

Diplomarbeit
an dem Departement für Umweltnaturwissenschaften
der ETH Zürich

Wintersemester 2001/2002

Abfalllösungsmittelmanagement in der chemischen Industrie

Ein ökologischer Vergleich von Rektifikation und
Verbrennung mittels Life-Cycle Assessment

Verfasser: Christian Capello
Diplomprofessor: Prof. Dr. Konrad Hungerbühler
Betreuung: Dr. Thomas Hofstetter

Dank

Zum Gelingen dieser Diplomarbeit haben viele Personen beigetragen. Ich danke herzlich:

- Thomas Hofstetter, der sich viel Zeit für die Betreuung genommen hat und bei Fragen jederzeit weiterhalf.
- Prof. Konrad Hungerbühler, der immer wieder interessante Denkanstösse geliefert und auf weiterführende Aspekte hingewiesen hat.
- Ramon Mendevil für die kompetente Einführung in computergestützte Prozessimulationen.
- Herrn R. Unger von der Valorec Services AG für die Besichtigung der Abfalllösungsmittelverwertungsanlage im Werk Schweizerhalle, Basel.
- Herrn B. Badertscher von der Valorec Services AG für die persönlichen Informationen über die Rektifikationsanlage der Firma Valorec Services AG.
- Allen Mitgliedern der Gruppe Sicherheit und Umweltschutz, welche durch ein gutes Gruppenklima, regelmässige Zvieris mit Kaffee und Kuchen und gemeinsamen sportlichen Betätigungen für optimale Rahmenbedingungen gesorgt haben.

Zusammenfassung

In der chemischen Industrie fallen grosse Mengen Abfalllösungsmittel (ALM) an. Für dessen Behandlung gibt es im Wesentlichen zwei Optionen: die thermische Verwertung (Verbrennung) und die Wiedergewinnung (Rektifikation). In dieser Arbeit wird ein ökologischer Vergleich dieser Behandlungsoptionen gemacht. Für die Bewertung der ökologischen Belastung wurde die Methode der Ökobilanz (Life Cycle Assessment; LCA) verwendet.

Frühere Studien zu diesem Thema haben gezeigt, dass eine generelle, d.h. für verschiedene Lösungsmittel gültige Untersuchung der ökologisch besseren Behandlungsoption, nicht möglich ist, da die Behandlung unterschiedlicher ALM-Gemische unterschiedlichen Rahmenbedingungen unterliegen. Deshalb wird in einer Fallstudie exemplarisch die Verbrennung eines Toluol-Methyloxcarbonsäure-Methanol-Wasser Gemisches in einer Abfalllösungsmittelverwertungsanlage (ALV) und die Behandlung des Gemisches durch eine Rektifikation bewertet. Durch die Behandlung von ALM entstehen Produkte (Energie in der Verbrennungsanlage und Lösungsmittel (Toluol) in der Rektifikation), für die ökologische Gutschriften gegeben werden. Es zeigte sich, dass diese Gutschriften die Bewertung signifikant beeinflussen, wobei die Gutschriften der stofflichen Verwertung von Lösungsmitteln höher als die thermischen Gutschriften sind. Daher wird die Rektifikation aus Sicht des LCA besser bewertet.

Damit verallgemeinerbare Schlussfolgerungen betreffend des ökologischen Vergleiches zwischen der Verbrennung und der Rektifikation von ALM gezogen werden könnten, wurden weitere, theoretische ALM-Gemische definiert. Diese enthalten die Hauptkomponenten (d.h. Rektifikationsprodukte) Toluol, Benzol, Phenol, Aceton, Methanol und Wasser. Wie für das Fallbeispiel wurden für diese ALM-Gemische eine vergleichende Ökobilanz für deren Behandlung in den gleichen Anlagen erstellt. Dabei zeigte sich, dass sowohl bei der Verbrennung als auch bei der Rektifikation die ökologische Belastung massgeblich durch die Zusammensetzung des ALM und nicht durch den Betrieb der Anlagen beeinflusst wird. Die ökologische Belastung der ALM-Behandlung wird durch drei Grössen bestimmt: (1) die ökologische Belastung der Herstellung eines Lösungsmittels, (2) den Heizwert des ALM-Gemisches und (3) den Energiebedarf der Trennung des ALM-Gemisches in der Rektifikation.

Stammt das bei der Rektifikation eingesparte Lösungsmittel aus einem aufwändigen chemischen Herstellungsprozess, so ist diese – aus Sicht der Ökobilanz – der Verbrennung vorzuziehen.

Abkürzungsverzeichnis

ALM	Abfalllösungsmittel
ALV	Abfalllösungsmittelverwertungsanlage
APME	The Association of Plastics Manufacturers in Europe
BUWAL	Bundesamt für Umwelt, Wald und Landschaft
EI 99	Eco Indicator 99
EVS	Energieversorgung
GMP	Good Manufacturing Practice
Heizöl EL	Extraleichtes Heizöl
LCA	Life Cycle Assessment
LCI	Life Cycle Inventory
LCIA	Life Cycle Impact Assessment
LM	Lösungsmittel
LRV	Luftreinhalteverordnung
Mass.%	Massenanteil in %
Mol %	Molanteil in %
NMVOG	Non methane volatile organic compounds
PAK	Polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe
RSMVA	Regionale Sondermüllverbrennungsanlage
RSC	Recycling and Solvent-Center
SAVA	Sonderabfallverbrennungsanlage
UBP	Umweltbelastungspunkte
VOC	Volatile organic compounds
Vol.%	Volumenanteil in %
WSH	Werk Schweizerhalle

Inhalt

I. EINLEITUNG UND ZIELE DER ARBEIT	1
II. ALM-BEHANDLUNG IN DER CHEMISCHEN INDUSTRIE	3
II.1. MÖGLICHKEITEN DER ALM-BEHANDLUNG.....	3
II.1.1. <i>Regeneration</i>	3
II.1.2. <i>Verbrennung</i>	4
II.2. DIE VALOREC SERVICES AG	5
II.2.1. <i>Geschichtlicher Hintergrund und Firmenprofil</i>	5
II.2.2. <i>Die Regeneration im WSH</i>	6
II.2.3. <i>ALM-Verbrennung (ALV)</i>	6
II.3. BETRACHTETE ENTSORGUNGSPROZESSE	7
II.3.1. <i>Die Rektifikationskolonne 4</i>	7
II.3.2. <i>Die ALV</i>	9
III. VERGLEICHENDES LCA DER VERBRENNUNG UND REKTIFIKATION	11
III.1. EINLEITUNG	11
III.2. ZIEL- UND RAHMENDEFINITION	12
III.2.1. <i>Festlegung der funktionellen Einheit</i>	12
III.2.2. <i>Diskussion der Systemgrenzen</i>	12
III.3. SACHBILANZ	13
III.3.1. <i>Szenarien der ALM-Behandlung</i>	13
III.3.2. <i>Ökologische Gutschriften in den verschiedenen Szenarien</i>	15
III.3.3. <i>Überblick über Szenarien und Varianten</i>	17
III.3.4. <i>Anlagen der ALM-Behandlung</i>	18
III.3.5. <i>LCI der Szenarien</i>	20
III.3.6. <i>Modellierung in SimaPro</i>	23
III.4. WIRKUNGSABSCHÄTZUNG	26
III.4.1. <i>Wahl der Bewertungsmethode</i>	26
III.4.2. <i>Ergebnisse</i>	27
III.5. AUSWERTUNG	32
III.5.1. <i>Verbrennung oder Rektifikation aus Sicht des LCA</i>	32
III.5.2. <i>Diskussion der Szenarien A-11 und B-11 unter Einbezug der Wirkungs- bzw. Schadensklassen</i>	32
III.5.3. <i>Einfluss der Gutschriften auf die Bewertung der Verbrennung und der Rektifikation</i>	33
III.5.4. <i>Einfluss der Fremdenergie auf die Bewertung der Rektifikation</i>	33
III.5.5. <i>Relevanz des modellierten Fallbeispiels für die Bewertung von ALM-Behandlungsoptionen</i>	36
IV. EINFLUSS DER ALM-ZUSAMMENSETZUNG AUF DIE SYSTEMBETRACHTUNG	37
IV.1. EINLEITUNG	37
IV.2. FESTLEGUNG DER ALM-MISCHUNGEN.....	38
IV.2.1. <i>Belastung der LM-Herstellung</i>	40

IV.2.2. Gutschriften für die Energieerzeugung in der ALV.....	40
IV.2.3. Dampfaufwand der Rektifikation.....	41
IV.3. BELASTUNG DURCH DIE ALM-VERBRENNUNG IN DER ALV	42
IV.3.1. Analyse der Belastungsquellen.....	42
IV.3.2. Bewertung der Verbrennung der ALM-Gemische.....	44
IV.3.3. Ergebnisse der Bewertung.....	50
IV.4. BELASTUNG DER REKTIFIKATION	52
IV.4.1. Analyse der Belastungsquellen.....	52
IV.4.2. Simulation der ALM-Gemische mit Aspen	53
IV.4.3. Bewertung der Rektifikation der ALM-Gemische.....	56
IV.4.4. Ergebnisse der Bewertung.....	58
IV.4.5. Verbrennung der Destillationsrückstände.....	59
V. SYNTHESE.....	60
V.1. ERGEBNISSE	60
V.2. DISKUSSION.....	61
V.2.1. Diskussion der ALM-Gemische	61
V.2.2. Schlussfolgerungen.....	63
V.3. EVALUATION DER METHODE.....	65
V.3.1. Unsicherheiten der wichtigsten Einflussparameter.....	65
V.3.2. Weitere Unsicherheiten.....	66
VI. LITERATURVERZEICHNIS.....	67
VII. ANHANG.....	69
TEIL A: STOFFDATEN UND UMRECHNUNGEN	69
TEIL B: BERECHNUNGEN ZU DEN ALM-GEMISCHEN	70
B1: Berechnungen zur ALV.....	70
B2: Berechnungen zur Rektifikation	76
B3: Verbrennungsenthalpie und C-Gehalt.....	78
TEIL C: ROHDATEN DER RESULTATE AUS SIMAPRO	79

I. Einleitung und Ziele der Arbeit

In der chemischen Industrie werden grosse Mengen unterschiedlicher Lösungsmittel (LM) eingesetzt. Meistens können diese nach dem Gebrauch in einem Produktionsbetrieb nicht mehr verwendet werden, da sie verschmutzt sind, in unbrauchbarer Form vorliegen oder wegen entsprechender Vorschriften (z.B. Good Manufacturing Practice (GMP) Standards) nicht mehr weiterverwendet werden dürfen [1] und werden somit zu Abfall. Die Abfalllösungsmittel (ALM) der chemischen Industrie variieren sehr stark in ihrer Zusammensetzung. Ihr Aggregatzustand ist aber zumindest mengenmässig betrachtet überwiegend flüssig. Für flüssige ALM werden grundsätzlich zwei Behandlungsverfahren eingesetzt: die thermische und die stoffliche Verwertung. In dieser Arbeit wird untersucht, wie sich die Wahl der Behandlungsoptionen von ALM auf die Umwelt auswirkt. Dazu wird anhand von Fallbeispielen aus der chemischen Industrie ein ökologischer Vergleich der zwei alternativen ALM-Behandlungsoptionen Verbrennung und Rektifikation gemacht.

Durch die ALM-Behandlung werden verschiedene Emissionen verursacht, Ressourcen verbraucht und Produkte in Form von Energie oder Lösungsmittel generiert. Der Ressourcenverbrauch, die Diversität und Quantität der Emissionen sowie die Produkte hängen sowohl von den Inhaltsstoffen des ALM als auch von den Betriebsmissionen der Anlagen ab. In die ökologische Bewertung der ALM-Behandlung sollen alle Emissionen, Ressourcenverbräuche und Produkte miteinbezogen und gewichtet werden. Daraus soll deren Auswirkung auf die Umwelt quantifiziert werden können. Dafür wurde die Methode der Ökobilanz (Life Cycle Assessment, LCA) gewählt.

Die Bewertung von Entsorgungssystemen mittels Ökobilanzen ist bisher je nach Entsorgungssystem unterschiedlich intensiv untersucht worden. Für die Modellierung von Sonderabfallverbrennungsanlagen (SAVA) in Ökobilanzen existieren Studien [2]. Für durchschnittliche Schweizer SAVA's wurden sogenannte Ökoinventare erstellt. Darin werden die durchschnittlichen Aufwendungen an Infrastruktur und Betriebsmittel erfasst, sowie die Zusammensetzung der Inputströme und die Energiegewinnung beschrieben. Desweiteren sind für die Emissionen der Schweizerischen SAVA's 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 [2]. Diese Koeffizienten sind aber nicht für alle Verbrennungsanlagen konstant und können auch nicht als Funktion des Brennstoffes beschrieben werden [3]. Deshalb sind sie nicht geeignet für die stoffspezifische Betrachtung der ALM-Behandlungsoptionen.

Über die Erfassung von Rektifikationsanlagen mittels Ökobilanzen sind keine Studien bekannt. Dies liegt daran, dass Rektifikationsanlagen sehr produktspezifisch sind. So ist die ökologische Bewertung von Rektifikationsprozessen von mehreren Faktoren abhängig: der Zusammensetzung des ALM, dem Produkt, das wiedergewonnen wird, der Rektifikationskolonne und der Art der Energiebereitstellung. Die ökologische Bewertung wird durch die Inhaltsstoffe der rektifizierten Mischung beeinflusst. Haben die wiedergewonnen Stoffe durch ihre Herstellung eine grosse Umweltbelastung verursacht, so

erhöht dies die ökologische Gutschrift durch ihre Wiedergewinnung. Desweiteren ist die Rektifikation ein energieaufwändiger Prozess [4]. Deshalb ist es für die Bewertung äusserst wichtig, wie die verwendete Energie hergestellt wird. Für die Bereitstellung von Energie existieren -unter ökologischen Gesichtspunkten betrachtet- sehr unterschiedliche Verfahren, was zu unterschiedlichen Bewertungen führt. So verursacht die Energiegewinnung aus der Verbrennung von fossilen Brennstoffen (z.B. Öl, Kohle, Erdgas) eine grössere ökologische Belastung wie die Nutzung von erneuerbaren Energien zur Energieproduktion oder die thermische Verwertung von Abfall.

Frühere Untersuchungen [1] haben gezeigt, dass eine generelle, d.h. für verschiedene Lösungsmittel gültige Untersuchung der ökologisch günstigeren Behandlungsoption nicht möglich ist, da unterschiedliche ALM-Gemische den unterschiedlichen Rahmenbedingungen der Rektifikationsanlagen unterliegen. Deshalb wird in einer Fallstudie exemplarisch die Verbrennung eines Toluol-Methylox-carbonsäure-Methanol-Wasser Gemisches in einer Abfalllösungsmittelverwertungsanlage (ALV) und die Behandlung des Gemisches durch eine Rektifikation bewertet. Die ökologisch relevanten Stoff- und Energieströme konnten auf Grund von Daten der entsprechenden Anlagen der Firma *Valorec Services AG* in Schweizerhalle in Ökoinventaren erfasst werden. Um aus dem Fallbeispiel verallgemeinerbare Erkenntnisse ziehen zu können, wurden veränderte, theoretische ALM-Gemische definiert. Wie für das Fallbeispiel wurden für diese ALM-Gemische eine vergleichende Ökobilanz für deren Behandlung in den gleichen Anlagen der Firma *Valorec Services AG* erstellt. Da keine Daten für deren Stoff- und Energieströme existieren, werden die ökologischen Belastungen der ALM-Gemische durch vereinfachte Berechnungsverfahren angenähert. Die Ziele dieser Diplomarbeit lassen sich somit wie folgt definieren:

1. Erarbeitung einer vergleichenden, ökologischen Bewertung des Fallbeispiel-ALM in der ALV und der Rektifikationskolonne der Firma *Valorec Services AG* mittels einer Ökobilanz.
2. Erstellung eines Berechnungsverfahrens für die ökologische Bewertung anderer ALM in der gleichen ALV und Rektifikationskolonne.
3. Auf Grund der Resultate sollen allgemeine Aussagen über den ökologischen Vergleich der Verbrennung mit der Rektifikation von ALM formuliert werden können.

