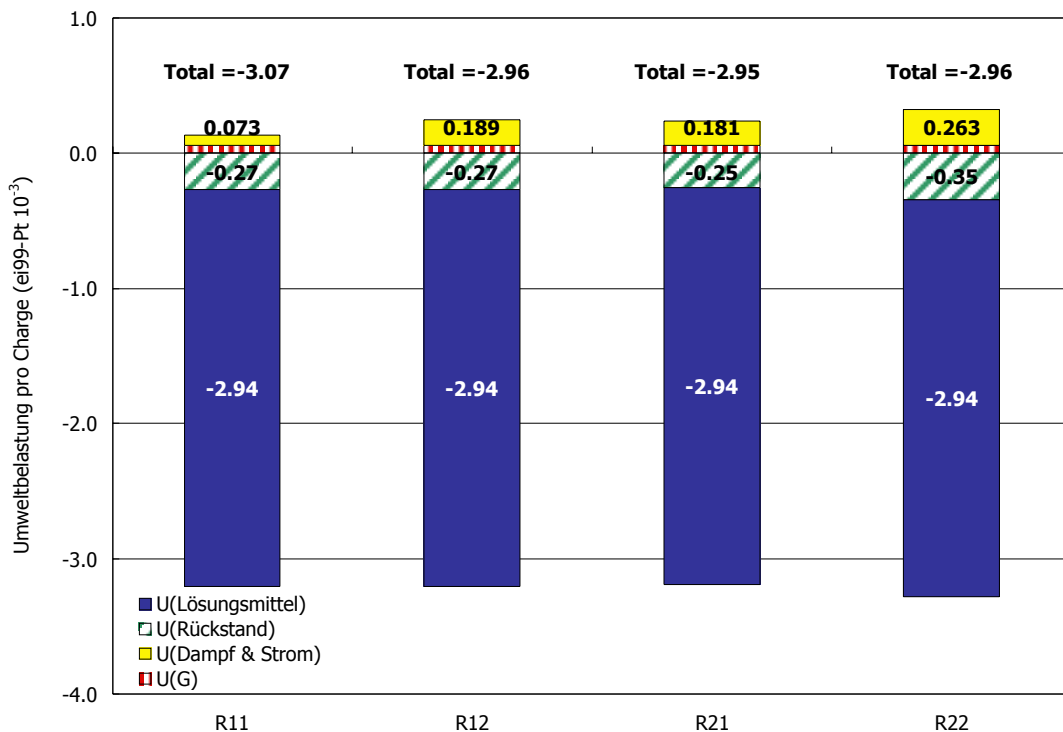


Abbildung 8 Bewertung der verschiedenen Szenarien für die Rektifikation des Toluol-Methanol-Wasser Gemisches mit dem Berechnungsverfahren, das auf der Methode Eco-Indicator 99 beruht (R11 werksintern mit ALM als Brennstoff in ALV, R12 werksintern mit Heizöl als Brennstoff in ALV, R12 schweiz., R22 europ. Energieversorgung).

Tabelle 9 Zusammensetzung der verschiedenen ALM-Gemischen und der Rektifikationsrückständen, die aus dem ALM nach der Rektifikation hervorgehen. U.Lösungsmittel gibt die Umweltbelastung aus den LCAs der Lösungsmittelherstellung an,  $\Delta H_{\text{comb}}$  und  $f_c$  stehen für die Verbrennungsenthalpie bzw. den Kohlenstoffgehalt.

ALM																
Komponente	ALM				Produkt 1				Produkt 2				Produkt 1+2 Rückstand			
	Masse/ Charge (kg)	m <sub>i</sub>	U <sub>Lösungsmittel, i</sub> * m <sub>i</sub> bzw. U <sub>Lösungsmittel</sub> (ALM)	ΔH <sub>comb</sub>	f <sub>c</sub>	h <sub>Dampf</sub>	Masse/ Charge (kg)	Massen-% (%)	Masse/ Charge (kg)	Massen-% (%)	Prod- ausbeute (%)	Masse/ Charge (kg)	Massen-% (%)	ΔH <sub>comb</sub>	f <sub>c</sub>	
	Gemisch 1															
Toluol	13443	97.7%	1.48·10 <sup>7</sup>	3.28·10 <sup>3</sup>	9.76·10 <sup>5</sup>	544457	12041	99.99%				1402	63.2%	56791		
Methanol	303	2.2%	1.17·10 <sup>5</sup>	3.44·10 <sup>1</sup>	9.29·10 <sup>3</sup>	6024	1	0.01%				802	36.1%	15951		
Wasser	14	0.1%	6.61	4.15·10 <sup>-4</sup>	9.29·10 <sup>-2</sup>	0	0					14	0.6%	0		
Gemisch	13760		1.49·10 <sup>7</sup>	3.32·10 <sup>3</sup>	9.86·10 <sup>5</sup>	550481	12042			87.5%		2218		72742	71%	
	Gemisch 2															
Toluol	248	1.8%	2.73·10 <sup>5</sup>	6.05·10 <sup>1</sup>	1.80·10 <sup>4</sup>	10028	0	0%				248	7.5%	10028		
Methanol												500	15.2%	9950		
Wasser	28	0.2%	1.32·10 <sup>1</sup>	8.31·10 <sup>-4</sup>	1.86·10 <sup>-1</sup>	0	18	0.2%				10	0.3%	0		
Aceton	13485	98.0%	2.55·10 <sup>7</sup>	3.31·10 <sup>3</sup>	9.51·10 <sup>5</sup>	385662	10955	99.8%				2529	77.0%	72339		
Gemisch	13760		2.58·10 <sup>7</sup>	3.37·10 <sup>3</sup>	9.69·10 <sup>5</sup>	395690	10973			79.7%		3287		92317	60%	
	Gemisch 3															
Toluol	248	1.8%	2.73·10 <sup>5</sup>	6.05·10 <sup>1</sup>	1.80·10 <sup>4</sup>	10028	12	0.2%				236	3.5%	9561		
Methanol	13485	98.0%	5.23·10 <sup>6</sup>	1.53·10 <sup>3</sup>	4.14·10 <sup>5</sup>	268346	7491	99.5%				6493	96.5%	129219		
Wasser	28	0.2%	1.32·10 <sup>1</sup>	8.31·10 <sup>-4</sup>	1.86·10 <sup>-1</sup>	0	27	0.4%				0	0%	0		
Gemisch	13760		5.50·10 <sup>6</sup>	1.59·10 <sup>3</sup>	4.32·10 <sup>5</sup>	278374	7530			54.7%		6730		138780	39%	
	Gemisch 4															
Toluol	6	0.04%	6.06·10 <sup>3</sup>	1.34	4.00·10 <sup>2</sup>	223	0	0%				6	0.2%	223		
Methanol	338	2.46%	1.31·10 <sup>5</sup>	3.85·10 <sup>1</sup>	1.04·10 <sup>4</sup>	6736	9	0.1%				830	37.4%	16510		
Wasser	13416	97.5%	6.45·10 <sup>3</sup>	4.05·10 <sup>-1</sup>	9.06·10 <sup>1</sup>	0	12031	99.9%				1385	62.4%	0		
Gemisch	13760		1.44·10 <sup>5</sup>	4.02·10 <sup>1</sup>	1.09·10 <sup>4</sup>	6959	10973			87.5%		2220		16733	14%	
	Gemisch 5															
Toluol	7430	54.0%	8.18·10 <sup>6</sup>	1.81·10 <sup>3</sup>	5.40·10 <sup>5</sup>	300929	189	3.0%		97.3%		14	2.6%	551		
Methanol												500	97.3%	9950		
Wasser	14	0.1%	6.61	4.15·10 <sup>-4</sup>	9.29·10 <sup>-2</sup>	0	14	0.2%		0%		0	0%	0		
Benzol	6316	45.9%	6.62·10 <sup>6</sup>	1.45·10 <sup>3</sup>	4.28·10 <sup>5</sup>	253262	6113	96.8%		2.7%		0.15	0.03%	6		
Gemisch	13760		1.48·10 <sup>7</sup>	3.27·10 <sup>3</sup>	9.67·10 <sup>5</sup>	554192	6316			99.9%		514		10507	39%	

Die Bewertung der Rektifikation des Toluol-Gemisches mit den Bewertungsfaktoren für UBP und Eco-Indicator 99 (Tabelle 8) sind in **Abbildungen 7 und 8** dargestellt. Die Resultate der Evaluation mit Gleichung 2 ist geprägt durch die Gutschriften für wiedergewonnenes Toluol,  $U_{\text{Lösungsmittel}}$ , und für die Energieerzeugung durch die Rückstandsverbrennung,  $U_{\text{Rückstand}}$ . Es können im Gegensatz zur ALM-Verbrennung vier Szenarien unterschieden werden (Tabelle 2), da die werksinternen Energie für den Dampf- und Strombedarf der Rektifikation durch die Verbrennung von ALM in (R11) oder Heizöl in der ALV (R12) bereitgestellt werden kann. Die Unterscheidung der Energiebereitstellungsszenarien führt bei der Rektifikation des Toluol-Gemisches zu unterschiedlichen Umweltbelastungen durch den Dampf- und Strombedarf. Aufgrund des geringen Strombedarfs der Rektifikation spielen aber die hohen Bewertungsfaktoren für den Strombedarf in Tabelle 8 eine untergeordnete Rolle. Die Bewertung der Rektifikation des Toluol-Gemisches mittels UBP- und ei99-Bewertungsfaktoren zeigt, dass das Szenario in dem ALM als Brennstoff dient, aus ökologischer Sicht am besten abschneidet ( $-12.4 \cdot 10^6$  UBP/Charge bzw.  $-3070$  ei99-Pt/Charge, Abbildungen 7 und 8). Im Gegensatz zur Bewertung der Verbrennung des Toluol-Gemisches weist das Szenario für die europäische Energieversorgung die grösste (relative) Umweltbelastung auf ( $-9.81 \cdot 10^6$  UBP/Charge bzw.  $-2880$  ei99-Pt/Charge). Da die Umweltbelastung aus der Dampfbereitstellung jedoch deutlich geringer ist als die Gutschrift für wiedergewonnenes Toluol, werden die vier Rektifikationsszenarien ähnlicher bewertet, als beim Vergleich der drei Verbrennungsszenarien (Abbildung 5).