II. ALM-Behandlung in der chemischen Industrie

Dieses Kapitel erklärt die Thematik der ALM-Behandlung in der Schweiz im allgemeinen und erläutert das Umfeld des gewählten Fallbeispiels in der chemischen Industrie. Es wird beschrieben, welche Verfahren angewendet werden können, um das ALM zu behandeln und welches aus ökologischer Sicht deren Vor- und Nachteile sind. Zudem wird die Firma *Valorec Services AG*, die Betreiberfirma der Anlagen, in denen das Fallbeispiel behandelt wird, vorgestellt und die technischen und betrieblichen Eckdaten dazu zusammengefasst.

II.1. Möglichkeiten der ALM-Behandlung

In der chemischen Industrie wird eine Vielzahl unterschiedlicher Lösungsmittel eingesetzt. Entsprechend variiert die Zusammensetzung des ALM sehr stark, d.h. Parameter wie Reinheit, Brennwert und Feststoffgehalt, die für die Wahl der ALM-Behandlung wichtig sind, bleiben folglich nicht konstant.

Da die überwiegende Menge des ALM flüssig ist und im untersuchten Fallbeispiel ebenfalls nur flüssiges ALM behandelt wird, beziehen sich die folgenden Aussagen lediglich auf flüssige ALM. Grundsätzlich werden zwei Möglichkeiten für die Behandlung des flüssigen ALM eingesetzt: Die thermische und die stoffliche Verwertung.

II.1.1. Regeneration

Für die ALM-Regeneration werden meist folgende Haupttechnologien eingesetzt [1]:

- Rektifikation
- Flüssig-flüssig-Extraktion
- Membranverfahren

Da in der Praxis aus Kostengründen oft mit Mehrzweckanlagen gearbeitet wird, wird für die Regeneration des ALM meistens eine Rektifikation eingesetzt, da diese einfache Technologie sehr flexibel und robust gegenüber der ALM-Zusammensetzung ist [1]. Die Rektifikation wird in Batchkolonnen, kontinuierlichen Kolonnen und Hybridanlagen betrieben. Grundsätzlich können mit der entsprechenden Technik alle ALM-Gemische aufbereitet werden. Da aber meistens nur die Rektifikation angewendet wird, ist die Regeneration gewisser ALM-Gemische nur mit grossem Aufwand oder unter Umständen nicht möglich.

Die Lösungsmittel-Aufbereitung ist ein energieintensiver Betrieb [4] (als grobe Abschätzung gilt, dass für die Rektifikation von einer Tonne ALM mindestens eine Tonne Betriebsdampf benötigt wird [5]) und die Rückstände müssen ebenfalls entsorgt

werden. Diese Umstände verursachen Kosten, womit die Regeneration oftmals nicht mehr konkurrenzfähig gegenüber der Entsorgung ist. Zudem müssen teilweise noch Kosten für die Lagerung des aufbereiteten Lösungsmittels getragen werden.

Die Regeneration weist gegenüber der ALM-Entsorgung einige Vorteile auf; die Regeneration ist flexibel bezüglich des ALM-Durchsatzes, da sie auch für kurze Zeit abgeschaltet und schnell wieder in Betrieb genommen werden kann. Ausserdem sind die Rektifikationskolonnen meist im selben Betrieb, wo auch das ALM anfällt. Das erspart Transporte und administrativen Aufwand. Zudem ist es eine relativ „saubere“ Technologie, was Probleme mit Abluftrichtlinien (LRV [6]) vermeidet.

II.1.2. Verbrennung

Die ALM-Entsorgung wird zumindest in der Schweiz praktisch nur in speziellen Verbrennungsanlagen vollzogen, sofern das ALM nicht als Heizölersatz verfeuert werden kann. Folgende Entsorgungsanlagen können je nach Qualität eines ALM eingesetzt werden [1]:

- Kesselhaus und Dampfüberhitzer
- Zementwerke
- Klärschlammverbrennungsanlagen
- Sondermüllverbrennungsanlagen (Valorec)
- Sondermüllverbrennungsöfen
- Abfalllösungsmittelverwertungsanlagen (Valorec, EMS (Dottikon))

Wegen strenger gesetzlicher Grenzwerte [6] für den Schadstoffausstoss bei der Verbrennung von ALM sind je nach Anlage unterschiedliche Abluftreinigungsanlagen integriert. Diese sind ebenfalls ein wichtiger Faktor für die Preisbildung. Grundsätzlich gilt, dass die Verbrennung umso rentabler wird, je grösser die Kapazität der Anlage ist [1].

Die bei der Verbrennung von ALM freiwerdende Energie wird oftmals für die Erzeugung von Dampf verwendet [1]. Gegebenenfalls wird dieser noch mittels Entspannungsturbinen in Strom umgewandelt. Somit kann die Verbrennung von ALM einen wichtigen Beitrag zur Energieversorgung eines Werkes oder einer Fabrik leisten. So wird der Dampfbedarf im Werk Schweizerhalle (WSH) vollumfänglich durch die Dampfproduktion der ALV gedeckt.

II.2. Die Valorec Services AG

Die für das Fallbeispiel verwendeten Daten der Stoff- und Energieströme der Rektifikation und der ALM-Verbrennung wurden von der Firma *Valorec Services AG* zur Verfügung gestellt. Diese betreibt im Werk Schweizerhalle sowohl die ALV als auch die Rektifikationskolonne. Die folgenden Abschnitte geben einen Überblick über die *Valorec Services AG*.

II.2.1. Geschichtlicher Hintergrund und Firmenprofil

1998 wurde die ALM-Entsorgung aus der Novartis Services AG ausgegliedert. Zu diesem Zweck wurde ein Tochterunternehmen mit dem Namen Valorec AG gegründet. Die Valorec AG betrieb die zwei Abfalllösungsmittelverwertungsanlagen (ALV-1 und ALV-2) auf dem Gelände des Werkes Schweizerhalle (WSH) sowie die regionale Sondermüllverbrennungsanlage (RSMVA) in Basel. Auf den 1.1.2001 wurden das Recycling and Solvent-Center (RSC), welches im WSH für die Regeneration von Lösungsmitteln zuständig war, zusammen mit den Energie- und Entsorgungsdiensten (EVS) ebenfalls aus der Novartis Services AG ausgegliedert. Aus dem RSC, EVS und der Firma Valorec AG wurde zusammen mit dem französischen Konzern Vivendi Environnement eine Betreibergesellschaft unter dem Namen *Valorec Services AG* gegründet [7]. Es handelt sich hierbei um ein Joint-Venture zwischen Vivendi Environnement und der Novartis Pharma AG [23].

Im Werk Schweizerhalle (WSH) stehen gegenwärtig Produktionsbetriebe von Novartis, Ciba SC und Syngenta. Da die genannten Unternehmen in den Sparten Pharma, Spezialitätenchemie und Agrochemie tätig sind, fallen auch ALM von sehr unterschiedlicher Beschaffenheit an, das heisst von praktisch unverschmutzten Lösungsmitteln bis zu sehr giftigen Abfällen mit hohem Verschmutzungsgrad.

Nebst dem ALM aus dem Werk Schweizerhalle nimmt die Firma Valorec Services AG. auch Entsorgungsaufträge von grösseren Chargen von werksexternen Kunden an, wie z.B. von Novartis Pharma Basel oder Roche. Für die Erfüllung der Aufträge stehen der Valorec Services AG eine Vielzahl von Möglichkeiten offen, da sie sowohl über die zwei ALV und die RSMVA als auch über verschiedene Regenerationsverfahren verfügt. Da alle werksinternen Komponenten (Tanklager, Produktionsorte, ALV, Regeneration) mit Rohrleitungen untereinander verbunden sind, können zumindest die flüssigen ALM, welche den weitaus grössten (Massen-) Anteil des gesamten ALM darstellen, logistisch optimal entsorgt werden.

Im Jahr 2000 entsorgte die heutige Valorec Services AG zirka 81'000 t flüssiges ALM. Etwa 40'000 t, also zirka die Hälfte des gesamten ALM, stammen aus dem Werk Schweizerhalle. Tabelle II-1 zeigt die ALM-Behandlungsverfahren und die Mengen ALM, die im Jahr 2000 entsorgt wurden [7], [8]. Die mengenmässig wichtigste ALM-Behandlung ist die thermische Verwertung (Verbrennung). Allein in der ALV-2 wird knapp die Hälfte der gesamten Menge ALM entsorgt.

Tabelle II-1: Aufteilung der ALM-Behandlung der (jetzigen) Firma Valorec Services AG im Jahr 2000. In der ALV-2 wird knapp die Hälfte der gesamten Menge ALM entsorgt.

ALM-Behandlung	Menge [t]	Anteil [%]
Regeneration	16'898	20.8
ALV-1	13'494	16.6
ALV-2	40'620	49.9
RSMVA Basel	6'553	8.2
Stützbrennstoff für Dritte (ARA, Zementwerke)	3'634	4.5
Total	81'270	100

II.2.2. Die Regeneration im WSH

Im Jahr 2000 wurden 16'900 Tonnen ALM zur Regeneration angenommen (vgl. Tabelle II-1). 90 Prozent davon stammte aus dem Werk Schweizerhalle. Aus der eingegangenen Menge wurden 11'900 Tonnen Regenerate und Produkte hergestellt. Die restlichen 5'000 Tonnen wurden in der ALV verbrannt oder als Sondermüll in der RSMVA entsorgt.

Aus der Regeneration gingen im Jahr 2000 rund 7'000 Tonnen Lösungsmittel-Regenerate hervor. Diese wurden von den Kunden wieder zurückgenommen und wiederverwertet. Desweiteren entstanden 3'800 Tonnen Heizölersatzbrennstoffe, welche in den Überhitzern der ALV verbrannt wurden. Zusätzlich wurden noch 1'100 Tonnen Produkte hergestellt. Die Produkte aus der Regeneration entstehen durch einfache chemische Reaktionen auf den Rektifikationskolonnen. Lohnenswert sind beispielsweise Veresterungen [1].

Die ALM-Regeneration geschieht mittels Rektifikation, wobei sowohl Batchkolonnen (meist Mehrzweckanlagen) als auch kontinuierliche Anlagen zur Verfügung stehen. Da die Batchanlagen meist nicht an spezifische Kunden gebunden sind, werden sie oft zur Bearbeitung von kurzfristigen Aufträgen mit kleineren Chargen eingesetzt, was eine Auslastung von nahezu 100 Prozent zur Folge hat [1]. Die Rektifikationskolonnen beziehen die gesamte benötigte Prozessenergie in Form von Dampf aus der ALV.

II.2.3. ALM-Verbrennung (ALV)

Mit dem Bau der ALV-2 1992 stieg die Kapazität der werksinternen ALM-Verbrennung von ca. 15'000 Tonnen auf ca. 55'000 Tonnen pro Jahr. Rechnet man die Kapazität der RSMVA in Basel, die ebenfalls von der Valorec Services AG betrieben wird, auch mit ein, so steigt die Jahreskapazität auf zirka 65'000 Tonnen flüssiger Sonderabfall. Zusätzlich werden in der RSMVA noch 6'000 Tonnen fester bzw. pastöser Sonderabfall sowie 40 Tonnen gasförmiger Sonderabfall entsorgt.

Im Jahr 2000 generierten die beiden ALV bei einer Jahrestonnage von 54'000 t ALM 440'000 MWh Dampf (45 bar, 410-475°C) und 30'000 MWh Strom [8], wovon 72% von der ALV-2 produziert wurden. Mit dem Betrieb der beiden ALV werden nahezu 100% des werksinternen Dampfbedarfs und 30% des benötigten Stroms produziert.

II.3. Betrachtete Entsorgungsprozesse

II.3.1. Die Rektifikationskolonne 4

Die Rektifikationskolonne 4 wurde 1995 in Betrieb genommen. Es handelt sich um eine Schlitzbodenkolonne, die im Batchbetrieb und unter Normaldruck arbeitet [9]. Abbildung II-1 zeigt den schematischen Aufbau der Rektifikationskolonne 4. Die Mengenangaben beziehen sich auf die Rektifikation des Toluol-Methyloxcarbonsäure-Methanol-Wasser-Gemisches, welches als Fallbeispiel für das LCA in Kapitel III betrachtet wird.

Das Produkt (Toluol) wird aus den Vorlagen 1 bis 3 abgezogen. Die Rückstände aus der Blase, Kolonne und der Abzugsvorlage bilden mit dem Vorlauf aus der Vorlage 4 die Destillationsrückstände. Die gesamte Anlage wird nach abgeschlossener Rektifikation mit 500 kg Methanol gereinigt.

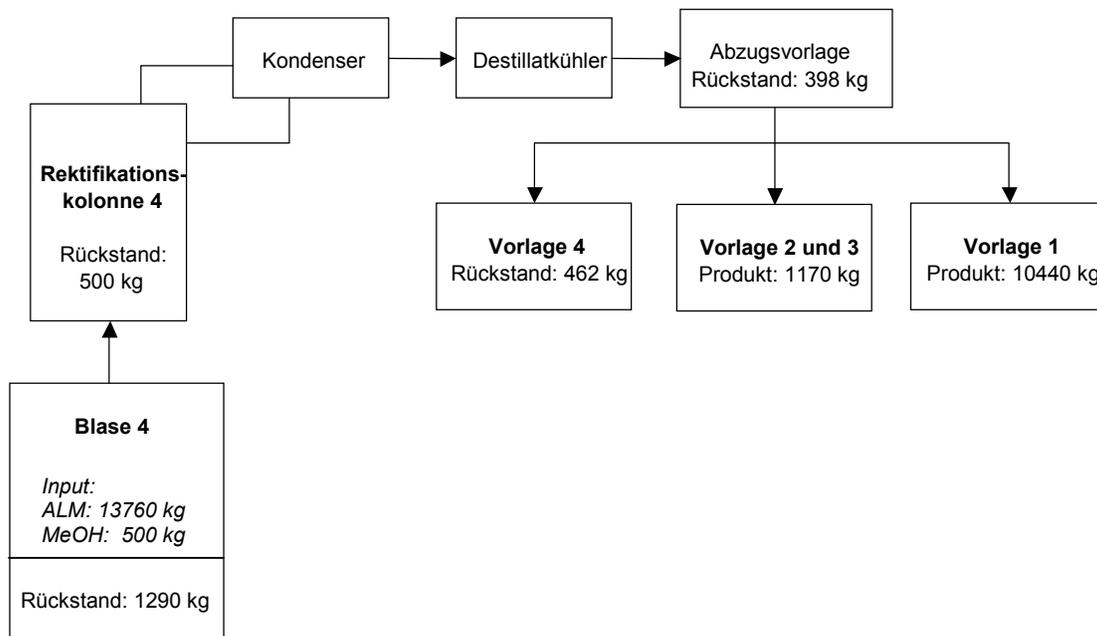


Abbildung II-1: Schema der Rektifikationskolonne 4. Die Mengenangaben beziehen sich auf das untersuchte Toluol-Gemisch. Die Inputmenge in die Blase wird kursiv dargestellt. Die weiteren Mengenangaben entsprechen der Verteilung bei abgeschlossener Rektifikation.

Die wichtigsten Betriebsdaten, aufgeteilt nach Vorlauf und Hauptlauf, sind in Tabelle II-2 zusammengefasst [9].

Tabelle II-2: Betriebsdaten der Rektifikationskolonne 4.

	Vorfraktion	Hauptfraktion
Normaldruckdestillation	Ja	Ja
Kolonnenkopftemperatur	ca. 60-110 °C	ca. 110 °C
Temperatur Blase		max. 130 °C
Rücklaufverhältnis	4:1	1:1
Dest. Kopfprodukt	bis 480 L/h	bis 1300 L/h

Die Rektifikation des untersuchten Toluol-Gemisches liefert eine Ausbeute (Verhältnis der Mengen Toluol im ALM zum aufbereiteten Toluol) von ca. 85%. Die Reinheit des Destillates liegt bei 99.5%. Die Kapazität der Anlage beträgt 24 Stunden pro Charge ALM (16'000 L bzw. 13761 kg).

II.3.2. Die ALV

Die Verbrennung von Abfalllösungsmittel geschieht heutzutage zumindest in der Schweiz in hochkomplexen Anlagen. Einerseits sind die gesetzlichen Umweltauflagen für Emissionsgrenzwerte sehr streng [6]. Dies bedingt aufwendige Reinigungsverfahren der Abgase, mit mehreren emissionspezifischen Stufen. Zum zweiten sind die Anlagen nicht lediglich auf die Entsorgung von Abfällen ausgerichtet, sondern sind optimiert für die Nutzung der bei der Verbrennung freiwerdenden Energie aus den Abfällen. Die Energie wird dabei in Form von Dampf und zum Teil als Strom nutzbar gemacht.

Die betrachtete Abfalllösungsmittelverwertungsanlage 2 (ALV-2) kann in vier Module unterschiedlicher Funktionen aufgeteilt werden [11]: die Verbrennungsanlage, die Entschlackungseinrichtung, die Rauchgasreinigung und die Abwasserreinigung. Abbildung II-2 gibt eine schematische Übersicht über den Aufbau und die Funktionsweise der ALV-2.

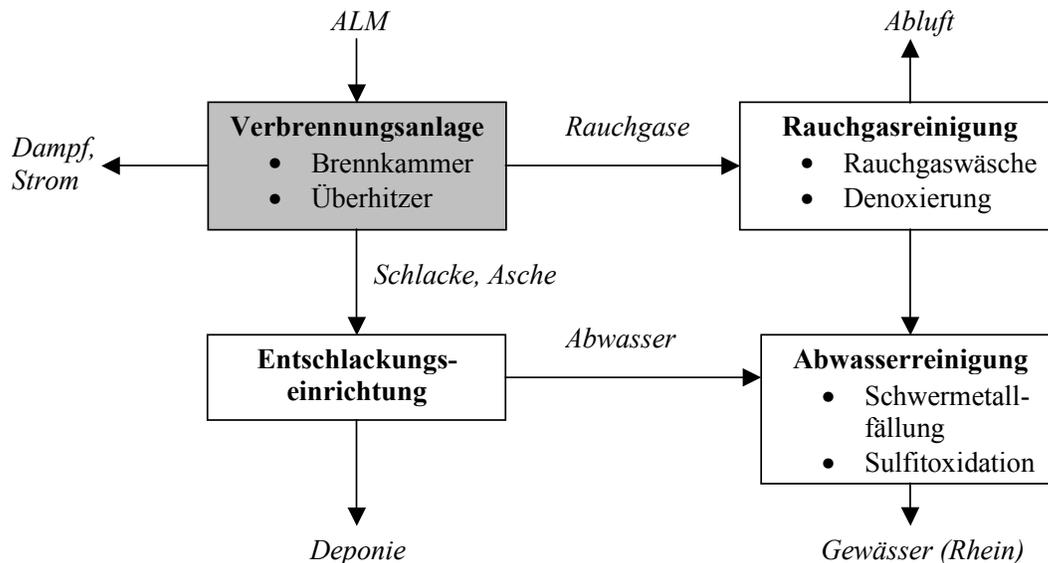


Abbildung II-2 Schematischer Aufbau der ALV-2. Diese kann in vier Funktionseinheiten unterteilt werden: Verbrennungsanlage, Entschlackungseinrichtung, Rauchgasreinigung und Abwasserreinigung.

Verbrennungsanlage

Der Kern der ALV-2 bildet die Verbrennungsanlage. Hier wird das flüssige ALM und die Abluft den Brennkammern zugeführt und bei rund 1200°C nahezu vollständig oxidiert. Mit dieser Wärme wird vorgewärmtes Speisewasser verdampft. Der ca. 300°C heisse Dampf wird dem Überhitzer zugeführt, um ihn auf die gewünschte Endtemperatur zu erhitzen. Der Überhitzer wird mit destilliertem ALM mit hohem Brennwert oder mit Heizöl betrieben. Der produzierte Hochdruckdampf hat eine Temperatur von 475°C und einen Druck von 45 bar. Der Hochdruckdampf wird in einer Entspannungsturbine ($\eta \approx$

0.89 [10]) in Niederdruckdampf mit 15 resp. 6 bar und 220°C entspannt und in das Werksnetz eingespiesen.

Entschlackungseinrichtung

Schlacke und Asche aus der Brennkammer und dem Überhitzer werden in einen Nassentschlacker ausgetragen, mit Wasser abgekühlt und dabei teilweise gelöst. Die verbleibenden Feststoffe werden zerkleinert und die löslichen Bestandteile werden ausgewaschen. Das beim Löseprozess entstehende Abwasser wird der internen Abwasserreinigungsanlage zugeführt. Die ungelösten Feststoffe werden in eingedickt und gepresst. Der Filterkuchen wird in Mulden gefüllt und nach einer Kontrollanalyse auf eine Reststoffdeponie verfrachtet [11].

Die Rauchgasreinigung

Die bei der Verbrennung entstehenden Rauchgase gelangen zunächst in die Rauchgaswäsche, ein sechsstufiges nasschemisches Waschverfahren. Dabei werden durch die Variation des pH und der Waschverfahren SO_x , Schwermetalle, Halogenwasserstoffe und Staub aus dem Rauchgas entfernt.

In der Denoxierung werden schliesslich noch die Stickoxide mittels Ammoniakwasser katalytisch zu Stickstoff reduziert. Dafür muss das abgekühlte Rauchgas auf 230°C aufgeheizt werden. Dies geschieht einerseits in einem Wärmetauscher mittels Dampfkondensation und durch die Feuerung eines Erdgasbrenners, der direkt in das Rauchgas feuert. Nach der Denoxierung wird das gereinigte Rauchgas über den Kamin abgelassen. Die bei der Rauchgasreinigung entstandenen Abwässer werden in die Abwasserreinigung eingeleitet.

Abwasserreinigung

In der Abwasserreinigung werden die Abwässer der Rauchgaswäsche und der Nassentschlackung gesammelt und entsprechend ihrer Inhaltsstoffe behandelt. Zunächst werden Schwermetalle, Phosphate und Fluoride gefällt und das Abwasser in einem Sandfilter nachgeklärt. In der Oxidationsanlage wird das im Abwasser vorhandene Sulfit, welches hauptsächlich als Natriumsulfit vorliegt, bei geregelterm pH-Wert zu Sulfat (Natriumsulfat) oxidiert. Das so gereinigte Abwasser wird nach einer Endkontrolle in den Rhein eingeleitet, sofern die Grenzwerte [12] nicht überschritten werden. Falls die nötige Wasserqualität durch die interne Abwasserreinigung nicht erreicht werden sollte, stehen Rückhaltetanks oder Leitungen in die ARA zur Verfügung.

III. Vergleichendes LCA der Verbrennung und Rektifikation

III.1. Einleitung

In diesem Kapitel wird ein ökologischer Vergleich der zwei alternativen Behandlungsoptionen von Abfalllösungsmitteln – Rektifikation und Verbrennung – exemplarisch für das Fallbeispiel (Toluol-Methanol-Methyloxcarbonsäure¹-Wasser-Gemisch) durchgeführt. Dieses wird im Werk Schweizerhalle (WHS) mittels Rektifikation aufbereitet (Anfangszusammensetzung des ALM Toluol-Methyloxcarbonsäure-Methanol-Wasser 98:1:0.5:0.5 (Mass.%), wiedergewonnenes Produkt 99.5:<0.1:0.4:<0.1) oder könnte auch in der ALV verbrannt werden. Die Anlagen gelten als repräsentativ für die ALM-Behandlung in der Schweiz [13].

Für die Quantifizierung und den Vergleich der ökologischen Belastung der ALM-Behandlung wird die Methode des LCA angewendet. Für das Erstellen des LCA der Verbrennung wurde ein Life Cycle Inventory (LCI) der Abfalllösungsmittelverwertungsanlage ALV-2 basierend auf Durchschnittszahlen für das Betriebsjahr 1998 verwendet [10]. Dem LCA der Rektifikation liegt das LCI des Fallbeispiels zugrunde. Die erfassten Stoff- und Energieströme stammen aus Jahresberichten [14], Betriebsvorschriften [9] der *Valorec Services AG* und wurden durch Kommentare und Ergänzungen verschiedener Valorec-Mitarbeiter ergänzt.

Für das LCA wurden im Folgenden mehrere Systemmodelle erarbeitet, da für einen Vergleich der Behandlungsoptionen verschiedene Varianten möglich und plausibel sind. Es wird diskutiert, ob der Nutzen, der aus der ALM-Behandlung hervorgeht (Energieproduktion, Wiedergewinnung von Lösungsmittel) den ALM-Behandlungsprozessen in Form ökologischer Gutschriften angerechnet werden kann und welchen Einfluss die Integration der Stoffströme aus der ALV in die Rektifikation in Bezug auf die Bewertung hat.

Die Erstellung eines Systemmodells und dessen Bewertung mit gängigen Bewertungsmethoden erfolgte mit Hilfe des LCA-Software-Paketes SimaPro [15]. Die Resultate wurden mit zwei verschiedenen Bewertungsmethoden ausgewertet: (a) Methode der ökologischen Knappheit (Quantifizierung mittels Umweltbelastungspunkten UBP 1997, [16]) und (b) mittels Eco-Indicator 99 (EI-99-Points, [17]). Damit sollen unterschiedlichen Werthaltungen, wie sie in Bewertungsmethoden existieren, Rechnung getragen werden.

¹ 3-(4-Hydroxyphenyl) Propionsäure, CAS-Nr. 501-97-3

III.2. Ziel- und Rahmendefinition

III.2.1. Festlegung der funktionellen Einheit

Damit verschiedene Behandlungsmöglichkeiten von Abfalllösungsmittel miteinander verglichen werden können, müssen sie die gleiche funktionelle Einheit besitzen. Da die Behandlungsmöglichkeiten - Verbrennung und Rektifikation - grundsätzlich verschieden sind, erscheint es sinnvoll, die funktionelle Einheit in einem vorgelagerten Prozess zu definieren, nämlich dort wo das Abfalllösungsmittel entsteht. Deshalb wurde die funktionelle Einheit der Behandlungsszenarien definiert als die Dienstleistung von 13760 kg Lösungsmittel in der chemischen Produktion. Diese Menge wurde gewählt, da die Rektifikation des Fallbeispiels im WSH mit Chargen von 13760 kg ALM gemacht wird. Mit dieser Definition der funktionellen Einheit unterscheiden sich die im Folgenden durchgeführten Ökobilanzen durch die nachgelagerten ALM-Behandlungsoptionen.

III.2.2. Diskussion der Systemgrenzen

Geografische Abgrenzung

Geografisch betrachtet, beinhalten die Systemgrenzen das Werk Schweizerhalle (Dienstleistung des Lösungsmittels und ALM-Behandlung), die Herstellungsprozesse der für die Dienstleistung benötigten Lösungsmittel in der Petrochemie (Toluol, Methanol) und die Herstellung der für die ALM-Behandlung notwendigen Chemikalien und Energien (Betriebschemikalien der ALV und Rektifikationskolonne sowie die Bereitstellung von Strom und Dampf aus der Schweiz).

Zeitliche und technologische Abgrenzung

Die Inventare der werksinternen Prozesse wurden mit Hilfe von Daten von 1998 bis 2001 konstruiert. Die ALV-2 wurde 1992 [11] und die betrachtete Rektifikationskolonne 1995 [9] in Betrieb genommen. Für die Bereitstellung der Lösungsmittel und der Hilfsprozesse wurde ein Technologiestandard zwischen 1990 und 2000 angenommen.

III.3. Sachbilanz

III.3.1. Szenarien der ALM-Behandlung

Szenario A: Verbrennung des ALM-Gemisches in der ALV

Im Szenario A wird das, durch die Dienstleistung des Lösungsmittels anfallende, ALM vollumfänglich in der ALV verbrannt. Die daraus erzeugte Energie in Form von Elektrizität (13 kV) und Niederdruckdampf (6 bar, 220°C) wird werksintern für den Betrieb von Prozessen verwendet. Das Szenario A wird in Abbildung III-1 schematisch dargestellt.

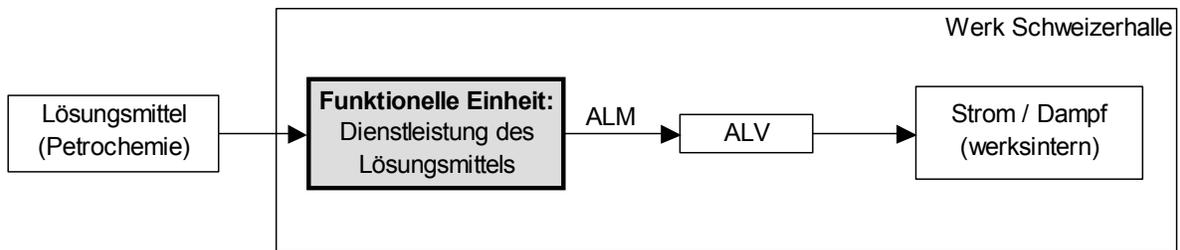


Abbildung III-1: Schematische Darstellung ALM-Behandlungsszenarios A: Das ALM wird in der ALV verbrannt. Dadurch wird Niederdruckdampf (6 bar, 220°C) und Strom (13 kV) für den werksinternen Gebrauch produziert.

Szenario B1: Rektifikation des ALM-Gemisches mit Integration der Stoffflüsse mit der ALV

Im Szenario B1 wird das, durch die Dienstleistung des Lösungsmittels anfallende, ALM rektifiziert. Dadurch wird ein Teil des im ALM enthaltenen Lösungsmittels wiedergewonnen, welches wieder in die Prozesskette eingeführt oder für weitere Prozesse verwendet werden kann. Die Destillationsrückstände und das zur Reinigung der Rektifikationskolonne verwendete Methanol werden in der ALV verbrannt. Strom und Niederdruckdampf für den Betrieb der Rektifikation werden vollumfänglich aus der ALV bezogen. Das Szenario B1 wird in Abbildung III-2 schematisch dargestellt.

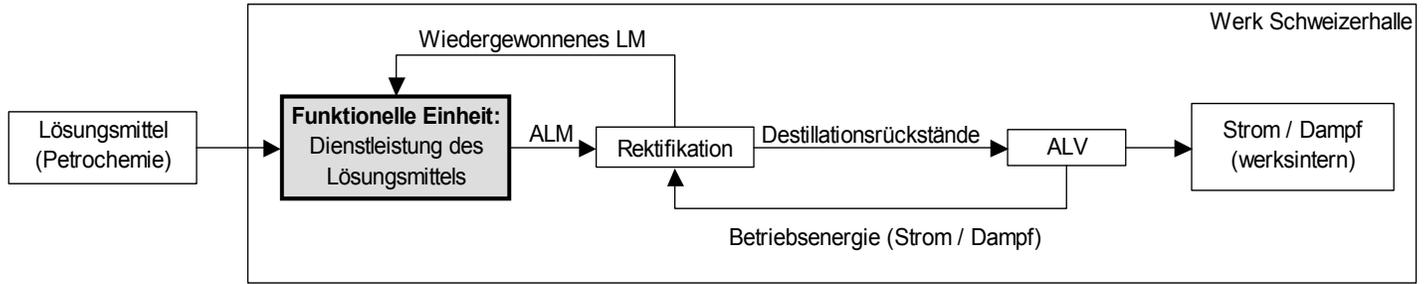


Abbildung III-2: Schematische Darstellung des ALM-Behandlungsszenarios B1: Das ALM wird rektifiziert. Die Rückstände aus der Rektifikation des ALM-Gemisches werden in der ALV verbrannt. Dadurch wird Niederdruckdampf (6 bar, 220°C) und Strom (13 kV) für den werksinternen Gebrauch produziert. Die Energie (Niederdruckdampf und Strom) zur Rektifikation wird aus der ALV bezogen.