Mit den Resultaten in Abbildungen 5 bis 8 lässt sich feststellen, ob das Toluol-Gemisch aus ökologischer Sicht verbrannt oder rektifiziert werden sollte. Der Vergleich aufgrund der Bewertung mittels UBP-Bewertungsfaktoren der werksinternen, schweizerischen und europäischen Energieversorgungsszenarien (Abbildungen 5 und 8) zeigt, dass die Verbrennung des Toluol-Gemisches stets die geringere Umweltbelastung verursacht als deren Rektifikation. Die Bewertungsunterschiede sind aber nur im Falle der europäischen Energieversorgung (Szenarien V21 vs. R21) deutlich. Wird der Vergleich mittels ei99-Bewertungsfaktoren durchgeführt, ist die Rektifikation des Toluol-Gemisches der Verbrennung vorzuziehen (Abbildungen 6 und 8). Die unterschiedliche Bewertung der beiden Behandlungsmethoden des Fallbeispiel-Gemisches verdeutlicht, dass das Ergebnis von der Gewichtung von Emissionen bzw. Ressourcenverbräuchen in der Bewertungsmethoden abhängt. Mit der Auswertung des Fallbeispiel-Gemisches kann aber (noch) nicht festgestellt werden, ob die bessere Bewertung der Verbrennung mittels UBP-Bewertungsfaktoren lediglich auf den hohen Brennwert des Toluol-Gemisches zurückzuführen ist, der sich auf die Energiegutschrift,  $U_{\text{Energie}}$  auswirkt. Da Toluol zu den Basischemikalien gehört, dürfte dessen Umweltbelastung aus der petrochemischen Herstellung,  $U_{\text{Lösungsmittel}}$ , im Vergleich zu anderen Lösungsmitteln, die in der chemischen Industrie eingesetzt werden (5), eher gering sein. Es gilt also abzuklären, inwiefern die Bewertung der ALM-Handlungsoptionen für das Fallbeispiel von den Eigenschaften des ALM-Gemisches oder von den Bewertungsfaktoren des Verfahrens in den Tabellen 6 und 8 bestimmt wird. Dazu werden nächsten Kapitel verschiedene ALM-Gemische mit demselben Verfahren evaluiert.

### 3.3.2 Exemplarische Auswahl verschiedener Abfalllösungsmittelgemische

Mit der Bewertung von fünf verschiedenen, hypothetischen ALM-Gemischen anhand von Gleichungen 5 und 6 soll nun festgestellt werden, ob und wie sich unterschiedliche Eigenschaften von ALM-Gemischen auf die Wahl der ökologisch besseren ALM-Handlungsoption auswirken. Die Evaluation verschiedener ALM-Gemische soll auch zeigen, ob die Wahl der ALM-Handlungsoption, wie bei der Auswertung des Fallbeispiels (Toluol-Gemisch), lediglich von der Wahl der Bewertungsfaktoren bzw. -methoden (UBP, ei99-Pt) abhängig ist. Schliesslich soll mit der Bewertung der Modellgemische geprüft werden, ob verallgemeinerbare Empfehlungen aus ökologischer Sicht gemacht werden können wenn für

die Behandlung eines ALMs entweder Verbrennung oder Rektifikation als Behandlungsoption zur Diskussion stehen.

Die Auswahl von exemplarischen ALM-Gemischen zur Bewertung der zwei ALM-Behandlungsoptionen erfolgte nach folgenden Kriterien:

- Es müssen Ökoinventare der petrochemischen Lösungsmittelherstellung vorliegen, damit Gutschriften für wiedergewonnene Chemikalien berechnet werden können.
- Die ALM-Gemische sollen in Bezug auf die Parameterwerte, wie sie in Gleichungen 5 und 6 zur Bewertung erforderlich sind, möglichst extreme Werte annehmen, z.B. indem ALM-Gemische bewertet werden, die in der Praxis vorwiegend mit einer der beiden Verfahren behandelt werden. Bei der Auswahl wurde angenommen, dass Gemische mit grossem Brennwert in der ALM-Verbrennung besser bewertet werden während Gemische, mit grosse Gutschriften für wiedergewonnenes Lösungsmittel in der Rektifikation günstiger beurteilt werden. Da ein grosser Dampfbedarf bei der Rektifikation diese Gutschrift kompensieren kann, wurde auf eine Bewertung von ALM-Gemischen mit unterschiedlichem Dampfbedarf in der Rektifikation geachtet.
- Die Gemische sollen ternäre Mischungen darstellen (geprüft mit (21, 22)).

Die ausgewählten Lösungsmittel sind in Tabelle 10 aufgeführt. Neben Toluol, dem Basisgemisches aus dem Fallbeispiel, sind Aceton, Methanol, Wasser und Benzol Komponenten der Gemische. Durch diese Auswahl können die Gutschriften für die Vermeidung der petrochemischen Lösungsmittelherstellung in der Rektifikation von nahezu null bis zum 1.7-fachen Wert von Toluol (Aceton, in UBP, Tabelle 10) reichen. Die Verbrennungsenthalpien der Lösungsmittel sind ebenfalls sehr verschieden und erfüllen so die oben angeführten Kriterien.

Tabelle 10      Ausgewählte Eigenschaften der in den exemplarischen ALM-Gemischen analysierten Lösungsmittel

Eigenschaften					
Lösungsmittel	Umweltbelastung der LM-Herstellung, $U_{\text{Lösungsmittel}}$			$\Delta H_{\text{comb}}$	$f_c$
	(UBP/kg)	(ei99-Pt/kg)	(MJ PE/kg)	(MJ/kg)	(%)
Toluol	1101	0.244	72.6	40.5	91.2%
Methanol	388	0.114	30.7	19.9	37.5%
Wasser	0.48	0.0000302	0.00675	0.0	0.0%
Aceton	1890	0.246	70.5	28.6	62.0%
Benzol	1049	0.230	67.7	40.1	92.3%

Die Zusammensetzung der ALM-Gemische pro Charge für die Bewertung der zwei ALM-Behandlungsoptionen ist in Tabelle 9 aufgeführt. Gemisch 1 besteht aus der Hauptkomponente Toluol (in Tabelle 9 fett hervorgehoben) sowie Methanol und Wasser. Es wird evaluiert, um die Bewertung des Fallbeispiels mit derjenigen der anderen ALM-Gemischen zu vergleichen. Gemisch 2 enthält als Hauptkomponente Aceton. Aceton weist eine deutlich grössere Umweltbelastung bei der Herstellung auf, wenn mittels Methode der ökologischen Knappheit bewertet wird (Tabelle 10). Zudem ist die Verbrennungsenthalpie geringer, was ebenfalls tendenziell zu einer günstigeren Bewertung der Rektifikation im Vergleich zur Verbrennung führen sollte. Im Falle von Gemisch 3 mit Methanol als Hauptkomponente, sind sowohl die Umweltbelastung bei der petrochemischen Herstellung als auch die Verbrennungsenthalpie kleiner als in Gemischen 1 und 2 (Tabelle 9). Gemisch 4 besteht hauptsächlich aus Wasser und stellt ein worst-case Szenario für die Bewertung dar, da ein Wasser-Gemisch weder zu signifikanten Gutschriften für die thermische noch für die stoffliche Verwertung führt und in der Praxis in der Abwasserreinigungsanlage behandelt wird. Schliesslich stellt Gemisch 5 einen speziellen Fall dar, da durch die Gewinnung zweier Produkte nach zweifacher Rektifikation eine

ähnliche Gutschrift die beiden Lösungsmittel erzielt werden kann (Toluol und Benzol), der Dampfbedarf für die zweifache Rektifikation ist aber höher ist, als bei der Trennung eines Gemisches mit einer Kolonne.

### 3.3.3 Stoffflüsse in der ALM-Behandlung

Aufgrund der Randbedingungen für die Modellierung der Rektifikation der fünf ALM-Gemische bezüglich Reinheit, Rektifikationsparameter etc. (vgl. Daten und Methoden) konnten die Stoffflüsse für die beiden ALM-Behandlungsoptionen für das ALM, das wiedergewonnene Produkt und den Rektifikationsrückstand errechnet werden. In Tabelle 9 sind neben den Stoffflüssen der Lösungsmittel auch deren Massenanteile,  $m_i$ , am Gemisch, deren Beitrag zur Umweltbelastung zur Herstellung der Lösungsmittel,  $U_{\text{Lösungsmittel}, i} \cdot m_i$ , sowie wichtige Parameter für die Berechnung der Umweltbelastung aus der ALM-Verbrennung (Verbrennungsenthalpie der Gemische, Kohlenstoffanteil,  $f_C$ ) und -Rektifikation (Hilfsstoffbedarf Dampf,  $h_{\text{Dampf}}$ ) nach Gleichungen 5 und 6 aufgeführt.

Die petrochemische Herstellung des Aceton-Gemisches wird in allen Bewertungsmethoden als am stärksten umweltbelastend bewertet. Die Verbrennungsenthalpie ist am grössten für das Benzol/Toluol-Gemisch, was auch mit dem grössten Kohlenstoffanteil einhergeht. Die Verbrennungsenthalpie der verschiedenen Gemische reicht von 7 GJ/Charge bis zu 550 GJ/Charge. Der Dampfbedarf für die Auftrennung der ALM-Gemische in die Produkte bestimmter Reinheit ist ausser für Gemisch 1 (Toluol) sehr hoch. Diese Angaben sind Resultate der Rektifikationsmodellierung wie sie im Kapitel 'Daten und Methoden' beschrieben sind. Die Relevanz dieser hohen Dampfbedarfs für die Bewertung der Rektifikation als Ganzes wird später diskutiert.

Mit den gewählten Spezifikation für die Modellierung der Rektifikation liessen sich nicht alle Gemische mit der gleichen Ausbeute (Masse Produktgemisch/Masse ALM, Tabelle 9) auftrennen. Das Methanol-Gemisch (Gemisch 3) konnte lediglich zu 55% in ein Produkt angemessener Reinheit, als Kriterium für die Modellierung wurden 85% vorgegeben, rektifiziert werden (Tabelle 4). Erwartungsgemäss liegt die Produktausbeute nach zweifacher Destillation für Toluol und Benzol als separate Produkte deutlich höher (99.9%), benötigt aber im Vergleich zur einfachen Rektifikation von Toluol ca. fünf Mal mehr Dampf.

Bei der Rückstandszusammensetzung ist zu beachten, dass in jedem Gemisch 500 kg zusätzliches Methanol enthalten sind, die zur Reinigung der Rektifikationsapparatur benötigt werden. Für die Bewertung der Rektifikation als ALM-Behandlungsoption ist neben den unterschiedlichen Brennwerten und Kohlenstoffgehalten auch die deutlich verschiedenen Massenanteile der Rückstände am gesamten ALM von Bedeutung (45% der Charge im Falle des Methanol-Gemisches, lediglich 0.1% beim Benzol/Toluol-Gemisch).