Szenario B2: Rektifikation des ALM-Gemisches unter Einsatz von Fremdenergie

Im Szenario B2 wird das durch die Dienstleistung des Lösungsmittels anfallende ALM rektifiziert. Dadurch wird ein Teil des im ALM enthaltenen Lösungsmittels wiedergewonnen, welches wieder in die Prozesskette eingeführt oder für weitere Prozesse verwendet werden kann. Die Destillationsrückstände und das zur Reinigung der Rektifikationskolonne verwendete Methanol werden in der ALV verbrannt.

Als Unterschied zum Szenario B1 stammt die Betriebsenergie der Rektifikation aus einer konventionellen Energieproduktion. So wird für den Strom ein Schweizer Strommix mit durchschnittlichem Technologiestandard und für den Dampf eine durchschnittliche Europäische Dampfproduktion mit durchschnittlichem Technologiestandard angenommen [2]. Für eine Schweizer Dampfproduktion stand kein Inventar zur Verfügung. Das Szenario B2 wird in Abbildung III-3 schematisch dargestellt.

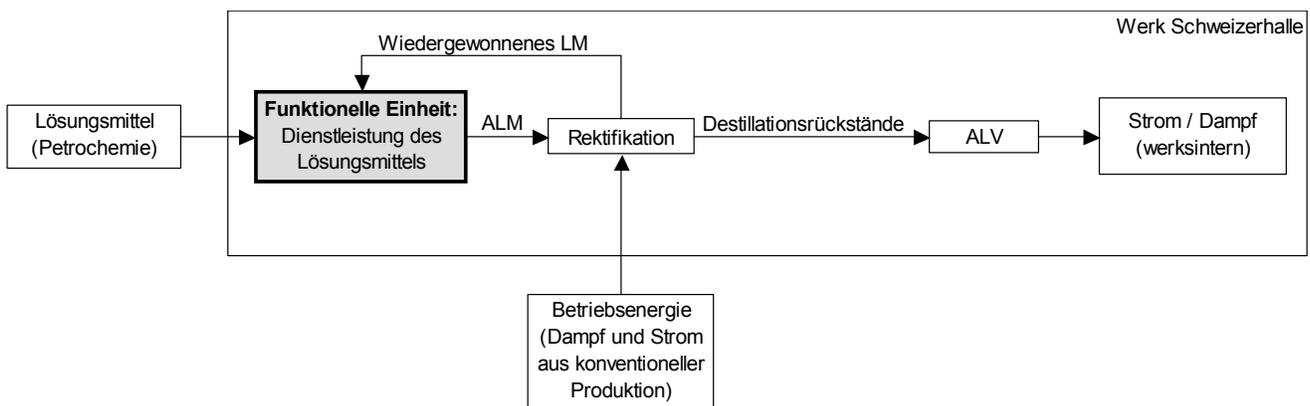


Abbildung III-3: Schematische Darstellung ALM-Behandlungsszenarios B2: Das ALM wird rektifiziert. Die Rückstände aus der Rektifikation des ALM-Gemisches werden in der ALV verbrannt. Dadurch wird Niederdruckdampf (6 bar, 220°C) und Strom (13 kV) für den werksinternen Gebrauch produziert. Die Energie (Niederdruckdampf und Strom) zur Rektifikation wird aus konventioneller, werksexterner Energieproduktion bezogen.

III.3.2. Ökologische Gutschriften in den verschiedenen Szenarien

Die Entsorgung des Abfalllösungsmittels gehört zum Lebenszyklus des ursprünglich in der Produktion verwendeten Lösungsmittels dazu. Deshalb muss auch die dadurch entstehende Umweltbelastung der funktionellen Einheit angerechnet werden. Für alle Szenarien der ALM-Behandlung gibt es aber unterschiedliche Varianten, wie ökologische Gutschriften durch Einsparungen und Recycling in die Bewertung miteinbezogen werden können. Diese Varianten werden lösgelöst von realen Begebenheiten diskutiert, damit deren Einfluss auf die Bewertung deutlich gemacht werden kann.

Variante 1: Produkte aus Prozessen der ALM-Behandlung erhalten ökologischen Gutschriften.

Durch die Vergabe ökologischer Gutschriften für die Produkte aus den Prozessen der ALM-Behandlung wird der Vermeidung von alternativen Prozessen zu deren Herstellung Rechnung getragen. Die Gutschriften beinhalten die Emissionen und Ressourcenverbräuche der vermiedenen Prozesse, die von der Umweltbelastung der funktionellen Einheit abgezogen werden. Die Konsequenz dieser Variante wiegt bei Entsorgungsprozessen sehr schwer, weil die "Herstellung" von ALM keine ökologische Belastung mit sich bringt, da diese vollumfänglich der funktionellen Einheit zugeschrieben wird. Im betrachteten Fallbeispiel ersetzt also das ökologisch unbelastende ALM hochwertige und deshalb ökologisch belastende Raffinerieprodukte. In Bezug auf das Fallbeispiel wird diese Variante folgendermassen interpretiert:

1. Die Energie, welche die Verbrennung von ALM in der ALV produziert, wird benötigt. Sie erhält ökologische Gutschriften, weil dadurch die Produktion dieser Energie in einem werksinternen, ölbefeuerten Kesselhaus vermieden werden kann. Somit ersetzt das ALM die Bereitstellung und Verbrennung von extraleichtem Heizöl (Heizöl EL).
2. Das wiedergewonnene Lösungsmittel aus der Rektifikation erhält eine ökologische Gutschrift, da dieses wieder für die funktionelle Einheit verwendet werden kann und somit Lösungsmittel aus der Petrochemie ersetzt. Daher wird die Produktion dieser Menge an neuem Lösungsmittel aus der Petrochemie vermieden.

Variante 2: Produkte aus Prozessen der ALM-Behandlung erhalten keine ökologischen Gutschriften.

Entstehen im Zuge des Entsorgungsprozesses Materialien oder Energie, so verringern diese die ökologische Belastung der ALM-Behandlung nicht, weil diese Produkte nicht verwendet werden können oder die Systemgrenzen der Untersuchung verlassen. Für das Fallbeispiel bedeutet dies:

1. Der in der ALV produzierte Dampf wird nicht gebraucht. Diese Variante wird diskutiert, da es während der Sommermonate vorkommen kann, dass die Dampfproduktion der ALV grösser als der Energiebedarf im WSH ist, weil die Raumheizungen nicht betrieben werden müssen [18]. Der überschüssige Dampf wird ungenutzt über Dach abgelassen.
2. Das durch die Rektifikation wiedergewonnene Lösungsmittel erhält keine ökologische Vergütung, da es theoretisch denkbar ist, dass es nicht mehr in die Prozesskette des LCA eingesetzt, sondern für andere Prozesse verwendet wird. Dies kann aus logistischen Gründen geschehen oder wenn die Qualität des regenerierten Lösungsmittels ungenügend ist. Wird das regenerierte Lösungsmittel an Dritte verkauft, erzielt es eine monetäre Vergütung, die aber nicht im LCA in Form von Belastungspunkten abgerechnet wird.

Grundsätzlich können beide Varianten (1 und 2) der Gutschriftenvergabe vertreten werden. Deshalb wurden für die Szenarien je Inventare für beide Varianten zusammengestellt und bewertet. Aufgrund der Verhältnisse im WSH scheinen aber ökologische Gutschriften für produzierte oder vermiedene Güter in diesem Fall sinnvoller zu sein. Denn das durch die Rektifikation wiedergewonnene Lösungsmittel wird wieder für die Herstellung der funktionellen Einheit verwendet. Es handelt sich um einen wirklichen "close loop" Recyclingprozess [15]. Ausserdem wird die Energie, welche durch die Verbrennung erzeugt wird, zur Strom- und Dampfproduktion verwendet. Mit diesem Strom und Dampf werden die Rektifikation (Szenario B1) oder andere, ausschliesslich werksinterne Prozesse betrieben. Somit werden diese Energien innerhalb der Systemgrenzen verwendet, was deren Bereitstellung durch andere Prozesse vermeidet und deshalb für das System Einsparungen erbringt.

Der Vergleich von Variante 1 und 2 soll zeigen, wie gross die Gutschriften sind bzw. wie wichtig sie im LCA der ALM-Behandlung sind. Die Variante 2 ist systemanalytisch wichtig, da sie hilft, die Bewertung von Variante 1 in Belastungspunkten zu verstehen.

III.3.3. Überblick über Szenarien und Varianten

Tabelle III-1 Zusammenstellung der verschiedenen Szenarien und der dabei möglichen Varianten der Gutschriften für die ökologische Bewertung der ALM-Verbrennung und -Rektifikation.

Beschreibung des Szenarios	Ökologische Gutschriften
<p>A-1 <i>Verbrennung des ALM-Gemisches in ALV</i> Umfasst alle Betriebsmittel- und Energieströme für die Verbrennung von ALM gemäss Jahresdurchschnittswerte 1998</p>	<p>A-11 <i>Variante mit Gutschriften:</i> Energiegutschrift für die in der ALV produzierten Dampf- (Niederdruck) und Strommenge durch Gutschrift für äquivalente Energieproduktion im ölbefeuerten Kesselhaus.</p> <p>A-12 <i>Die Variante ohne Energiegutschrift</i> dient der Quantifizierung der ALM-Entsorgungsdienstleistung. Die in der ALV produzierte Energie wird dabei nicht berücksichtigt.</p>
<p>B-1 <i>Rektifikation des ALM-Gemisches - Integration der Stoffflüsse mit ALV</i> Umfasst alle Betriebsmittel- und Energieströme für die Rektifikation des Toluol-Methanol-Wasser-Gemisches gemäss Betriebsvorschrift Valorec Services AG. Strom und Dampf werden aus der ALV bezogen (ALV-LCI für Energieproduktion), Vorlauf und Rückstände aus Rektifikation gelangen als Brennstoff in die ALV.</p>	<p>B-11 <i>Variante mit Gutschriften:</i> Wiedergewonnenes Toluol wird als Toluol aus petrochemischer Produktion gutgeschrieben. Im vorliegenden Modell gelangen 13485 kg Toluol ab Petrochemie ins System, wobei 11552 kg nach der Aufarbeitung der Rektifikation gutgeschrieben werden. <i>Energiegutschrift:</i> Verwertung der Rückstände aus Rektifikation führt zu Dampf- und Stromproduktion gemäss ALV-Inventar. (Energiebedarf der Rektifikation durch Storm/Dampf aus ALV gedeckt.) Gutschrift erfolgt wie unter A-11.</p> <p>B-12 <i>Variante ohne Gutschriften</i> für Toluol und Energiegewinnung aus Rektifikationsrückständen.</p>
<p>B-2 <i>Rektifikation des ALM-Gemisches - Einsatz von Fremdenergie</i> Umfasst alle Betriebsmittel- und Energieströme für die Rektifikation des Toluol-Methanol-Wasser-Gemisches gemäss Betriebsvorschrift Valorec Services AG. Strom und Dampf werden von externen Storm- und Dampflieferanten bezogen (<i>andere LCI für Energiegewinnung</i>, CH-Strommix, [2]), Vorlauf und Rückstände aus Rektifikation werden verbrannt (Verbrennung mittels ALV-LCI quantifiziert).</p>	<p>B-21 <i>Variante mit Gutschriften:</i> Wiedergewonnenes Toluol wird als Toluol aus petrochemischer Produktion gutgeschrieben (vgl. B-11). <i>Energiegutschrift:</i> Verwertung der Rückstände aus Rektifikation führt zu Dampf und Stromproduktion gemäss ALV-Inventar. Gutschrift erfolgt wie unter A-11.</p> <p>B-22 <i>Variante ohne Gutschriften</i> für Toluol und Energiegewinnung aus Rektifikationsrückständen.</p>

III.3.4. Anlagen der ALM-Behandlung

Abfalllösungsmittelverwertungsanlage

Für das Erstellen des LCA der Verbrennung wurde ein LCI der Abfalllösungsmittelverwertungsanlage ALV-2 basierend auf Durchschnittszahlen für das Betriebsjahr 1998 verwendet [10]. Tabelle III-2 zeigt das verwendete Inventar der ALV-2. Im Systemmodell wird dieses LCI sowohl für die Verbrennung des ALM bzw. des Destillationsrückstandes in der ALV-2 als auch für Verbrennung in der ALV-1 verwendet, da kein separates Inventar für die ALV-1 existiert.

Tabelle III-2 Abbildung des Vordergrundinventares der ALV-2, welches für das LCA der ALM-Behandlungsoptionen verwendet wurde. Das Inventar basiert auf Daten des Betriebsjahres 1998.

Input	Einheit	Menge	Emissionen Luft	Einheit	Menge
ALM	t	33350	Rauchgas	Nm ³	280*10 ⁶
Heizöl EL	t	1800	CO ₂	t	66000
Regenerat (vordestilliertes ALM, Brennwert ≈ 27 MJ/kg)	t	2960	NO _x	t	14
Erdgas	Nm ³	47000	SO ₂	t	1
Strom (CH)	MWh	7100	Staub	t	1.1
Strom (ALV-2)	MWh	3600	NH ₃	t	0.8
Trinkwasser	t	325000	CO	t	0.3
Fabrikwasser	m ³	290000	HCl	t	0.4
Abgas	Nm ³	1.25*10 ⁶	HBr	t	0.05
NaOH (30%)	t	5680	HI	t	0.002
HCl (32%)	t	290	Ni	t	8.5*10 ⁻⁵
Schwefelsuspension	t	4	Cu	t	1.2*10 ⁻⁴
NaCl	t	5	Co	t	8.8*10 ⁻⁵
Trinatriumphosphat	t	0.07	Zn	t	2.2*10 ⁻³
H ₂ O ₂ (35%)	t	3	Fe	t	2.0*10 ⁻³
NH ₄ OH (25%)	t	240	Emissionen Wasser	Einheit	Menge
NH ₄ OH _{rec} (80%)	t	300	Abwasser	m ³	107000
CaCl ₂ (77%)	t	170	SO ₄ ²⁻	t	840
Polyelektrolyt	t	0.7	Cl ⁻	t	1100
Trimercaptotriazin (TMT)	t	7	Br ⁻	t	110
FeCl ₃	t	2	I ⁻	t	3.8
			F ⁻	t	1.5
			Ni	t	0.04
Produkte	Einheit	Menge	Cu	t	0.02
Niederdruckdampf (ALV)	MWh	246000	Co	t	0.13
Strom (ALV)	MWh	18700	Zn	t	0.05
			Fe	t	2.5
Vermiedene Produkte	Einheit	Menge	Emissionen Boden	Einheit	Menge
Niederdruckdampf (Kesselhaus)	MWh	246000	Schlacke	t	3
Strom (Kesselhaus)	MWh	18700	Schwermetallschlamm	t	495

Im Systemmodell werden das ALM-Gemisch des Fallbeispiels und die Destillationsrückstände der Rektifikation näherungsweise als durchschnittliches ALM angenommen, damit dessen Verbrennung mit dem LCI der ALV-2 modelliert werden kann. Dass diese

Annahme nicht der Realität entspricht, ist offensichtlich. Das ALM des Fallbeispiels hat einen höheren Brennwert (40 MJ/kg, vgl. Anhang B) als das durchschnittliche ALM (21 MJ/kg, [10]), da es sich ausschliesslich aus organischen Lösungsmitteln zusammensetzt. Der Einfluss der ALM-Zusammensetzung auf die Bewertung wird in Kapitel IV diskutiert.

Die in der ALV gewonnene Energie kann je nach Bewertung ökologische Gutschriften erhalten (vgl. Tabelle III-1). Die Gutschrift beinhaltet die Vermeidung derselben Energieproduktion in einem werksinternen, ölbefeuerten Kesselhaus, das bei Bedarf die Energieproduktion des WSH zu decken vermag (vgl. Kapitel III 3.2 Varianten der ökologischen Gutschriften). Damit die Gutschriften in Belastungspunkten beziffert werden können, wird ein Ökoinventar des Kesselhauses benötigt. Weil ein entsprechendes Inventar nicht existiert, wurde dafür folgende Abschätzung gemacht: Unter der Annahme, dass die Verbrennung im Kesselhaus die selben direkten Prozessemissionen wie die ALV-2 verursacht, wurde das Inventar der ALV-2 als Basis für ein Inventar des Kesselhauses benutzt, mit dem Unterschied, dass anstelle des ALM Heizöl EL verfeuert wird und die Emissionen und Ressourcenverbräuche an den Brennwert des Heizöls gekoppelt sind.

Rektifikation

Die Stoff- und Energieströme des Inventares der Rektifikationskolonne 4 stammen aus der Betriebsvorschrift der Rektifikation des Fallbeispiels [9]. Tabelle III-3 zeigt das verwendete Inventar des Rektifikationsprozesses. Die der Rektifikation nachgelagerte Verbrennung der Destillationsrückstände ist darin nicht aufgeführt (vgl. LCI des Szenarios „Rektifikation des ALM“ (Tabelle III-1) in Kapitel III.3.5).

Tabelle III-2 Abbildung des Inventares der Rektifikationskolonne 4, welches für das LCA der ALM-Behandlungsoptionen verwendet wurde. Das Inventar basiert auf Daten aus der Betriebsvorschrift des Fallbeispiels [9].

Input	Einheit	Menge	Output	Einheit	Menge
ALM (Toluol-Gemisch)	kg	13760	Toluol (Reinheit 99.5%)	kg	11610
N ₂	kg	452	Destillationsrückstand	kg	2650
Methanol	kg	500	DOC	kg	11.6
Dampf aus ALV	t	15	VOC	kg	1
Strom aus ALV	kWh	200	AOX	kg	0.83
Wasser (Prozess)	t	400			

Für das Szenario der Rektifikation unter Einsatz von Fremdenergie (B-2, vgl. Tabelle III-1) wurden für Dampf und Strom konventionelle, werksexterne Datensätze verwendet. Für den Strom wird ein Schweizer Strommix mit durchschnittlichem Technologiestandard [2] und für den Dampf eine durchschnittliche Europäische Dampfproduktion mit durchschnittlichem Technologiestandard angenommen [2]. Ein Datensatz zur durchschnittlichen Schweizer Dampfproduktion ist in der verwendeten Datenbank [15] nicht vorhanden.

III.3.5. LCI der Szenarien

Für alle Szenarien und Varianten wurde mit Hilfe der Software SimaPro [15] ein LCI erstellt. Es wurde festgelegt, dass durch die funktionelle Einheit 13760 kg ALM anfallen, da dies einer Charge ALM des Fallbeispiels in der Rektifikationskolonne 4 entspricht. Diese Festlegung beeinflusst die Interpretation der Bewertung der Szenarien nicht, da nur relative Vergleiche gemacht werden. Die Abbildungen III-4 und III-5 zeigen die Inventare der Szenarien “Verbrennung des ALM-Gemisches in der ALV” (A-11, vgl. Tabelle III-1) und “Rektifikation des ALM-Gemisches mit Integration der Stoffflüsse mit der ALV” (B-11, vgl. Tabelle III-1).

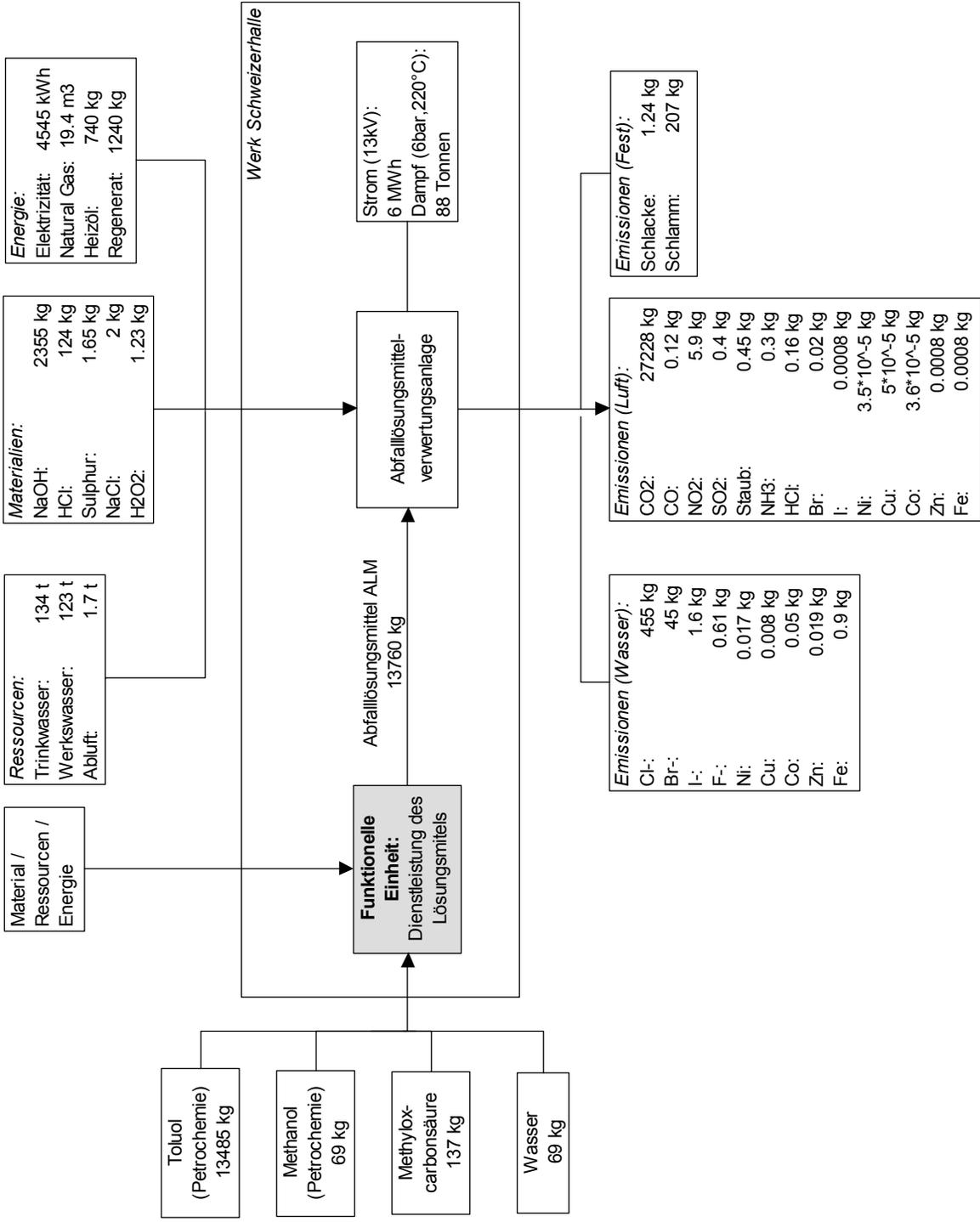


Abbildung III-4 LCI des Szenarios "Verbrennung des ALM-Gemisches in der ALV" (Szenario A-11, vgl. Tabelle III-1). Die Inputströme der funktionellen Einheit sind nur der Vollständigkeit halber aufgeführt.

III.3.6. Modellierung in SimaPro

Für die Bewertung der LCI der Szenarien wurden diese mit der Software SimaPro [15] modelliert. Damit der Aufbau des Systemmodells in SimaPro nachvollzogen werden kann, werden in den Abbildungen III-6 und III-7 die Struktur der Prozessbäume der Szenarien “Verbrennung des ALM in der ALV” und “Rektifikation des ALM” (Szenarien A11 und B11, vgl. Tabelle III-1) visualisiert. Für die Erstellung der Inventare mit SimaPro wurden drei verschiedene Prozesstypen verwendet [15]:

1. Produktionsprozesse (*Process*): Der Prozess “process” wird verwendet, um ein Produkt (Materialien, Energie oder Dienstleistungen wie z.B. Transport) herzustellen. Dazu können Inputströme und Prozessemissionen definiert werden. Wird dabei Abfall produziert, so kann dieser mit einem Entsorgungsprozess (Waste treatment process, siehe unter 2.) verknüpft werden.
2. Entsorgungsprozesse (*Waste treatment process*): Mit diesem Prozesstyp 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 (*process*) 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.
3. Vermiedene Prozesse (*Avoided products*): Diese “vermiedenen Prozesse” können sowohl in Produktions- als auch in Entsorgungsprozessen definiert werden. Damit werden Produktionsprozesse definiert, die durch die Produktion bzw. Entsorgung eines Gutes vermieden oder eingespart werden. Die Belastung, welche die vermiedenen Prozesse verursachen werden als Gutschriften dem Prozess angerechnet, mit dem sie vermieden werden.

Die Prozessbäume sind hierarchisch gegliedert. Zuerst liegt die funktionelle Einheit, auf die alle hierarchisch tiefer gelegenen Prozesse normiert werden. In den Abbildungen III-6 und III-7 wird jeder Prozess als Box dargestellt. Die Begriffe in Klammer sind die Bezeichnungen der Prozesstypen, wie sie SimaPro verwendet. Pfeile zu einer hierarchisch höhergelegenen Stufe bedeuten, dass die Prozesse ökologisch belastend sind, während Pfeile nach einer tieferen Stufe gerichtet eine ökologische Gutschrift symbolisieren.

Szenario A-11: Verbrennung mit ökologischen Gutschriften

Abbildung III-6 zeigt den Prozessbaum des Szenarios “Verbrennung des ALM-Gemisches in der ALV” (Szenario A-11, vgl. Tabelle III-1). Die funktionelle Einheit liegt auf der hierarchisch höchsten Stufe. Einerseits wird für diesen Prozess eine Reihe vorgelagerter Prozesse (*processes*) benötigt (LM Herstellung in der Petrochemie), was zu einer Belastung führt (Pfeilrichtung nach oben) und andererseits wird dadurch auch

Abfall (ALM) generiert. Die ALM-Verbrennung wird mit einem Entsorgungsprozess (*waste treatment process*) modelliert. Die ALM-Verbrennung erhält durch die freiwerdende Energie (Dampf und Strom), welche die Herstellung derselben Energiemenge in einem ölbefeuerten Kesselhaus (*avoided products*) vermeidet, mehr ökologische Gutschriften, als die der Verbrennung vorgelagerten Prozesse belasten (Pfeilrichtungen).

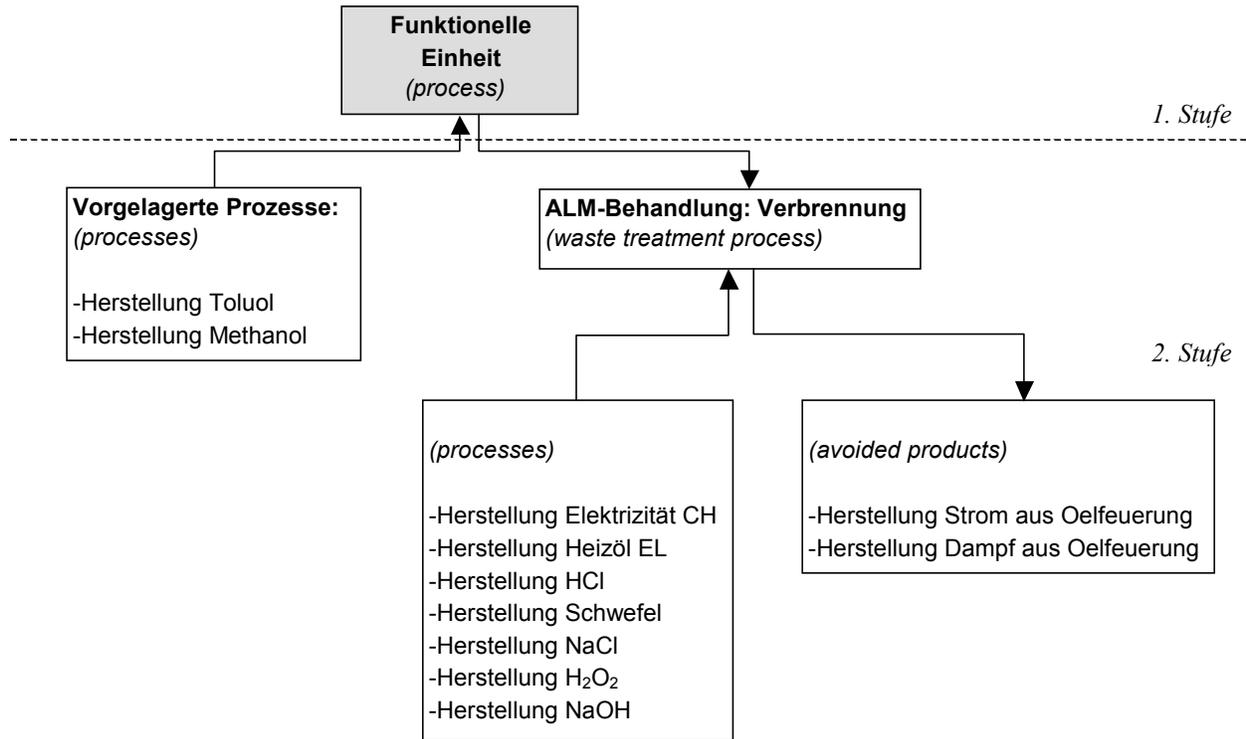


Abbildung III-6 Schematische Darstellung des Prozessbaumes des Szenarios “Verbrennung des ALM-Gemisches in der ALV” (Szenario A-11, vgl. Tabelle III-1). Der Prozessbaum ist hierarchisch gegliedert; die funktionelle Einheit ist zuoberst. Alle tiefergelegenen Prozesse sind darauf normiert. Die Begriffe in Klammern sind die Prozesstypen, wie sie SimaPro verwendet. Pfeile in Richtung einer höhergelegenen Hierarchiestufe bedeuten eine ökologische Belastung, Pfeile in Richtung einer tiefergelegenen Hierarchiestufe bedeuten, dass die ökologischen Gutschriften grösser als die Belastungen sind.

Szenario B-11: Rektifikation mit ökologischen Gutschriften

Der Prozessbaum des Szenarios “Rektifikation des ALM Gemisches mit Integration der Stoffflüsse mit der ALV” (Szenario B-11, vgl. Tabelle III-1) ist gleich strukturiert wie der Prozessbaum des Szenarios der ALM-Verbrennung. Der Prozess der ALM-Behandlung (*waste treatment process*) beinhaltet die Rektifikation des ALM und die Verbrennung der Destillationsrückstände. Der Grund dafür ist, dass aus “*waste treatment processes*“ definitionsgemäss keine Produkte hervorgehen können (vgl. Punkt 2 der Beschreibung der Prozesstypen). Die Destillationsrückstände müssten aber als Produkte definiert werden, würden sie in einem der Verbrennung nachfolgenden Entsorgungs-

prozess (*waste treatment process*) verbrannt werden. Deshalb werden in den der ALM-Behandlung vorgelagerten Prozessen diejenigen der Rektifikation des ALM und der Verbrennung der Destillationsrückstände zusammen aufgelistet. Ebenso werden die Gutschriften für die Toluolgewinnung und die Energie zusammen verbucht (*avoided products*).