### 3.3.4 Ökologisch bessere ALM-Behandlungsoptionen

Mittels Stoffflussdaten aus Tabelle 9 sowie den Bewertungsverfahren und den in Tabellen 6 und 8 gezeigten Bewertungsfaktoren konnten die Umweltbelastung der fünf ALM-Gemische für beide ALM-Behandlungsoptionen berechnet werden (Gleichungen 5 und 6). Die in Tabelle 11 aufgeführten Resultate gelten alle für das Szenario der werksinternen Energieversorgung mit ALM in der ALV mit den entsprechenden Gutschriften (V11 bzw. R11, siehe Tabelle 2). Die Bewertungsergebnisse sind nach ihren Beiträgen aus Gleichungen 5 und 6 sowie den wichtigsten Einheiten des Systemmodells gegliedert, so dass die Lösungsmittelerzeugung in der Petrochemie, die Verbrennung des ALM in der ALV und deren Rektifikation separat aufgeführt sind. Die letzte Spalte für die Gesamtbewertung der funktionellen Einheit zeigt, welche der beiden Optionen aus ökologischer Sicht besser beurteilt wird (V steht für geringere Umweltbelastung durch die Verbrennung, R für die Rektifikation als bessere Behandlungsoption). Alle fünf Gemische wurden mit Bewertungsfaktoren evaluiert, die auf den drei Bewertungsmethoden der 'Methode der ökologischen Knappheit', des Eco-Indicator 99 und des Primärenergiebedarfs beruhen (Tabellen 6 und 8).

Tabelle 11      Resultate der Bewertung verschiedener ALM-Gemische nach Umweltbelastungsbeitrag (Gleichungen 5 und 6) und Bewertungsmethode. Die Bewertung der einzelnen Teile des Systemmodells Lösungsmittelherstellung (LM-Herstellung), Verbrennung und Rektifikation sind separat aufgeführt, die Bewertung der funktionellen Einheit einer ALM-Behandlungsoption (Verbrennung bzw. Rektifikation) sind unter der Gesamtbewertung aufgeführt.

Gemisch	Lösungs- mittel- Herstellung	Verbrennung					Rektifikation					Gesamtbewertung		V vs. R		
	U <sub>Lösungsmittel</sub> (ALM)	U <sub>G</sub> Verb	U <sub>CO2</sub>	U <sub>NaOH</sub>	U <sub>Überhitzer</sub>	U <sub>Energie</sub>	U <sub>ALM-Verbrennung</sub>	U <sub>G</sub> Rekt	U <sub>Dampf &amp; Strom</sub>	U <sub>Lösungsmittel</sub> (Produkt)	U <sub>Rückstand</sub>	U <sub>ALM-Rektifikation</sub>	U <sub>Verbrennung</sub>	U <sub>Rektifikation</sub>		
UBP		in UB <sup>P</sup> 10 <sup>-6</sup> /Charge														
1	Toluol	14.92	1.51	9.08	0	0.15	-24.02	-13.28	1.15	1.37	-13.26	-1.66	-12.39	1.64	2.53	V
2	Aceton	25.76	1.51	4.12	0	1.01	-17.26	-10.62	1.15	6.75	-20.71	-1.95	-14.76	15.14	11.00	R
3	Methanol	5.50	1.51	3.87	0	1.66	-12.14	-5.10	1.15	8.19	-2.90	-2.57	3.86	0.40	9.36	V
4	Wasser	0.14	1.51	0.10	0	3.16	2.62	7.39	1.15	5.23	-0.01	0.47	6.84	7.54	6.99	R
5	Benzol/Toluol	14.80	1.51	9.24	0	0.15	-24.05	-13.15	1.15	6.35	-14.37	-0.19	-7.06	1.65	7.74	V
E199		in ei <sup>99</sup> -Pt 10 <sup>-3</sup> /Charge														
1	Toluol	3.32	0.11	0.20	0	0.02	-2.44	-2.11	0.06	0.07	-2.94	-0.27	-3.07	1.21	0.24	R
2	Aceton	3.37	0.11	0.09	0	0.12	-1.75	-1.43	0.06	0.36	-2.69	-0.32	-2.59	1.94	0.78	R
3	Methanol	1.59	0.11	0.09	0	0.19	-1.23	-0.84	0.06	0.43	-0.85	-0.43	-0.78	0.75	0.81	V
4	Wasser	0.04	0.11	0.002	0	0.37	0.27	0.75	0.06	0.28	0.00	0.03	0.37	0.79	0.41	R
5	Benzol/Toluol	3.27	0.11	0.20	0	0.02	-2.44	-2.11	0.06	0.34	-3.19	-0.03	-2.82	1.16	0.44	R
Primärenergie		in MJ PE 10 <sup>-5</sup> /Charge														
1	Toluol	9.86	0.54	0	0	0.06	-7.71	-7.12	0.19	0.20	-8.74	-0.89	-9.24	2.74	0.61	R
2	Aceton	9.69	0.54	0	0	0.37	-5.54	-4.63	0.19	1.00	-7.73	-1.07	-7.61	5.06	2.09	R
3	Methanol	4.32	0.54	0	0	0.61	-3.90	-2.75	0.19	1.21	-2.30	-1.39	-2.28	1.57	2.04	V
4	Wasser	0.11	0.54	0	0	1.17	0.84	2.55	0.19	0.78	0.00	0.11	1.07	2.66	1.18	R
5	Benzol/Toluol	9.67	0.54	0	0	0.05	-7.72	-7.13	0.19	0.94	-9.44	-0.10	-8.41	2.54	1.26	R



Tabelle 9 sowie die **Abbildung 9** zeigen, dass die Verbrennung von ALM der Rektifikation in allen Fällen ausser für das Aceton- und das Wasser-Gemisch vorzuziehen ist, wenn das Verfahren mittels UBPs angewendet wird. In Abbildung 9 sind die drei Einheiten des Systemmodells und deren Umweltbelastung separat aufgeführt. Die Umweltbelastung der ALM-Behandlung des Toluol-, Methanol-, und Benzol/Toluol-Gemisches ist stets geringer (oder negativer) als die entsprechende Umweltbelastung der Rektifikation. Für das Aceton-Gemisch werden in der Rektifikation grössere Gutschriften ( $U_{\text{Lösungsmittel (Produkt)}}$ ) beträgt  $-20.7 \cdot 10^6$  UBP/Charge während  $U_{\text{Lösungsmittel (Produkt)}}$  für andere LM  $> -14.4 \cdot 10^6$  UBP/Charge ist, Tabelle 9) für das wiedergewonnene Lösungsmittel gegeben, so dass diese Behandlungsoption besser bewertet ist. Die Verbrennung und die Rektifikation des Wasser-Gemisches wird mit einer vergleichbaren Umweltbelastung bewertet. Die Umweltbelastung der Verbrennung ist auf den tiefen Brennwert zurückzuführen, der zu grossen Umweltbelastungsbeiträgen im Überhitzer ( $U_{\text{Überhitzer}}$ ) und bei der Energiegewinnung ( $U_{\text{Energie}}$ ) führt. Die Bewertung des Wasser-Gemisches zeigt, dass das hier vorgeschlagene Berechnungsverfahren für die Umweltbelastung der ALM-Behandlungsoptionen dem Brennwert des ALM Rechnung trägt.

Die Bewertung der fünf Gemische mit den Eco-Indicator 99 bzw. primärenergie-bezogenen Verfahren zeigt in Tabelle 11 sowie **Abbildungen 10 und 11**, dass die ALM-Rektifikation der Verbrennung aus ökologischer Sicht vorgezogen werden müsste. Die Ausnahme stellt das Methanol-Gemisches dar, dass bei einer Verbrennung eine geringere Umweltbelastung verursacht. Die Rektifikation des Methanol-Gemisches verursacht einen hohem Energieaufwand (Dampfbedarf) und führt aufgrund der tiefen Ausbeute (55%, Tabelle 9) nur zu geringen Lösungsmittelgutschriften ( $U_{\text{Lösungsmittel (Produkt)}}$ ). Da die Methoden des Eco-Indicator 99 und des Primärenergieverbrauches den Ressourcenverbrauch stärker gewichten als die Emissionen in die Umwelt, führt die Wiedergewinnung von Lösungsmittel zu relativ grössere Gutschriften als im Verfahren mit UBP-Bewertungsfaktoren.

In **Abbildungen 12 bis 15** sind die einzelnen Beiträge zur Umweltbelastung eines ALM-Gemisches in UBP und ei99-Pt dargestellt wie sie mit Gleichungen 1 und 2 berechnet werden. Die Bewertung aufgrund des Primärenergiebedarfs verhält sich wie die Bewertung mittels Eco-Indicator 99 bezüglich der Wahl der ökologisch besseren Behandlungsoption und wird deshalb nicht weiter diskutiert. Bei der Bewertung der ALM-Verbrennung spielt die Gutschrift für die mit ALM erzeugte Energie und damit die Verbrennungsenthalpie des ALM-Gemisches die dominanteste Rolle. Ist die Verbrennungsenthalpie klein, wird zusätzliche Umweltbelastung durch den Betrieb des Überhitzers berechnet. Dieser Beitrag spielt lediglich bei der Bewertung der Verbrennung des wässrigen Gemisches eine Rolle, weil in diesem Fall keine Energie durch die Verbrennung des ALMs erzeugt werden kann (Abbildungen 12 und 13). Der Beitrag der Grundbelastung, welche alle Beiträge zur Umweltbelastung quantifiziert, die nicht einzelnen Prozessen der ALM-Verbrennung zugeordnet wurden, ist für die Bewertung der Umweltbelastung der ALM-Verbrennung nicht wichtig. Die Umweltbelastung durch  $\text{CO}_2$  ist für alle kohlenstoffhaltigen ALM bei der Bewertung mittels UBP wichtig und dürfte bei einem  $f_C$  von 92% (Benzol/Toluol-Gemisch) den grösstmöglichen Betrag zur Gesamtbeurteilung pro ALM-Charge beigetragen haben. Da sowohl die  $U_{\text{Energie}}$  (via Verbrennungsenthalpie) als auch  $U_{\text{CO}_2}$  mit dem Kohlenstoffgehalt des ALM korrelieren, kann aus deren relativen Bewertung für das Toluol- bzw. Benzol/Toluol-Gemisches geschlossen werden, dass mit dem vorgeschlagenen Bewertungsverfahren pro Kohlenstoffatom netto eine ökologische Gutschrift errechnet wird.