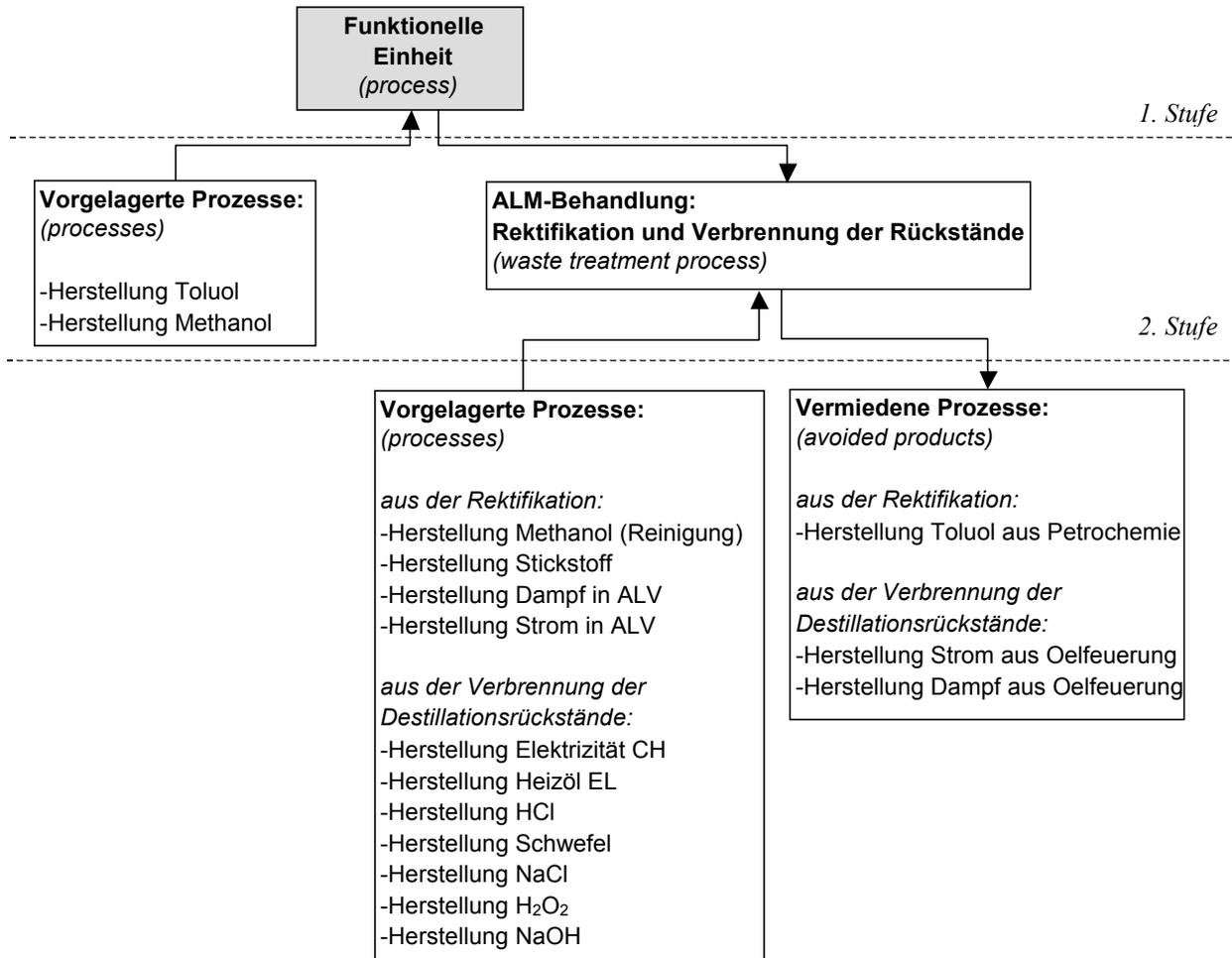


Abbildung III-7 Schematische Darstellung des Prozessbaumes des Szenarios “Rektifikation des ALM-Gemisches mit Integration der Stoffflüsse mit der ALV” (Szenario B-11, vgl. Tabelle III-1). Der Prozessbaum ist hierarchisch gegliedert; die funktionelle Einheit ist zuoberst. Alle tiefergelegenen Prozesse sind darauf normiert. Die Begriffe in Klammern sind die Prozessstypen, wie sie SimaPro verwendet. Pfeile in Richtung einer höhergelegenen Hierarchiestufe bedeuten eine ökologische Belastung, Pfeile in Richtung einer tiefergelegenen Hierarchiestufe bedeuten, dass die ökologischen Gutschriften grösser als die Belastungen sind. Die vorgelagerten und die vermiedenen Prozessen der ALM-Behandlung setzen sich aus Beiträgen der Rektifikation und der Verbrennung der Destillationsrückständen zusammen, weil nicht zwei nacheinanderfolgende Entsorgungsprozesse definiert werden können (Rektifikation und Verbrennung der Destillationsrückstände), vgl. Punkt 2 der Beschreibung der Prozessstypen.

III.4. Wirkungsabschätzung

III.4.1. Wahl der Bewertungsmethode

Methode der ökologischen Knappheit

Die *Methode der ökologischen Knappheit* bewertet Umweltbelastungen (Emissionen, Ressourcenverbrauch) mit Umweltbelastungspunkten UBP 1997. Die ökologische Belastung wird getrennt nach Umweltkompartiment (Wasser, Luft, Abfall, Energie). “Die Methode strebt an, die verschiedenen Umwelteinwirkungen so in Punkte umzurechnen, dass die entstehenden Punktwerte vergleichbar sind und damit zusammengezählt und untereinander verglichen werden können“ [16]. Die Umwelteinwirkungen werden anhand ihrer ökologischen Knappheit gewichtet. Dazu verwendet die Methode einerseits die gesamten gegenwärtigen Flüsse einer Umwelteinwirkung (F_{aktuell}) und andererseits die im Rahmen der umweltpolitischen Ziele als maximal zulässig erachteten Flüsse derselben Umwelteinwirkung (F_{kritisch}). Je grösser die Differenz zwischen dem aktuellen Wert einer Umwelteinwirkung und deren Zielwert ist, desto gravierender ist der Effekt (distance-to-target-Prinzip). Die Bewertung geschieht mittels sogenannter Ökofaktoren, die ein Mass für die potentielle ökologische Schädlichkeit einer Einwirkung ist. Dieser lässt sich wie folgt definieren [16]:

$$\text{Oekofaktor (i)} = \frac{1 \text{ UBP}}{F_{\text{kritisch}}} \cdot \frac{F_{\text{aktuell}}}{F_{\text{kritisch}}} \cdot c$$

mit $c = 10^{12} / a$

Die Methode ist flexibel, da für jeden Schadstoff ein Ökofaktor bestimmt werden kann, falls die Gesetze dafür existieren. Die Subjektivität der Gewichtung liegt in der Wahl der umweltpolitischen Zielen, was schliesslich die Aufgabe der Politik ist.

Diese Bewertungsmethode gewichtet die Emissionen stark. Das hat einen Einfluss auf die Bewertung der ALV, da dort sehr grosse Mengen an Emissionen, vor allem CO₂ entstehen (1998: 66'000 Tonnen [10]).

Eco-Indicator 99

Die Bewertungsmethode *Eco-Indicator 99* versucht mittels Schadensmodellierung (Dosis-Wirkungs-Funktionen) die Berechnung realer Schäden. Die Schadensanalyse der Prozessbelastungen führt zu drei Schadenskategorien: Schaden an menschlicher Gesundheit, Schaden an Ökosystemqualität und Schaden an mineralischen und fossilen Ressourcen. Die Normalisierung der drei Schadenskategorien ergibt die gesamte Belastung, quantifiziert in Eco-Indicator 99 Punkte (EI-99-Pt) [17]. Je nach (subjektiver) Werthaltung werden die drei Schadenskategorien unterschiedlich gewichtet. In dieser Arbeit wurde eine durchschnittliche, egalitäre Perspektive für die Gewichtung der drei Scha-

denkategorien gewählt [17]. Abbildung III-8 zeigt eine schematische Darstellung der Bewertungsmethode Eco-Indicator 99.

Diese Bewertungsmethode gewichtet den Ressourcenverbrauch stark. Dies wirkt sich auf die Bewertung der ökologischen Gutschriften der Rektifikation aus, da dadurch Ressourcen eingespart werden.

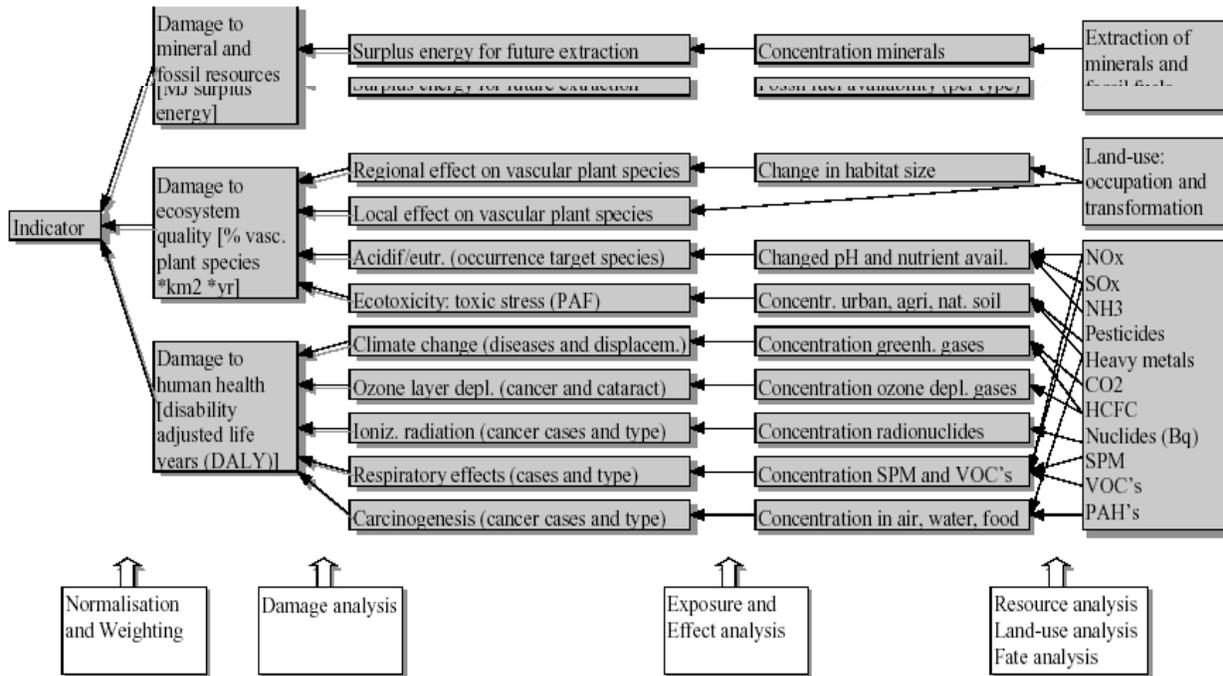


Abbildung III-8 Schematischer Aufbau der Bewertungsmethode Eco-Indicator 99 (aus [17]). Die Methode des Eco-Indicator 99 beruht auf dem Konzept der Schadensmodellierung und quantifiziert eine Beeinträchtigung der drei Schutzgüter "Menschliche Gesundheit", "Ökosystemqualität" und "Ressourcenverbrauch". In dieser Arbeit beruhen die Bewertungen auf der egalitären Perspektive (E/E).

III.4.2. Ergebnisse

Vergleich aller Szenarien und Varianten

Für den Vergleich der ökologischen Belastung der ALM-Behandlungsoptionen wurde eine vollaggregierte Bewertung aller Szenarien und Varianten gemacht. Um zu verdeutlichen, wo die einzelnen Szenarien bzw. Varianten Einsparungen generieren oder stark belastend wirken, wurden die Belastungspunkte weiter aufgeteilt in (1) die Bereitstellung von LM aus der Petrochemie und (2) die der funktionellen Einheit nachgelagerte ALM-Behandlung. Die Gutschriften der Szenarien, berechnet für die Variante 1 (Anrechnung vermiedener Produkte, vgl. Tabelle III-1), werden unterschiedlich vergütet. Das bei der Rektifikation gewonnene Toluol wird wieder dem Produktionsprozess zugeführt.

Somit verringert sich die benötigte Menge an Lösungsmittel aus der Petrochemie, was zu einer kleineren Belastung führt. Die Energiegutschriften hingegen werden der ALM-Behandlung angerechnet.

Tabelle III-3 zeigt die Resultate der Bewertung - in UBP 97 - mit der Methode der ökologischen Knappheit. Tabelle III-4 zeigt die Ergebnisse der Bewertung - in EI-99-Punkten - mit der Methode Eco-Indicator 99. Die Abbildungen III-9 und III-10 stellen die Resultate der Bewertung mit beiden Methoden grafisch dar. Die detaillierten Resultate, aufgeschlüsselt nach den einzelnen Prozessen, befinden sich im Anhang C.

Tabelle III-3 Bewertung der Szenarien und Varianten mit der Methode der ökologischen Knappheit. Die gesamte Belastung (funktionelle Einheit) wird aufgeteilt in die Belastung der Herstellung von Lösungsmittel in der Petrochemie und die Belastung der ALM-Behandlung.

Szenario / Variante	Beschreibung	Funktionelle Einheit [UBP/10 ⁶]	Bereitstellung von LM [UBP/10 ⁶]	ALM-Behandlung [UBP/10 ⁶]
A-11	ALV mit Öleinsparung	11.7	14.9	-3.2
A-12	ALV ohne Öleinsparung	24.2	14.9	9.3
B-11	Rektifikation mit Öleinsparung	4.2	2.2	2.0
B12	Rektifikation ohne Einsparung	19.4	14.9	4.5
B-21	Rektifikation mit Fremdenergie und Öleinsparung	6.4	2.2	4.2
B-22	Rektifikation mit Fremdenergie ohne Öleinsparung	21.5	14.9	6.6

Tabelle III-4 Bewertung der Szenarien und Varianten mit der Methode Eco-Indicator 99. Die gesamte Belastung (funktionelle Einheit) wird aufgeteilt in die Belastung der Herstellung von Lösungsmittel in der Petrochemie und die Belastung der ALM-Behandlung.

Szenario / Variante	Beschreibung	Funktionelle Einheit [EI-Pt/10 ³]	Bereitstellung von LM [EI-Pt/10 ³]	ALM-Behandlung [EI-Pt/10 ³]
A-11	ALV mit Öleinsparung	2.6	3.4	-0.7
A-12	ALV ohne Öleinsparung	4.0	3.4	0.6
B-11	Rektifikation mit Öleinsparung	0.5	0.5	0
B12	Rektifikation ohne Einsparung	3.7	3.4	0.3
B-21	Rektifikation mit Fremdenergie und Öleinsparung	0.6	0.5	0.1
B-22	Rektifikation mit Fremdenergie ohne Öleinsparung	3.8	3.4	0.4

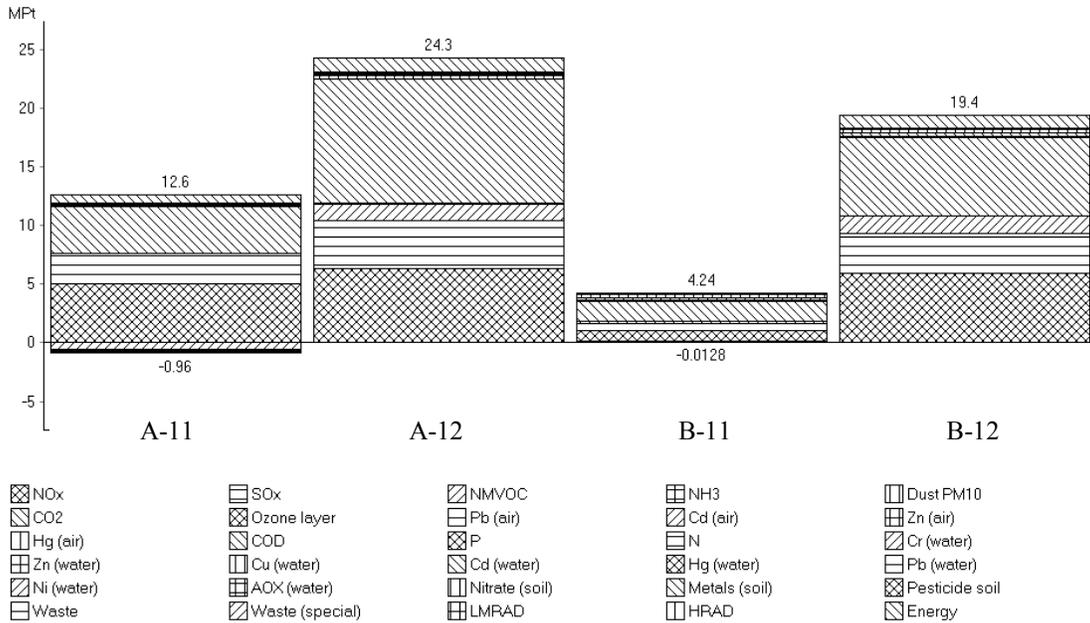


Abbildung III-9 Bewertung der Szenarien inklusive der Wirkungskategorien mit der Methode der Ökologischen Knappheit. Legende: A-11=ALM-Verbrennung mit Gutschriften (Szenario A-11), A-12=ALM-Verbrennung ohne Gutschriften (Szenario A-12), B-11=Rektifikation mit Gutschriften (Szenario B-11), B-12=Rektifikation ohne Gutschriften (Szenario B-12).

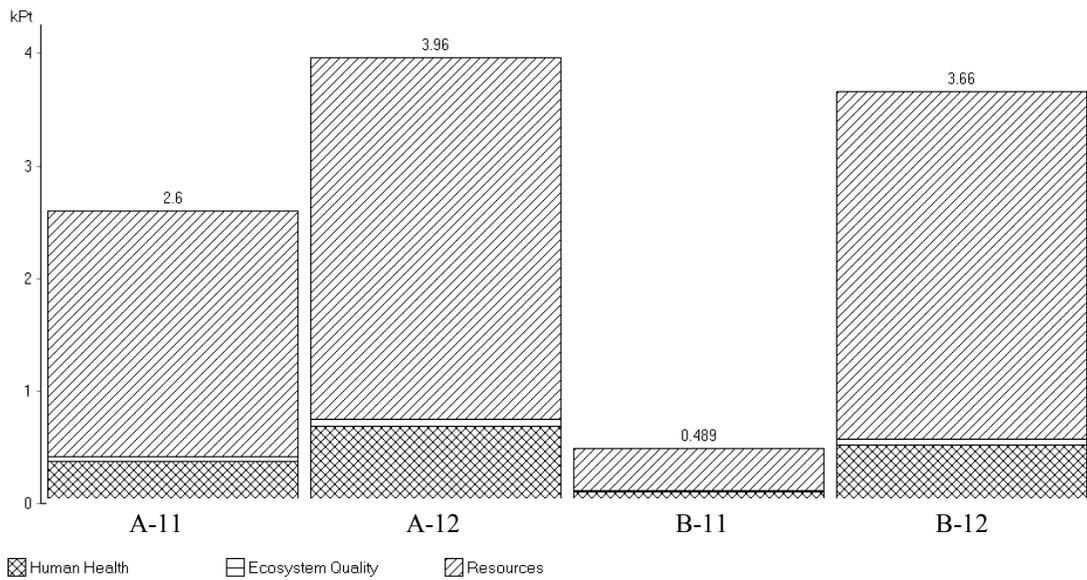


Abbildung III-10 Bewertung der Szenarien inklusive der Schadenskategorien mit der Methode Eco-Indicator 99. Legende: A-11=ALM-Verbrennung mit Gutschriften (Szenario A-11), A-12=ALM-Verbrennung ohne Gutschriften (Szenario A-12), B-11=Rektifikation mit Gutschriften (Szenario B-11), B-12=Rektifikation ohne Gutschriften (Szenario B-12).

Ergebnisse der Szenarien Verbrennung (A-11) und Rektifikation (B-11) auf Stufe der Wirkungs- und Schadenskategorien

Die Ergebnisse der Szenarien Verbrennung mit Gutschriften (A-11) und Rektifikation mit Integration der Stoffflüsse der ALV (B-11) werden detaillierter betrachtet. Sowohl die ökologische Belastung, welche sich aus der Bereitstellung der Lösungsmittel aus der Petrochemie und der Behandlung des ALM zusammensetzt, als auch die ökologischen Gutschriften werden in die Wirkungskategorien (Methode der ökologischen Knappheit) bzw. Schadenskategorien (Eco-Indicator 99) aufgeteilt. Die Belastung aus der ALM-Behandlung setzt sich zusammen aus den direkten Prozessemissionen des Behandlungsprozesses und den Belastungen der vorgelagerten Prozesse. Das wiedergewonnene Lösungsmittel wird nicht von der Menge Lösungsmittel aus der Petrochemie abgezogen, sondern in Form von Punkte-Gutschriften gewertet.

Die Ergebnisse der Bewertung der beiden Szenarien werden in Tabelle III-5 dargestellt. Neben der Gesamtbelastung, die auch in den Tabellen III-3/III-4 gezeigt wird, sind die für die Belastung am bedeutendsten Wirkungskategorien und die drei Schadenskategorien des Eco-Indicator abgebildet.

Tabelle III-5 Bewertung der Szenarien “Verbrennung des ALM-Gemisches” (Szenario A-11) und “Rektifikation des ALM-Gemisches mit Integration der Stoffflüsse mit der ALV” (Szenario B-11) mit ökologischen Gutschriften, aufgeteilt nach den wichtigsten Wirkungs- bzw. den drei Schadenskategorien.

Szenario	Methode	Klassen	Bereitstellung von LM		ALM Behandlung		Ökologische Gutschriften		Funktionelle Einheit	
Verbrennung des ALM-Gemisches in der ALV, Variante mit ökologischen Gutschriften Szenario A-11	Ecopoints 97 [UBP / 10 ⁶]	CO ₂	4.4	30%	6.1	66%	-6.5	52%	4	34%
		NO _x	5.4	36%	0.9	10%	-1.3	10%	5	43%
		SO _x	3.0	20%	1.1	12%	-1.5	12%	2.6	22%
		NMVOG	0.9	6%	0.5	5%	-2.1	17%	-0.7	-6%
		Total	13.7	92%	8.6	93%	-11.4	90%	10.9	93%
	Gesamtbelastung	14.9	100%	9.3	100%	-12.5	100%	11.7	100%	
	Eco-Indicator 99 [EI-Points / 10 ³]	Ressources	2.9	85%	0.3	50%	-1.0	70%	2.2	85%
		Human Health	0.5	15%	0.3	50%	-0.4	30%	0.4	15%
		Ecosystem Damage	<0.1	0%	<0.1	0%	<0.1	0%	<0.1	0%
		Gesamtbelastung	3.4	100%	0.6	100%	-1.4	100%	2.6	100%
Rektifikation des ALM-Gemisches-Integration der Stoffflüsse mit der ALV, Variante mit Gutschriften Szenario B-11	Ecopoints 97 [UBP / 10 ⁶]	CO ₂	4.4	30%	2.3	52%	-5	33%	1.7	40%
		NO _x	5.4	36%	0.5	11%	-4.9	32%	1	24%
		SO _x	3.0	20%	0.4	9%	-2.8	19%	0.6	14%
		NMVOG	0.9	6%	0.5	11%	-1.2	8%	-0.3	-7%
		Total	13.7	92%	3.7	83%	-13.9	92%	3.0	71%
	Gesamtbelastung	14.9	100%	4.4	100%	-15.1	100%	4.2	100%	
	Eco-Indicator 99 [EI-Points / 10 ³]	Ressources	2.9	85%	0.2	70%	-2.7	87%	0.4	80%
		Human Health	0.5	15%	0.1	30%	-0.4	13%	0.1	20%
		Ecosystem Damage	<0.1	0%	<0.1	0%	<0.1	0%	<0.1	0%
		Gesamtbelastung	3.4	100%	0.3	100%	-2.9	100%	0.5	100%

III.5. Auswertung

III.5.1. Verbrennung oder Rektifikation aus Sicht des LCA

Betrachtet man die Szenarien mit ökologischen Gutschriften, so schneidet die Rektifikation mit vollständig integrierten Stoffflüssen 3 bis 5 Mal (Bewertung mit UBP bzw. EI-99-Points) besser ab. Verantwortlich dafür sind die Ressourceneinsparung der Rektifikation, welche bei der Bewertung mit EI-Punkten sehr stark gewichtet wird (vgl. Tabelle III-4) und die Bewertung der direkten Emissionen der Verbrennung mittels UBP (vgl. Tabelle III-3).

Falls die Szenarien ohne ökologische Gutschriften miteinander verglichen werden, besteht ein viel kleinerer Unterschied zwischen der Rektifikation und der ALV. Die Rektifikation erzeugt nur noch eine um 7% bzw. 12% (EI-99-Points / UBP) geringere Umweltbelastung. Die Bewertung mit dem Eco-Indicator liefert schon fast ausgeglichene Werte, da in beiden Szenarien die gleiche Menge an Ressourcen verbraucht wird. Falls aber die Emissionen mittels der Methode der ökologischen Knappheit stärker bewertet werden, so sind die direkten Prozessemissionen der ALV gewichtiger, was hauptsächlich zur Differenz beiträgt. Beim Vergleich der Rektifikation mit Fremdenergie mit der Variante ohne Gutschriften mit dem Szenario der ALV ohne Gutschriften ergeben sich noch kleinere Differenzen.

Die Bewertung mit beiden Bewertungsmethoden ergibt bei allen Szenarien, dass die ALM Entsorgung in der ALV die grössere ökologische Belastung verursacht als die ALM-Behandlung mittels Rektifikation.

III.5.2. Diskussion der Szenarien A-11 und B-11 unter Einbezug der Wirkungs- bzw. Schadensklassen

Wird mit der Methode der ökologischen Knappheit bewertet, so hat die Differenz zwischen den Szenarien "Verbrennung mit Gutschriften" und "Rektifikation mit Integration der Stoffflüsse der ALV" mit Gutschriften (Szenarien A-11 und B-11, vgl. Tabelle III-1) von rund $10 \cdot 10^6$ UBP im wesentlichen zwei Ursachen. Zum einen verursacht das bei der Verbrennung freiwerdende CO_2 eine grosse Umweltbelastung ($6 \cdot 10^6$ UBP, vgl. Tabelle III-5), während die übrigen Wirkungsklassen bei beiden Behandlungsprozessen etwa den gleichen Schaden ergeben. Dadurch wird die ALV mit ca. $5 \cdot 10^6$ mehr UBP bewertet, als die ALM-Rektifikation. Der zweite Grund liegt in der Vergabe der ökologischen Gutschriften. Durch die Einsparung von Lösungsmittel erhält die Rektifikation für CO_2 , SO_x , und vor allem für NO_x höhere Gutschriften als die Verbrennung. Die ALM-Verbrennung vermeidet lediglich NMVOC, da dies hauptsächlich durch die konventionelle Ölfeuerung entstehen würde.

Wird mit der Methode Eco-Indicator 99 bewertet, dann beträgt die Differenz zwischen den Szenarien ca. 2000 EI-99-Punkte. Die Schadenskategorie „Ecosystem Damage“ hat keinerlei Einfluss auf die Bewertung. Die Schadenskategorie „Resources“ ist klar die wichtigste Kategorie. Da bei der Rektifikation Ressourcen (im betrachteten

Fallbeispiel Toluol) eingespart werden, bewertet dies der Eco-Indicator 99 sehr stark (vgl. Tabelle 5).

III.5.3. Einfluss der Gutschriften auf die Bewertung der Verbrennung und der Rektifikation

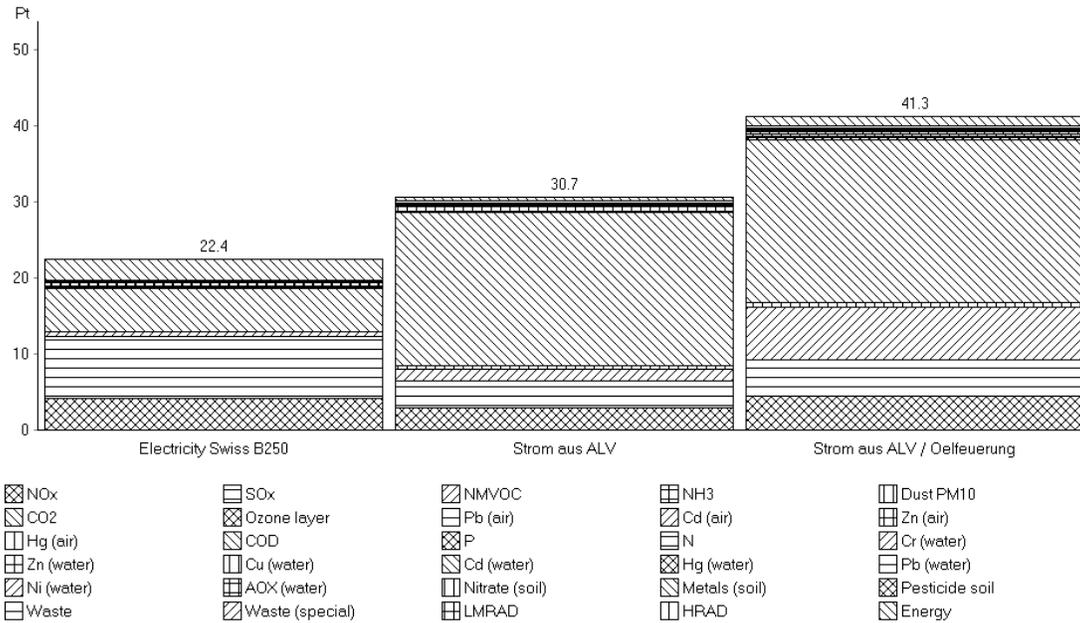
Im Szenario A (Verbrennung) wird mit der Variante ohne ökologische Gutschriften (Variante 2, vgl. Tabelle III-1) eine 30% (Bewertung mit EI-Points) respektive 40% (Bewertung mit UBP) höhere Umweltbelastung errechnet. Im Szenario B-1 (Rektifikation mit Integration der Stoffflüsse) besteht eine noch grössere Differenz. Ohne ökologische Gutschriften schneidet die ALM-Rektifikation 90% (EI-Points) und 80% (UBP) schlechter ab. Im Szenario B-2 liegt der Unterschied bei 80% (EI-Points) und 70% (UBP).

Werden für die Entsorgungsprozesse Gutschriften für wiedergewonnenes Lösungsmittel oder produzierte Energie gegeben (Variante 1, vgl. Tabelle III-1), so schneidet diese Variante unabhängig der Bewertungsmethode ökologisch deutlich besser ab als die Variante ohne ökologische Gutschriften (Variante 2, vgl. Tabelle III-1).