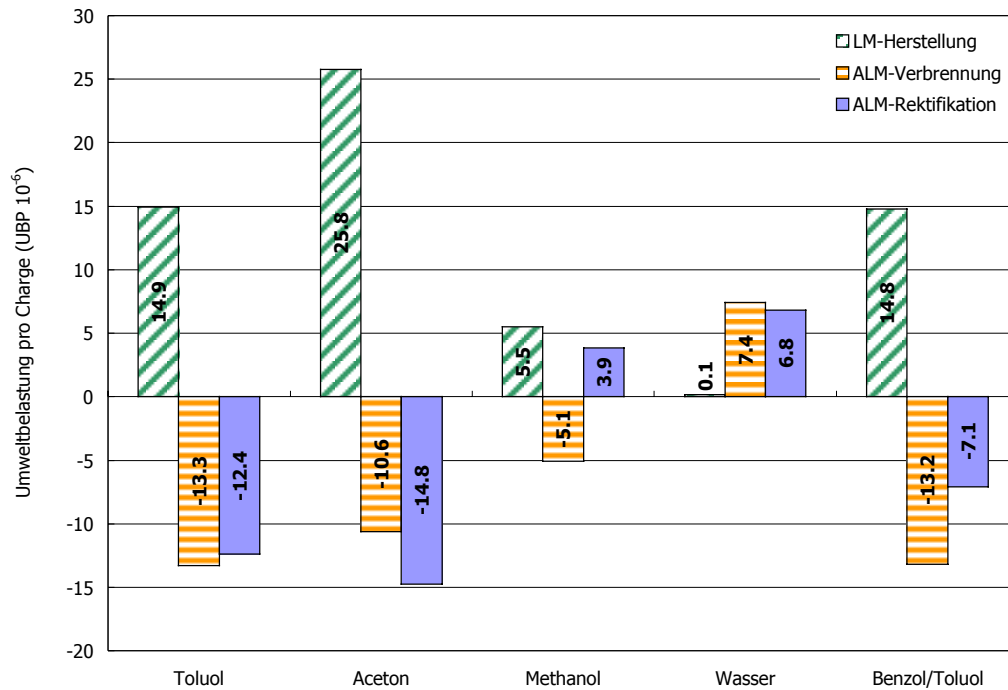


Abbildung 9 Bewertung der beiden ALM-Behandlungsoptionen Verbrennung und Rektifikation gemäss Berechnungsverfahren in UBP für die fünf ALM-Gemische gegliedert nach Umweltbelastung der Lösungsmittelherstellung, Umweltbelastung der Verbrennung bzw. Umweltbelastung der Rektifikation. Die ALM-Gemische sind nach der Hauptkomponente benannt, genaue Zusammensetzung vgl. Tabelle 9.

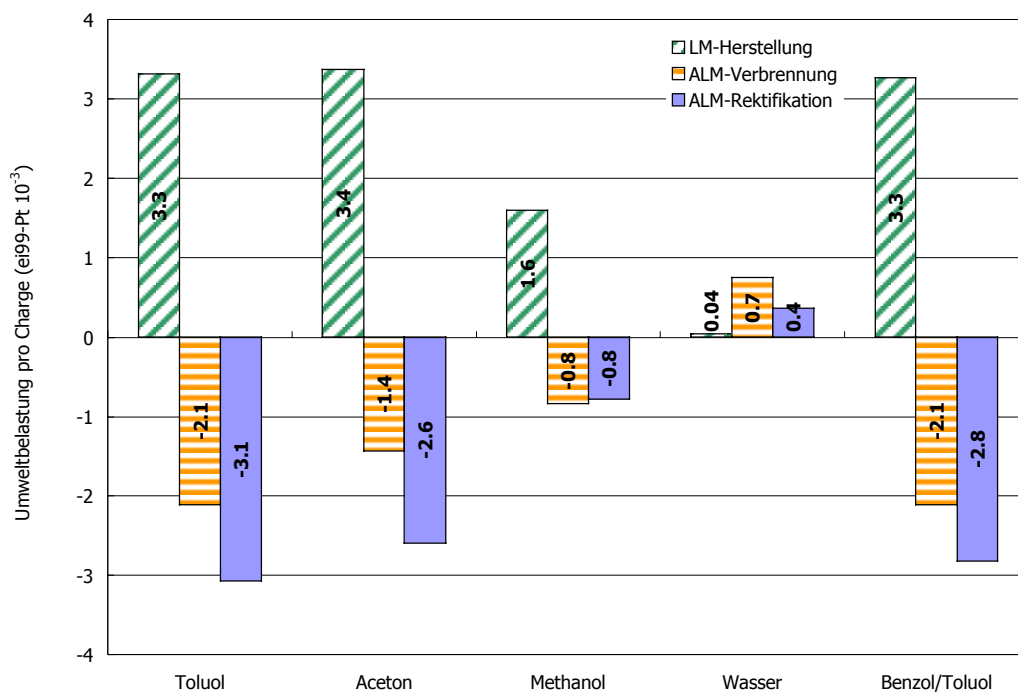


Abbildung 10 Bewertung der beiden ALM-Behandlungsoptionen Verbrennung und Rektifikation gemäss Berechnungsverfahren mittels Eco-Indicator 99 für die fünf ALM-Gemische gegliedert nach Umweltbelastung der Lösungsmittelherstellung, Umweltbelastung der Verbrennung bzw. Umweltbelastung der Rektifikation.

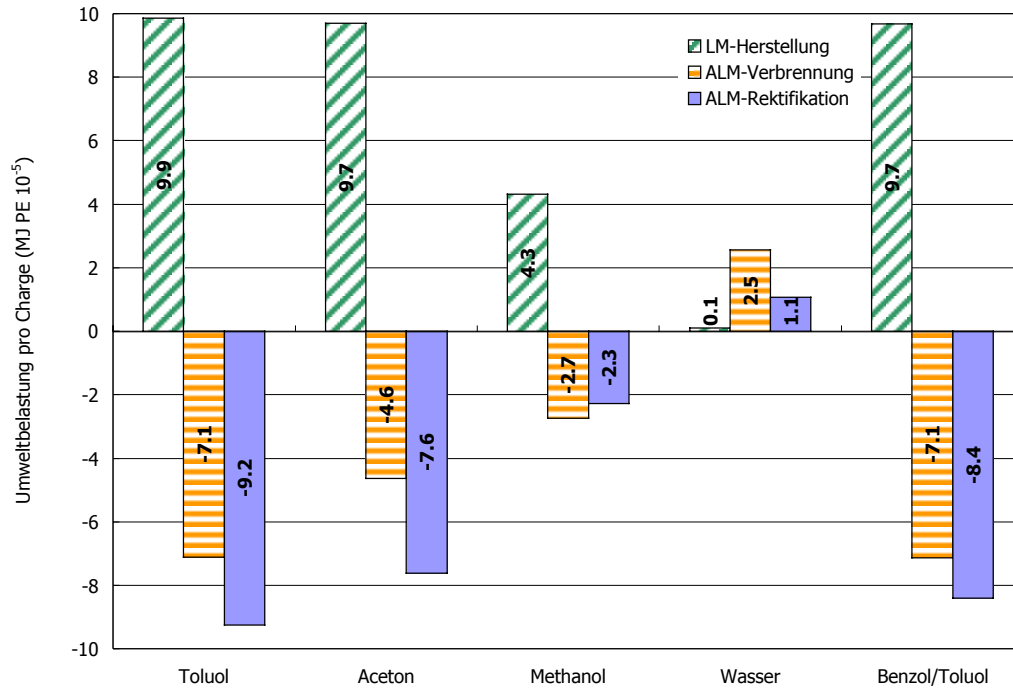


Abbildung 11 Bewertung der beiden ALM-Behandlungsoptionen Verbrennung und Rektifikation gemäss Berechnungsverfahren in Primärenergieeinheiten für die fünf ALM-Gemische gegliedert nach Umweltbelastung der Lösungsmittelherstellung, Umweltbelastung der Verbrennung bzw. Umweltbelastung der Rektifikation.

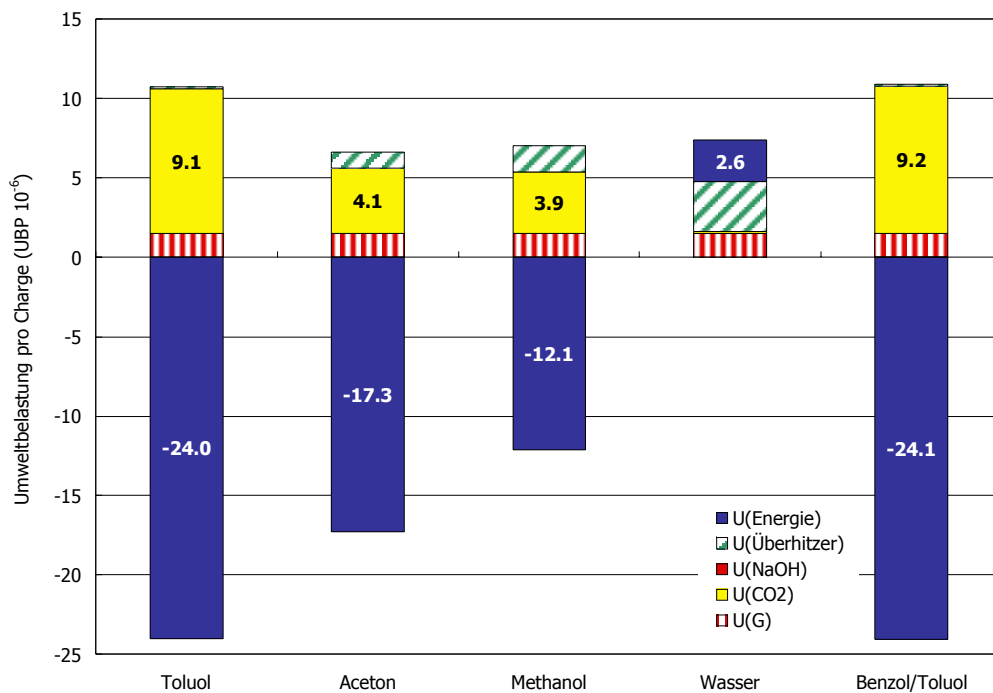


Abbildung 12 Illustration der verschiedenen Beiträge zur Umweltbelastung der ALM-Verbrennung der fünf ALM-Gemische nach Berechnungsverfahren mittels UBP.

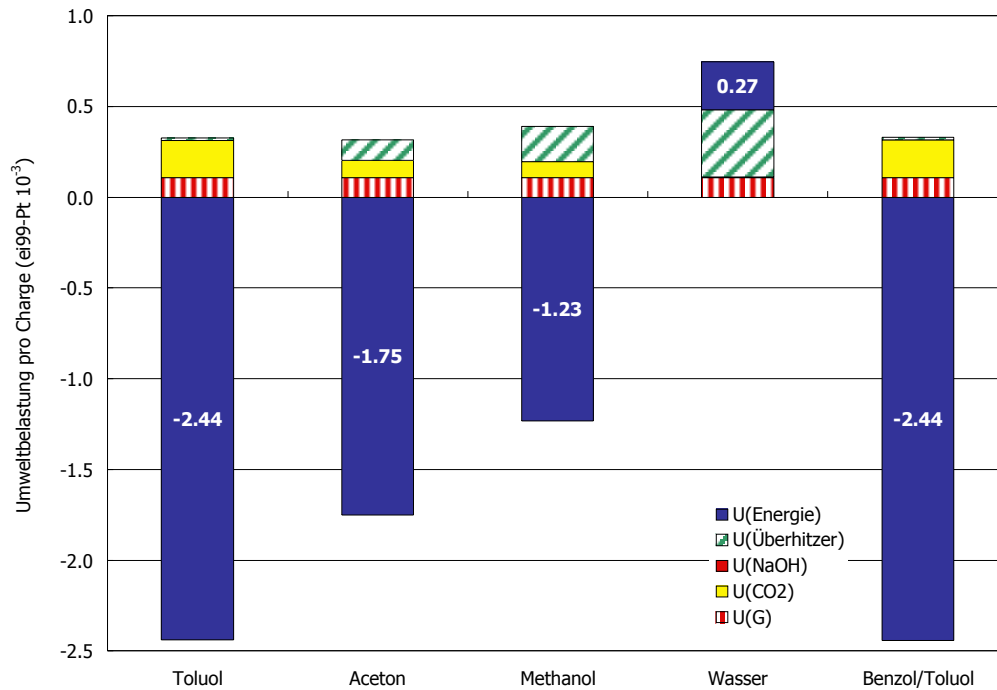


Abbildung 13 Illustration der verschiedenen Beiträge zur Umweltbelastung der ALM-Verbrennung der fünf ALM-Gemische nach Berechnungsverfahren mittels Eco-Indicator 99.

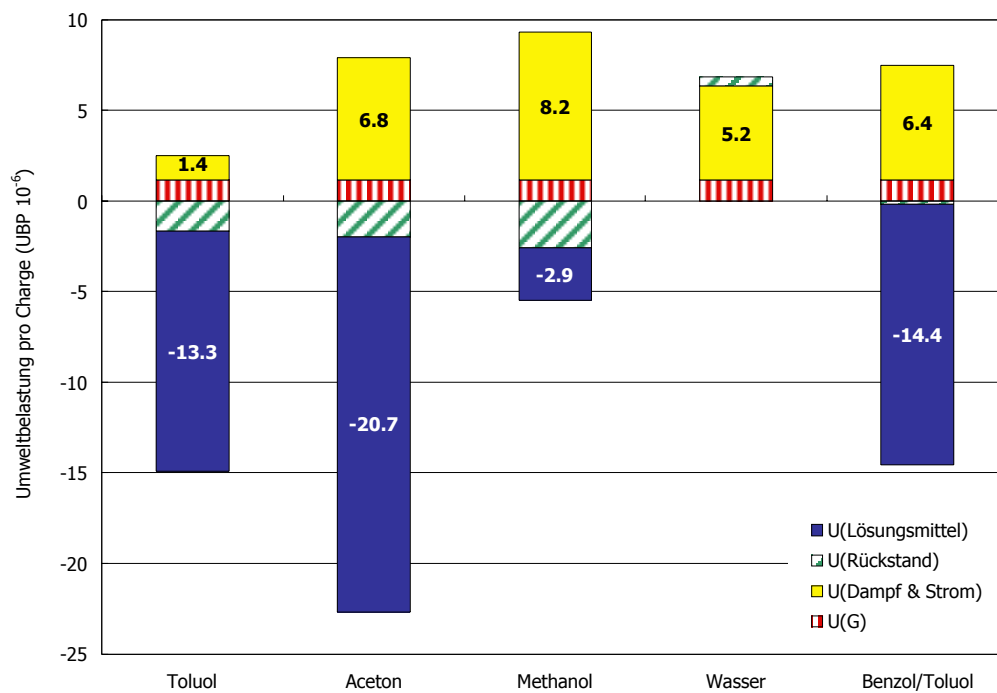


Abbildung 14 Illustration der verschiedenen Beiträge zur Umweltbelastung der ALM-Rektifikation der fünf ALM-Gemische nach Berechnungsverfahren mittels UBP.

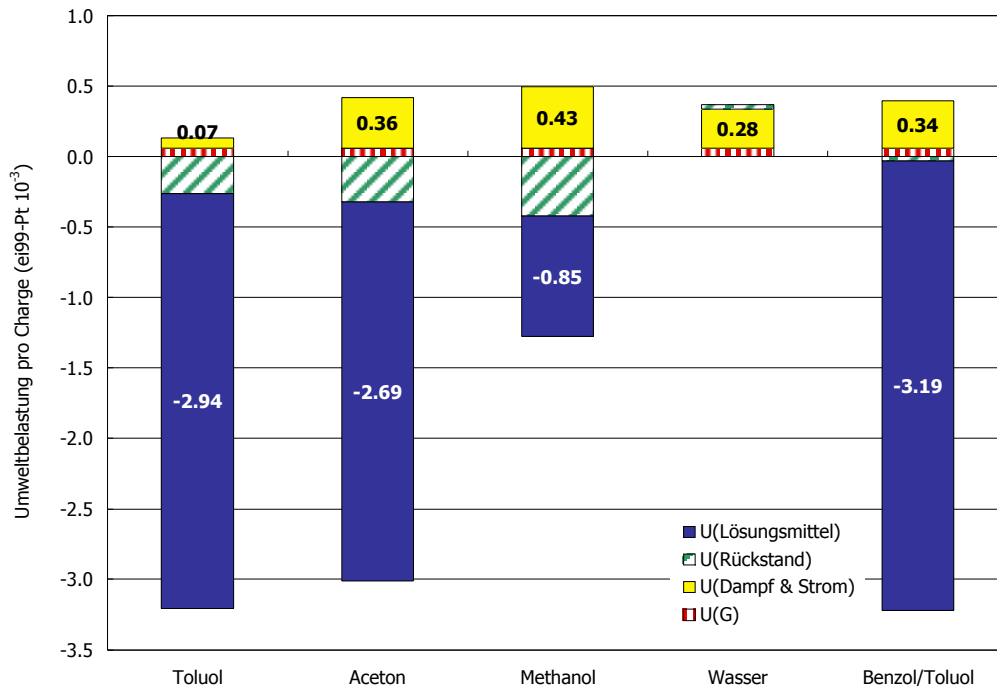


Abbildung 15 Illustration der verschiedenen Beiträge zur Umweltbelastung der ALM-Rektifikation der fünf ALM-Gemische nach Berechnungsverfahren mittels Eco-Indicator 99.

In Abbildungen 14 und 15 sind die Beiträge des Berechnungsverfahrens für die ALM-Rektifikation dargestellt. Die wichtigsten Gutschriften werden für das wiedergewonnene Lösungsmittel erteilt. Die Gutschriften für die Verbrennung des Rektifikationsrückstandes in der ALV sind wegen der geringeren Stoffmengen (514 bis 3300 kg/Charge, Tabelle 9) weniger signifikant. Im Falle des Methanol-Gemisches macht der Rückstand zwar 45% des Stoffflusses aus (6700 kg/Charge), dessen Verbrennungsenthalpie ist mit ca. 20 MJ/kg lediglich im Bereich von durchschnittlichem ALM. Die wichtige Rolle der stofflichen Gutschriften wird noch deutlicher, wenn man berücksichtigt, dass der Dampfbedarf für die Rektifikation aller Gemische ausser Gemisch 1 (Toluol) sehr hoch ist und so den signifikantesten Beitrag zur Umweltbelastung der Rektifikation leistet.

### 3.3.5 Verallgemeinerbare Erkenntnisse aus der Evaluation der exemplarischen Abfalllösungsmittel-Gemische

Die vergleichende Evaluation von fünf ALM-Gemischen zeigt, dass die Bewertung der ökologisch sinnvoller ALM-Behandlungsoption von der gewählten Bewertungsmethode abhängt. Wird den Emissionen in die Umwelt grösseres Gewicht beigemessen, wie in der Methode der ökologischen Knappheit (in UBP), lohnt sich die Rektifikation erst für Lösungsmittel wie Aceton, deren petrochemische Herstellung mit grösserer Umweltbelastung verbunden ist. Solche Lösungsmittel dürften durch eine Rektifikation 'umweltschonender' behandelt werden.

Ist der Aspekt der Ressourcenschonung wichtiger (Eco-Indicator 99, Primärenergiebedarf), stellt die Rektifikation schon bei Lösungsmittel, die zu den petrochemischen Basisprodukten zählen, aus ökologischer Sicht die bessere Behandlungsoption dar. Bei der Bewertung mit dem vorgeschlagenen Verfahren müssen ALM-Gemische mit hohem Dampfbedarf in der Rektifikation (>6 t Dampf pro t ALM) mit einer genügend grossen Ausbeute wiedergewonnen werden (Ausbeuten um 85%), so dass sich die Gutschrift für die stoffliche Wiederverwertung auf die günstige Bewertung auswirkt. Hier ist zu beachten, dass der Dampfbedarf für die Rektifikation des Aceton- und Methanol-Gemisches in der Praxis bei ca. 2 t Dampf pro t ALM liegen (4). Die Bewertung der Rektifikation dieser Gemische dürften damit aus ökologischer Sicht etwas besser ausfallen

Die Auswahl der fünf ALM-Gemische hat gezeigt, dass für die Bewertung der ALM-Verbrennung die Gutschriften für die Energieerzeugung sowie die Umweltbelastung aus CO<sub>2</sub>-Emissionen besonders wichtig sind (Abbildungen 12 und 13), während die Beurteilung der ALM-Rektifikation v.a. von den Gutschrift für wiedergewonnenes Lösungsmittel und die Umweltbelastung der Dampfbereitstellung dominiert wird (Abbildungen 14 und 15). Die Gesamtbewertung wird zudem stark von der gemischspezifischen Aufteilung der Stoffflüsse in Produkt und Rückstand beeinflusst (vgl. Methanol-Gemisch), die aufgrund der Prozessbedingungen bei der Rektifikation zustande kommen. Eine verallgemeinernde Bewertung verschiedener ALM-Gemische ist ohne solche rektifikationsspezifischen Angaben nur spekulativ möglich.

Wenn angenommen werden darf, dass diese Randbedingungen für die Beurteilung verschiedener ALM-Gemische verallgemeinert werden können, kann mit den hier vorgestellten Verfahren die ökologisch bessere der zwei ALM-Behandlungsoptionen aufgrund der Kenntnis einzelner Gemischeigenschaften untersucht werden. Ein Versuch die zwei ALM-Behandlungsoptionen aufgrund der Parameter Kohlenstoffgehalt, Verbrennungsenthalpie, Dampfbedarf für die Rektifikation und Umweltbelastungen der petrochemischen Lösungsmittelherstellung mittels UBP und Primärenergiebedarf zu beurteilen, ist in **Abbildung 16** anhand von Gleichungen 8 und 9 gezeigt (vgl. unten). Darin ist die Umweltbelastung der ALM-Behandlung als Funktion der Umweltbelastung der Lösungsmittelherstellung, ( $U_{\text{Lösungsmittel (Produkt)}}$ , Gleichung 2d) für drei ALM-Typen aufgetragen.

Die Berechnung der Umweltbelastung der ALM-Behandlungsoptionen wie sie in Gleichungen 5b und 6b dargestellt ist, lässt mit der Annahme, dass die Umweltbelastung der petrochemischen Lösungsmittelherstellung eines ALM-Gemisches hauptsächlich aus der Umweltbelastung der Herstellung der Hauptkomponente besteht

$$\sum_i U_{\text{Lösungsmittel, i}} \cdot m_i \approx U_{\text{Lösungsmittel (Produkt)}} \quad (7)$$

wie folgt vereinfachen:

$$U_{\text{Verbrennung}} = U_{\text{Lösungsmittel (Produkt)}} + U_{\text{G}}^{\text{Verbr}} + U_{\text{CO}_2} + U_{\text{NaOH}} + U_{\text{Überhitzer}} + U_{\text{Energie}} \quad (8)$$

$$U_{\text{Rektifikation}} = (1 - \alpha) \cdot U_{\text{Lösungsmittel (Produkt)}} + U_{\text{G}}^{\text{Rekt}} + U_{\text{Dampf}} + U_{\text{Strom}} + U_{\text{Rückstand}} \quad (9)$$

wobei  $U_{\text{Verbrennung}}$  und  $U_{\text{Rektifikation}}$  die Umweltbelastung der funktionellen Einheit einer ALM-Behandlungsoption sind und  $\alpha$  der Ausbeute des Lösungsmittelproduktes (als Verhältnis von Produktstrom und ALM-Strom; im Folgenden auf 85% festgesetzt) entspricht. Die übrigen Terme entsprechen denjenigen aus Gleichungen 1 und 2.

*Toluolähnliche ALM-Gemische*, die hohe Kohlenstoffgehalte und grosse Verbrennungsenthalpien für ALM und Rektifikationsrückstand und einen durchschnittlichen Dampfbedarf in der Rektifikation aufweisen (1 kg/kg ALM), sollten aus ökologischer Sicht rektifiziert werden, sobald die Umweltbelastung der Lösungsmittelherstellung ca. 1300 UBP/kg bzw. 58 MJ Primärenergieverbrauch/kg Lösungsmittel übersteigt. In diese Kategorie gehört das Aceton-Gemisch (1890 UBP/kg, die Umweltbelastung der Lösungsmittelherstellung ist mit Pfeilen an der Ordinate in Abbildung 16 angegeben, vgl. Tabelle 10), obwohl es eine etwas geringere Verbrennungsenthalpie ausweist. Die ALM-Behandlung von wasser- und methanolähnlichen ALM-Gemischen ist, in UBP und Primärenergiebedarf bewertet, stets mit einer grösseren Umweltbelastung pro kg behandeltem ALM verbunden als die ALM-Behandlung von toluolähnlichen Gemischen.

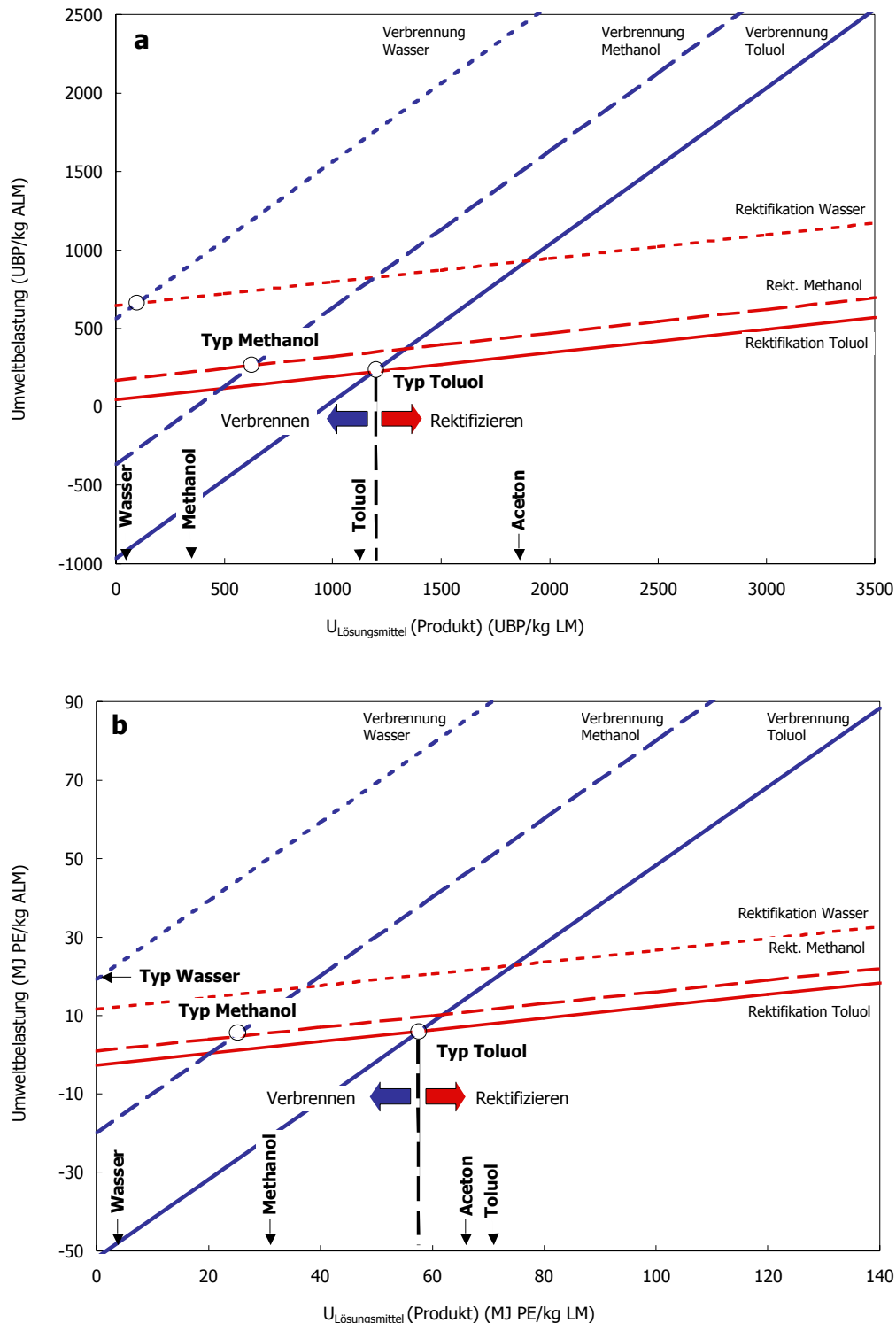


Abbildung 16 Abschätzung der Umweltbelastung durch Verbrennung bzw. Rektifikation (Gleichungen 5 und 6) verschiedener ALM-Gemisch-Typen pro kg ALM mittels (a, oben) UBP und Primärenergiebedarf (b, unten) unter Annahme einer Produktausbeute von 85%. Typ Toluol steht für *toluolähnliche ALM-Gemische*, deren Umweltbelastung hier mit  $\Delta H_{\text{comb}} = 40 \text{ MJ/kg}$ ,  $f_C = 0,9$ ,  $f_{\text{H}_2\text{O}} = 0,001$ ,  $h_{\text{Dampf}} = 1 \text{ kg/kg ALM}$  für das ALM und  $\Delta H_{\text{comb}} = 30 \text{ MJ/kg}$ ,  $f_C = 0,7$ ,  $f_{\text{H}_2\text{O}} = 0,006$  für den Rektifikationsrückstand berechnet wurden. Für *wasserähnliche Gemische* gelten ALM:  $\Delta H_{\text{comb}} = 0 \text{ MJ/kg}$ ,  $f_C = 0$ ,  $f_{\text{H}_2\text{O}} = 1$ ,  $h_{\text{Dampf}} = 6 \text{ kg/kg ALM}$ , Rücktand:  $\Delta H_{\text{comb}} = 0,5 \text{ MJ/kg}$ ,  $f_C = 0,1$ ,  $f_{\text{H}_2\text{O}} = 0,9$ . Für *methanolähnliche Gemische* gelten ALM:  $\Delta H_{\text{comb}} = 21 \text{ MJ/kg}$ ,  $f_C = 0,4$ ,  $f_{\text{H}_2\text{O}} = 0,2$ ,  $h_{\text{Dampf}} = 2 \text{ kg/kg ALM}$ , Rücktand:  $\Delta H_{\text{comb}} = 20 \text{ MJ/kg}$ ,  $f_C = 0,4$ ,  $f_{\text{H}_2\text{O}} = 0,001$ . Die Pfeile an den Ordinaten geben die Umweltbelastung der Lösungsmittelherstellung pro kg an

Die Umweltbelastung von *wasserähnlichen ALM-Gemischen* ist charakterisiert durch das fehlende Potential zur Energieerzeugung durch die Verbrennung ( $\Delta H_{\text{comb}}=0$ ,  $f_c=0$ ,  $U_{\text{Lösungsmittel}} \rightarrow 0$ ) und einen hohen Dampfbedarf (6 kg/kg ALM) in der Rektifikation. Während sich die Verbrennung von wasserähnlichen Gemischen bei einer Bewertung mittels UBP noch knapp lohnen, ist die Rektifikation bei der Bewertung mittels Primärenergiebedarf in jedem Fall die ökologisch günstigere Option. *Methanolähnliche ALM-Gemische* weisen einen hohen Dampfbedarf in der Rektifikation (2 kg/kg ALM) sowie mittlere Verbrennungsenthalpien und Kohlenstoffgehalte (auf ( $\Delta H_{\text{comb}}=20$  MJ/kg,  $f_c=0.4$ , vgl. Tabelle 9). Aufgrund des Dampfbedarfes lohnt sich eine Rektifikation eines solchen Gemisches ab einer Umweltbelastung der Lösungsmittelherstellung von ca. 600 UBP/kg bzw. bei einem Primärenergiebedarf von 25 MJ/kg ( $U_{\text{Lösungsmittel}}$  vom Methanol = 390 UBP/kg bzw. 31 MJ PE/kg, Tabelle 9). Aus Abbildung 16b wird deutlich, dass bei einer stärkeren Gewichtung der Ressourcenschonung die Rektifikation von ALM-Gemischen günstiger bewertet wird.

Diese Spekulationen zeigen, dass mit der Wahl der Bewertungsfaktoren (und entsprechenden Bewertungsmethoden) sowie mit der Festlegung von wenigen ALM-spezifischen Grössen ( $\Delta H_{\text{comb}}$ ,  $f_c$ ,  $U_{\text{Lösungsmittel}}$ ,  $h_{\text{Dampf}}$  vgl. Tabellen 6 und 8) Bereiche festlegen lassen, in welchen sich die Verbrennung bzw. Rektifikation eines ALM-Gemisches lohnt. Inwieweit diese Aussagen mit detaillierteren, fallspezifischen LCAs übereinstimmen, muss mit weiteren Untersuchungen noch gezeigt werden.

### 3.3.6 Bedeutung des Energieversorgungsszenarios für die Bewertung der ALM-Behandlungsoptionen

Die obige Diskussion der ALM-Behandlungsoptionen beruht auf dem Szenario für die werksinterne Energieversorgung mit ALM, das Heizöl in der ALV als zentrale Dampf- und Stromerzeugungseinheit ersetzt. Da im Verfahren für die Berechnung der Umweltbelastung der ALM-Behandlung energieabhängige Gut- und Lastschriften erteilt werden, ist die Bewertung von ALM-Verbrennung und -Rektifikation ebenfalls szenarioabhängig. Wie die Auswertung des Fallbeispiels mit dem Toluol-Methanol-Hydroxyphenylpropionsäure-Wasser-Gemisch gezeigt hat (Abbildungen 5 bis 8) ändert sich die Aussage *nach der Festlegung der Bewertungsfaktoren* bezüglich der ökologisch besseren Behandlungsoption nicht, wenn die Szenarien für die werksinterne Energieversorgung mit derjenigen für Dampf- und Stromerzeugung in Schweiz oder mit der durchschnittlichen europäischen Energieversorgung verglichen werden.

Wie für das Fallbeispiel gezeigt wurde, ist die Bewertung mittels UBP-Bewertungsfaktoren stärker szenarioabhängig als bei der Verwendung von ei99-Bewertungsfaktoren. Im Verfahren für die ALM-Verbrennung beeinflusst eine Änderung des Energieversorgungsszenarios die Gutschrift für die Energieerzeugung in der ALV,  $U_{\text{Energie}}$ . Alle anderen Beiträge zur Umweltbelastung der ALM-Verbrennung sind energieunabhängig. Szenarienabhängige Bewertungsfaktoren für die Energieproduktion,  $b_{\text{Energie}}$ , sind in Tabelle 6 aufgeführt. Sie zeigen, dass im Falle des Szenarios V22 für die werksexterne, europäische Energiebereitstellung, der Bewertungsfaktor für die Gutschrift auf das Doppelte des Basiswertes (V11, -43.6 MJ/kg ALM) ansteigt. Damit werden einem ALM-Gemisch wesentlich höhere Gutschriften zugeschrieben, womit die Umweltbelastung durch die ALM-Verbrennung abnehmen dürfte.

Im Verfahren für die ALM-Rektifikation stehen energieszenarioabhängige Bewertungsfaktoren mit Umweltbelastungen in Beziehung. Die Bewertungsfaktoren für den Dampf- und Strombedarf,  $b_{\text{Dampf}}$  und  $b_{\text{Strom}}$  (Tabelle 8) steigen im Falle der europäischen Energiebereitstellung um das 2.5- bzw. 3-fache an (Basiswert  $b_{\text{Dampf}}$  (R11) = 84.2 UBP/kg Dampf). Da der Strombedarf für die ALM-Rektifikation aufgrund des geringen Stromverbrauchs keine Rolle spielt, würde sich hauptsächlich die Umweltbelastung durch den Dampfverbrauch stark erhöhen. Für die Wahl der ökologisch besseren ALM-Behandlungsoption hiesse dass, dass die Verbrennung besser als die Rektifikation bewertet werden dürfte. Erst Lösungsmittel, deren Produktion eine grosse Umweltbelastung verursacht, könnten mit entsprechenden Gutschriften im Rektifikations-Bewertungsverfahren diese Option zur ökologisch sinnvollen Alternative machen.



## 4 AUSBLICK UND WEITERER FORSCHUNGSBEDARF

In diesem Projekt wurde durch die ökologische Bewertung mittels LCA je eines Fallbeispiels der ALM-Verbrennung und -Rektifikation in der chemischen Industrie ein Verfahren für die Berechnung der Umweltbelastung dieser beiden ALM-Behandlungsoptionen abgeleitet. Während die Bewertung der ALV auf repräsentativen Daten für eine ALM-Verbrennung nach schweizerischen Standards beruht, liegt der Beurteilung der ALM-Rektifikation die Erhebung von Stoff- und Energieflüssen für ein spezifisches ALM-Gemisch zugrunde. Mit der Prozessmodellierung für kontinuierliche betriebene Rektifikationskolonnen konnten wichtige energiebezogene Betriebskenngrößen für diese Behandlungsoption grob abgeschätzt werden, ohne dass der ökologische Vergleich der ALM-Behandlungsoptionen nicht möglich gewesen wäre. Allerdings sind die Betriebsbedingungen wie sie mit der Modellierung der Rektifikationskolonne berechnet wurden, nicht praxisnah und noch stark verbesserungsbedürftig. Um die Beurteilung von mehr als fünf exemplarischen ALM-Gemischen zu ermöglichen, muss ein Berechnungsverfahren, wie hier vorgestellt, sowohl anhand von verschiedenen exemplarischen Datensätzen aus der Praxis *geprüft* und für die ALM-Rektifikation *erweitert* werden. Zukünftige Arbeiten sollten

- die Erfassung von Stoff- und Energieströmen von Rektifikationskolonnen umfassen, damit ausgehend von detaillierteren technischen Beschreibungen von Rektifikationsprozessen (Anlagen und Betriebsbedingungen wie Trennstufenzahl, Rücklaufverhältnis, Ausbeuten etc.) auf die zur Auftrennung von ALM-Gemischen nötigen Energiekennzahlen wie dem Dampfbedarf geschlossen werden kann. Letzteres ermöglicht schliesslich eine Quantifizierung der wichtigen Umweltbelastungsbeiträge des ALM-Rektifikationsprozesses und könnte mit einer Erfassung und Analyse von Stoff- und Energieströmen verschiedener Rektifikationskolonnen und -typen geschehen.
- die Quantifizierung der stofflichen Gutschriften mittels LCAs der petrochemischen Lösungsmittelherstellung verbessern und erweitern. Im vorliegenden Projekt war aufgrund der geringen Datenverfügbarkeit solcher Lösungsmittel-LCI die Untersuchung auf wenige Lösungsmittel beschränkt. Da eine Inventarisierung von Raffinerien aufgrund der stark integrierten Stoffflüsse wenig machbar erscheint, müssen für diese Stoff- und Energieströme Modelle anhand von Fallbeispielen entwickelt werden, die die Berechnung der Umweltbelastung der Produktion von komplizierteren Lösungsmitteln ermöglichen.
- den Fokus von ALM-Verbrennung und -Rektifikation auf weitere Aufbereitungstechnologien wie Membranverfahren u.a. erweitern. Ein Vergleich von Technologien wie der ALM-Behandlung mittels Membranverfahren könnte schon aufgrund einfacher Annahmen für die Effizienz bzw. der Ausbeute an wieder einsetzbaren Lösungsmitteln und Angaben über den dafür nötigen Energieaufwand erreicht werden. Da andere Technologien auch ALM-Gemische mit anderen als den hier vorausgesetzten Eigenschaften aufbereiten (z.B. höherer Wassergehalt, Bewertung von Kontaminationen im Lösungsmittel etc.), würde deren Berücksichtigung die Relevanz des ökologischen Vergleichs für die Entscheidungsfindung in der industriellen Praxis erhöhen.
- die ökologische Bewertung der ALM-Behandlungsoptionen mit ökonomischen Betrachtungen erweitern, um so zur praxisnahen Entscheidungsfindung beitragen zu können.

## 5 LITERATUR

- (1) APME. 2002. The Ecoprofile Reports. Association of Plastic Manufacturers in Europe.
- (2) AspenTechnologieInc. 2001. Aspen Plus, 10.2 ed.
- (3) Badertscher, B. 1995. Betriebsvorschrift Toluol wg.dest. aus 8623, Kolonne 4 150772. Valrec Services AG / Ciba-GeigyAG.
- (4) Berger, R., and B. Badertscher. 2001-2002. Persönliche Mitteilungen betreffend Dampfverbrauch von Rektifikationsanlagen der Firmen Hoffmann-La Roche AG und Valorec Services AG.
- (5) Bruder, C. 2000. Abfalllösungsmittelmanagement in der chemisch-pharmazeutischen Industrie. Diplomarbeit, erstellt in der Gruppe Umwelt- und Sicherheitstechnologie. ETH Zürich.
- (6) BUWAL. 1998. Bewertung von Ökobilanzen mit der Methode der ökologischen Knappheit - Ökofaktoren 1997. SRU Nr. 297. Bundesamt für Umwelt, Wald und Landschaft (BUWAL).
- (7) BUWAL. 1996. Ökoinventaren für Verpackungen - Band II. Schriftenreihe Umwelt Nr. 250/II. Bundesamt für Umwelt, Wald und Landschaft (BUWAL).
- (8) Capello, C. 2002. Abfalllösungsmittelmanagement in der chemischen Industrie - Ein ökologischer Vergleich von Rektifikation und Verbrennung mittels Life-Cycle Assessment. Diplomarbeit ETH - Gruppe für Umwelt- und Sicherheitstechnologie. ETH Zürich.
- (9) El-Halwagi, M. M., and V. Manousiouthakis. 1989. Automatic synthesis of mass-exchange networks with single-component targets. Chemical Engineering Science 45:2813-2831.
- (10) El-Halwagi, M. M., and V. Manousiouthakis. 1989. Synthesis of mass exchange networks. American Institute of Chemical Engineers Journal 35:1233-1244.
- (11) ETH\_Domain. 2003. Life-Cycle Inventory Reports 1-13. Center for Life-Cycle Inventories in the ETH-Domain.
- (12) Frischknecht, R., U. Bollens, S. Bosshard, M. Ciot, L. Ciseri, G. Doka, R. Hischier, A. Martin, R. Dones, and U. Gantner. 1996. Ökoinventare von Energiesystemen - Grundlagen für den ökologischen Vergleich von Energiesystemen und den Einbezug von Energiesystemen in Ökobilanzen für die Schweiz. 3rd edition. Institut für Energietechnik, Eidgenössische Technische Hochschule, Zürich; Paul Scherrer Institut, Villigen/Würenlingen.
- (13) Goedkoop, M., and R. Spriesma. 1999. The Eco-Indicator 99: A damage oriented method for life cycle impact assessment: Methodology report. Pré Consultants B. V.
- (14) Hellweg, S., T. B. Hofstetter, and K. Hungerbühler. 2001. Modeling waste incineration for life-cycle inventory analysis in Switzerland. Environmental Modeling & Assessment 6:219-235.
- (15) Hungerbühler, K., J. Ranke, and T. Mettler. 1999. Chemische Produkte und Prozesse: Grundkonzepte zum umweltorientierten Design. Springer.
- (16) Jahn, C. 2000. Abfalllösungsmittelbewirtschaftung in der chemischen Industrie. Zwischenbericht zu Händen des BfE Projekt 31239, Vertrag 71186, erstellt in der Gruppe Umwelt- und Sicherheitstechnologie. ETH Zürich.
- (17) Perry, R. H., and D. W. Green (ed.). 1997. Perry's Chemical Engineers' Handbook, 7<sup>th</sup> ed. McGraw-Hill, Inc., New York a.o.
- (18) PréConsultants. 2001. SimaPro, 5 ed, Amersfoort.
- (19) Seyler-Jahn, C. 2002. Management von Abfalllösungsmittel in der chemisch-pharmazeutischen Industrie - Anwendung von Ökobilanzen zur Bewertung von verschiedenen Verwertungsoptionen (Arbeitstitel). Dissertation ETH Nr. XX'XXX. ETH Zürich.
- (20) Smallwood, I. 1993. Solvent Recovery Handbook, London.

- (21) Sorensen, J. M., and W. Arlt. 1981. Liquid-Liquid Equilibrium Data Collection - Binary Systems, vol. V Part 1. Dechema - Deutsche Gesellschaft für chemisches Apparatewesen.
- (22) Sorensen, J. M., and W. Arlt. 1981. Liquid-Liquid Equilibrium Data Collection - Ternary Systems, vol. V Part 2. Dechema - Deutsche Gesellschaft für chemisches Apparatewesen.
- (23) Stoye, D. 2002. Solvents - Economic Aspects. *In* Wiley-VCH (ed.), Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, 6th ed. Wiley-VCH, Weinheim.
- (24) Unger, R., and B. Badertscher. 2001-2002. Persönliche Mitteilungen betreffend ALV (Unger) und Rektifikationsanlage (Badertscher) der Valorec Services AG.
- (25) ValorecAG. 1999. ALV Jahresbericht 1998.
- (26) Whim, B. P., Johnson, P. G. (ed.). 1996. Directory of Solvents. Chapman & Hall, London.
- (27) Wypych, G. (ed.). 2001. Handbook of Solvents. ChemTec Publishing, Toronto.
- (28) Yaws, C. L. (ed.). 1999. Chemical Properties Handbood. McGraw-Hill, New York.
- (29) Zimmermann, P., G. Doka, F. Huber, A. Labhardt, and M. Menard. 1996. Ökoinventare von Entsorgungssystemen - Grundlagen für die Integration der Entsorgung in Ökobilanzen. Institut für Energietechnik, Eidgenössische Technische Hochschule, Zürich; Gruppe Energie-Stoffe-Umwelt.

## 6 ANHANG

### 6.1 Tabellen Ökoinventare

Tabelle A1 Stoff- und Energieströme für die Ökobilanzierung der ALV-2 im Jahr 1998.

Input		Menge (Einheit)		Output		Menge (Einheit)	
Ressourcen	ALM	33350	t	Produkte	Niederdruck- dampf (ALV)	246000	MWh
	Heizöl EL Stützfeuerung	829	t		Strom	18700	MWh
	Heizöl EL Überhitzer	977	t				
	Regenerat (Überhitzer)	2960	t	Emissionen Luft	Rauchgas	280000000	Nm <sup>3</sup>
	Erdgas	47000	Nm <sup>3</sup>		CO <sub>2</sub>	66000	t
	Strom (CH)	7100	MWh		NO <sub>x</sub>	14	t
	Strom (ALV-2)	3600	MWh		SO <sub>2</sub>	1.0	t
Hilfsstoffe					Staub	1.1	t
	Trinkwasser	325000	t		NH <sub>3</sub>	0.8	t
	Fabrikwasser	290000	m <sup>3</sup>		CO	0.3	t
	Abgas	1250000	Nm <sup>3</sup>		HCl	0.4	t
	NaOH	5680	t		HBr	0.05	t
	HCl	290	t		HI	0.002	t
	Schwefelsuspension	4	t		Ni	0.000085	t
	NaCl	5	t		Cu	0.00012	t
	Trinatriumphosphat	0.07	t		Co	0.000088	t
	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	3	t		Zn	0.0022	t
	NH <sub>4</sub> OH	240	t		Fe	0.0020	t
	NH <sub>4</sub> OHrec	300	t				
	CaCl <sub>2</sub>	170	t	Emissionen	Abwasser	107000	m <sup>3</sup>
	Polyelektrolyt	0.70	t	Wasser	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	840	t
	TMT	7	t		Cl <sup>-</sup>	1100	t
	FeCl <sub>3</sub>	2	t		Br <sup>-</sup>	110	t
					I <sup>-</sup>	3.80	t
					F <sup>-</sup>	1.50	t
					Ni	0.04	t
					Cu	0.02	t
					Co	0.13	t
					Zn	0.05	t
					Fe	2.50	t
				feste Abfälle	Schlacke	3	t
					Schwermetall- schlamm	495	t

Tabelle A2 Stoff- und Energieströme für die Ökobilanzierung der Rektifikationskolonne im Jahr 1995

Input		Menge (Einheit)		Output		Menge (Einheit)	
Ressourcen	ALM (Toluol / Methanol / H <sub>2</sub> O)	13760	kg	Produkte	Toluol (99.5%)	11610	kg
	Dampf aus ALV	15000	kg		Rückstand	2650	kg
	Strom aus ALV	200	kWh	Emissionen	VOC	1	kg
	Wasser (Prozess)	400	t	Luft	AOX	0.83	kg
Hilfsstoffe				Emissionen	DOC	11.6	kg
	N <sub>2</sub>	37	kg	Wasser			
	Methanol	500	kg				

## **6.2 Verzeichnis wichtiger Dokumente des Projekts Abfalllösungsmittelbewirtschaftung in der chemischen Industrie**

- Bruder, C. 2000. Abfalllösungsmittelmanagement in der chemisch-pharmazeutischen Industrie. Diplomarbeit, erstellt in der Gruppe Umwelt- und Sicherheitstechnologie. ETH Zürich.
- Capello, C. 2002. Abfalllösungsmittelmanagement in der chemischen Industrie - Ein ökologischer Vergleich von Rektifikation und Verbrennung mittels Life-Cycle Assessment. Diplomarbeit ETH - Gruppe für Umwelt- und Sicherheitstechnologie. ETH Zürich.
- Seyler-Jahn, C. 2002. Management von Abfalllösungsmittel in der chemisch-pharmazeutischen Industrie - Anwendung von Ökobilanzen zur Bewertung von verschiedenen Verwertungsoptionen (Arbeitstitel). Dissertation ETH Nr. XX'XXX. ETH Zürich.

### 6.3 Abkürzungsverzeichnis

ALM	Abfalllösungsmittel
ALV	Abfalllösungsmittelverbrennungsanlage
ALV-2	Abfalllösungsmittelverbrennungsanlage 2 der Valorec Services AG
AOX	adsorbierbare halogenhaltige Kohlenwasserstoffe
$b_i$	Bewertungsfaktor
$\Delta H_{\text{comb}}, \Delta H_{\text{comb}}^{\text{ALM}}$	Verbrennungsenthalpie von Abfalllösungsmittel
DOC	gelöster organischer Kohlenstoff (dissolved organic carbon)
ei99	Eco-Indicator 99
ei99-Pt	Umweltbelastungspunkte nach Methode des Eco-Indicators 99
$f_i$	Fraktion bzw. Massenanteil
$f_C$	Kohlenstoffanteil (bezogen auf Masse)
$f_{\text{H}_2\text{O}}$	Wasserstoffanteil (bezogen auf Masse)
$h_i$	Hilfsstoffbedarf
$h_{\text{Dampf}}$	Dampfbedarf für Rektifikation eines Gemisches
$H_u$	unterer Heizwert
Heizöl EL	Heizöl Extraleicht
LCA	Life-Cycle Assessment, Ökobilanz
LCI	Life-Cycle Inventory, Ökoinventar
LM-Herstellung	petrochemische Herstellung von Lösungsmitteln
$m_i$	Massenanteil der Komponente i
MJ PE	MJ Primärenergie
$\text{m}_n^3, \text{Nm}^3$	Normkubikmeter (bei 0°C, 1 atm)
NMVOC	Nichtmethanogene flüchtige organische Verbindungen / Kohlenwasserstoffe (non-methane volatile organic compounds)
SAVA	Sonderabfallverbrennungsanlage
$U_{\text{ALM-Rektifikation}}$	Umweltbelastung durch den Rektifikationsprozess
$U_{\text{ALM-Verbrennung}}$	Umweltbelastung durch den Verbrennungsprozess
$U_{\text{CO}_2}$	Umweltbelastung durch CO <sub>2</sub> -Emissionen
$U_{\text{Dampf \& Strom}}$	Umweltbelastung durch Dampf- und Strombereitstellung
$U_{\text{Energie}}$	Umweltbelastung durch Energiebereitstellung
$U_G^{\text{Verb}}, U_G^{\text{Rekt}}$	Basisbeitrag zur Umweltbelastung von ALM-Verbrennung oder -Rektifikation
$U_{\text{Lösungsmittel}}$	Umweltbelastung durch petrochemische Herstellung von Lösungsmitteln
$U_{\text{Lösungsmittel (ALM)}}$	Umweltbelastung durch petrochemische Herstellung aller Komponenten eines ALM-Gemisches
$U_{\text{Lösungsmittel, i}}$	Umweltbelastung durch petrochemische Herstellung der ALM-Komponente i (i = Toluol, Aceton, Methanol, Benzol, Wasser)
$U_{\text{Lösungsmittel (Produkt)}}$	Umweltbelastung durch petrochemische Herstellung der wiedergewonnenen Produkt-Gemisches
$U_{\text{NaOH}}$	Umweltbelastung durch NaOH-Bereitstellung
$U_{\text{Rektifikation}}$	Umweltbelastung der funktionellen Einheit der ALM-Rektifikation
$U_{\text{Rückstand}}$	Umweltbelastung durch Rektifikationsrückstandsverbrennung in ALV

U <sub>Überhitzer</sub>	Umweltbelastung durch Betrieb des Überhitzers in der ALV
U <sub>Verbrennung</sub>	Umweltbelastung der funktionellen Einheit der ALM-Verbrennung
UBP	Umweltbelastungspunkte nach Methode der ökologischen Knappheit
VOC	flüchtige organische Verbindungen (volatile organic compounds)
WSH	Werk Schweizerhalle (betrifft Valorec Services AG)