III.5.4. Einfluss der Fremdenergie auf die Bewertung der Rektifikation

Wird die Rektifikation mit Fremdenergie betrieben, verursacht sie einen grösseren Umweltschaden (vgl. Tabelle III-3 und III-4). Dies ergibt sich offensichtlich aus der unterschiedlichen Bewertung der verschiedenen Inventare der Strom- und Dampfproduktion.

Für die Bereitstellung von Strom für den Betrieb der Rektifikation werden je nach Szenario und Variante verschiedene Inventare verwendet. Im Szenario B-1 (Rektifikation mit Integration der Stoffflüsse der ALV, vgl. Tabelle III-1) wird das Inventar "Strom aus ALV" und im Szenario B-2 (Rektifikation unter Einsatz von Fremdenergie, vgl. Tabelle III-1) das Inventar "Electricity Swiss B250" verwendet. Die Gutschriften beziehen sich auf die Vermeidung von Stromproduktion im ölbefeuerten Kesselhaus "Strom aus ALV / Ölfeuerung". Abbildung III-11 zeigt die unterschiedliche Bewertung der Inventare. Der Schweizer Strommix wird ökologisch besser bewertet als der Strom aus der ALV, da die Schweizer Stromproduktion einen Grossteil der Energie aus der Wasserkraft bezieht. Somit beeinflusst die Nutzung des konventionelle Stroms zur Betreibung der Rektifikation das Resultat gegenteilig.

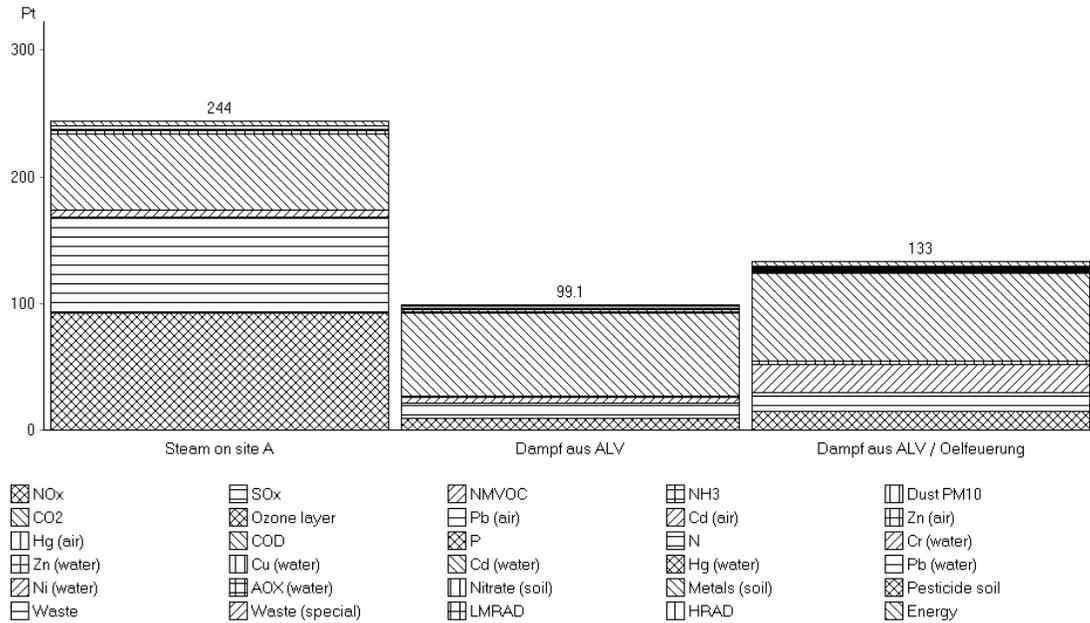


Comparing 1 MJ energy 'Electricity Swiss B250' with 1 MJ processing 'Strom aus ALV' and with 1 MJ processing 'Strom aus ALV / Oelfeuerung'. Method: Ecopoints 9

Abbildung III-11 Bewertung der benutzten Strominventare mittels der Methode der ökologischen Knappheit, verglichen für 1 MJ Strom. Das Inventar "Electricity Swiss" verursacht die kleinere Belastung, da dieser Strom zu einem Grossteil aus Wasserkraft gewonnen wird. Die Belastung des Inventares "Strom aus ölbefeuerten Kesselhaus" ist höher als die Belastung des Inventares "Strom aus ALV", obwohl für die gleiche Stromproduktion die ALV wegen des niedrigen Brennwertes des ALM etwa die doppelte Menge an ALM verbrennen muss.

Für die Bereitstellung von Dampf für den Betrieb der Rektifikation werden ebenfalls drei unterschiedliche Inventare verwendet. Im Szenario B-1 (Rektifikation mit Integration der Stoffflüsse der ALV, vgl. Tabelle III-1) wird das Inventar "Dampf aus ALV" und im Szenario B-2 (Rektifikation unter Einsatz von Fremdenergie, vgl. Tabelle III-1) das Inventar "steam on site" gebraucht. Die Gutschriften beziehen sich auf die Vermeidung von Dampfproduktion im ölbefeuerten Kesselhaus "Dampf aus ALV/Ölfeuerung". Abbildung III-12 zeigt die unterschiedliche Bewertung der Inventare

Das Inventar der konventionellen Dampferzeugung verursacht, bewertet mit der Methode der ökologischen Knappheit, eine mehr als doppelt so grosse Umweltbelastung, wie die Dampferzeugung in der ALV. Dieser grosse Unterschied in der Bewertung der Dampfinventare verursacht die ökologisch schlechtere Bewertung des Szenarios B-2 (Rektifikation unter Einsatz von Fremdenergie, vgl. Tabelle III-1) gegenüber dem Szenario B-1 (Rektifikation mit Integration der Stoffflüsse der ALV, vgl. Tabelle III-1). Dafür sind hauptsächlich die NO_x und SO_x Emissionen verantwortlich (vgl. Wirkungsklassen in Abbildung III-12). Da die ALV wegen des aufwändigen Rauchgasreinigungsverfahrens nur wenige NO_x und SO_x Emissionen hat, verursacht das Inventar 'Dampf aus ALV' eine viel geringere Belastung. Da das Inventar des ölbefeuerten Kesselhauses (Dampf aus ALV/Ölfeuerung) auf dem Inventar der ALV-2 basiert, werden auch bei dieser Dampfproduktion sehr wenig NO_x und SO_x Emissionen freigesetzt.



Comparing 1 kg energy 'Steam on site A' with 1 kg processing 'Dampf aus ALV' and with 1 kg processing 'Dampf aus ALV / Oelfeuerung'; Method: Ecopoints 97 (CH)

Abbildung III-12 Bewertung der benutzten Strominventare mittels der Methode der ökologischen Knappheit, verglichen für 1 kg Dampf. Das Inventar der konventionellen Dampfproduktion (steam on site) verursacht etwa eine doppelt so hohe Belastung wie die Inventare der Dampfproduktion in der ALV und im ölbefeuerten Kesselhaus. Dafür sind die grossen NO_x und SO_x Emissionen verantwortlich. Da in der ALV NO_x und SO_x Emissionen durch die Rauchgasreinigung effizient minimiert werden, verursacht die Dampfproduktion in der ALV eine geringere Belastung.

III.5.5. Relevanz des modellierten Fallbeispiels für die Bewertung von ALM-Behandlungsoptionen

Die Bewertung des Fallbeispiels hat gezeigt, dass mit allen Varianten die Rektifikation aus Sicht des LCA besser abschneidet als die ALM-Verbrennung. Diese Aussage basiert auf einem Systemmodell, das zum Teil Mängel aufweist. So trägt die Bewertung des durchschnittlichen ALM (Referenz: durchschnittliches ALM von 1998) in der Verbrennung dem effektiv höheren Brennwert des Fallbeispiels nicht Rechnung. Das durchschnittliche ALM hat einen tieferen Brennwert, da es viel mehr Wasser enthält und zudem Schwermetalle, Halogene und weitere chemische Verbindungen mit Heteroatomen beinhaltet, die sich auf den Brennwert und die bei der Verbrennung entstehenden Emissionen auswirken. Die Näherung, das Fallbeispiel in der Verbrennung als durchschnittliches ALM zu bewerten, entspricht demzufolge nicht der realen Situation. Deshalb wird im folgenden Kapitel versucht, die Belastungen und die Gutschriften der Verbrennung dem effektiven Brennwert und der Zusammensetzung des Fallbeispiel-Gemisches anzupassen.

Desweiteren kann die Belastung der Herstellung einzelner Hilfsstoffe, die in den verwendeten LCI aufgeführt sind, mit der verwendeten Datenbank nicht bewertet werden. Dies betrifft ausschliesslich Hilfsstoffe, die in der ALV verwendet werden (Phosphat, NH_4OH , CaCl_2 , FeCl_3 , Elektrolyte, TMT, und SO_4^{2-}). Somit wird das Inventar der ALV in der Modellierung mit der Software SimaPro nicht absolut vollständig abgebildet. Gemäss der Resultate der Bewertung kann jedoch angenommen werden, dass diese Hilfsstoffe die Bewertung nicht beeinflussen, da es keine sehr umweltschädigende Substanzen sind und diese nur in geringen Mengen gebraucht werden.

IV. Einfluss der ALM-Zusammensetzung auf die Systembetrachtung

IV.1. Einleitung

In Kapitel III wurde die ALM-Behandlung anhand des Fallbeispiels (Toluol-Methyloxycarbonsäure-Methanol-Wasser-Gemisch) exemplarisch für die Verbrennung und Rektifikation behandelt. In diesem Kapitel wird versucht, verallgemeinerbare Schlussfolgerungen betreffend des ökologischen Vergleiches zwischen der Verbrennung und der Rektifikation von ALM zu erarbeiten. Wie in Kapitel III gezeigt werden konnte, hängt die ökologische Bewertung einer ALM-Behandlungsoption stark von den produktspezifischen Gutschriften für Energie bzw. für eingespartes Lösungsmittel und somit von der ALM-Zusammensetzung ab. Demnach leisten die im LCA erfassten Prozesse (Anlagen) im Fallbeispiel einen geringeren Beitrag zur Umweltbelastung. Desweiteren wurde mit dieser Arbeit keine Technologiebewertung sondern eine allgemeine ökologische Evaluation der Behandlungsoptionen angestrebt. Daher wurde die Verbrennung und die Rektifizierung verschiedener ALM-Gemische in den gleichen Anlagen ökologisch bewertet. Mit der Evaluation verschiedener ALM-Gemische in der Rektifikation und Verbrennung kann aufgezeigt werden, welche Beiträge zum LCA die Frage nach der ökologisch günstigeren Behandlungsoption bestimmen.

Die Betrachtung des Fallbeispiels in Kapitel III zeigt, dass das System für ein LCA des ALM-Management in 3 Teile aufgeteilt werden kann:

- Herstellung von Lösungsmittel in Raffinerien
- Verbrennung des ALM bzw. des Destillationsrückstandes in der ALV
- Rektifikation des ALM

Um ALM-Gemische bzw. deren Belastung in einem LCA beurteilen zu können, müssen Berechnungsverfahren bereitgestellt werden, die eine Quantifizierung der Umweltbelastung in LCA gängigen Belastungspunkte erlauben.

Ziel dieses Kapitels ist, mit Hilfe des Fallbeispiels ein Systemmodell abzuleiten, das ein Verfahren beinhaltet, mit welchem die Umweltbelastung der verschiedenen ALM-Gemische in der Verbrennung und der Rektifikation in Belastungspunkten quantifiziert werden kann. Für die Quantifizierung der Umweltbelastung der Herstellung von Lösungsmittel, welche in den ALM-Gemischen enthalten sind, wird auf publizierte Ökoinventare zurückgegriffen.

IV.2. Festlegung der ALM-Mischungen

Ausgehend vom Fallbeispiel werden weitere, theoretische ALM-Gemische definiert. Tabelle IV-1 zeigt nochmals die Zusammensetzung des Fallbeispiels. Dieses wird in den folgenden Tabellen auch als "Mischung 0" bezeichnet.

Tabelle IV-1 Zusammensetzung des Fallbeispiels (Mischung 0)

Substanz	Toluol	Methanol	Methyloxcarbonsäure	Wasser
Menge [kg]	13485	69	138	69
Mass. %	98%	0.5%	1%	0.5%

Die Zusammensetzung der verschiedenen ALM-Gemische erfolgt theoretisch, weil keine Daten für Ökoinventare zur Verfügung stehen und weil so ALM-Gemische mit unterschiedlichen Eigenschaften bezüglich ihrer ökologischen Bewertung in den zwei Behandlungsoptionen analysiert werden können. Die festgelegten ALM-Mischungen und ihre Zusammensetzungen sind in Tabelle IV-2 angegeben. Sie enthalten die Hauptkomponenten (d.h. Rektifikationsprodukte) Toluol, Benzol, Phenol, Aceton, Methanol und Wasser. In Anlehnung an das Fallbeispiel liegt die Hauptkomponente zu zirka 98 Massenprozenten vor und die Gemische haben eine Menge von 13760 kg, was einer Charge des Fallbeispiels entspricht. Alle Mischungen sind ternäre Systeme. Die Mischbarkeit der Gemische ist gegeben [19], wobei Mischung 7 näherungsweise als binäres Benzol/Wasser Gemisch betrachtet wurde [20].

Aus dem LCA des Fallbeispiels (Kapitel III) geht hervor, dass die Herstellung der Lösungsmittel in der petrochemischen Industrie und die Gutschriften der Energieerzeugung mittels ALM in der ALV einen wichtigen Einfluss auf die Belastung haben (vgl. Tabelle III-5). In der Diskussion der Rektifikation (Vergleich der Szenarien "Rektifikation mit Integration der Stoffflüsse der ALV" und "Rektifikation mit Fremdenergie") zeigte sich, dass der Dampfaufwand ebenfalls massgeblich zur Belastung beiträgt. Daher unterscheiden sich die theoretischen ALM-Gemische vom Fallbeispiel in (a) ihrer Umweltbelastung durch die Herstellung der Lösungsmittel, (b) ihren Gutschriften für die Energiegewinnung in der ALV und (c) ihrem Energiebedarf (Niederdruckdampf) der Rektifikation in der vorgegebenen Kolonne. Das Toluol-Methanol-Wasser Gemisch (Mischung 1) modelliert das Fallbeispiel (Mischung 0) als ternäres System. Diese Mischung dient zur Überprüfung des Systemmodells, denn sie sollte sich ähnlich wie das Fallbeispiel verhalten.

Table II-2

Table IV-2 zeigt die ausgewählten ALM-Gemische. Dargestellt werden deren molare und mengenmässige Zusammensetzung sowie die ökologische Belastung der Herstellung der LM. Die Mischungen wurden so ausgewählt, dass sie bezüglich der Parameter "Belastung der Herstellung", "Energieerzeugung durch Verbrennen" und "Dampfaufwand der Rektifikation" möglichst unterschiedliche Werte annehmen.

Lösungsmittel	Mischung 1 Toluol-Methanol-Wasser			Mischung 2 Benzol-Methanol-Wasser			Mischung 3 Phenol-Methanol-Wasser			Mischung 4 Aceton-Toluol-Wasser						
	LM	UBP/kg	UBP /10 ⁶	Mol. %	Mass. %	kg	Mol. %	Mass. %	kg	Mol. %	Mass. %	kg	Mol. %	Mass. %	kg	UBP /10 ⁶
Aceton	1890												98.2	98	13485	25.5
Benzol	1050			94.6	97.9	13467	14.1									
Methanol	420			4.6	1.9	268	0.1	5	1.8	248	0.1					
Phenol	329							93.9	98	13485	4.4					
Toluol	1100			0.7	0.1	20	<0.1	0.8	0.2	26	<0.1	1.1	0.2	28	<0.1	
Wasser	0.003			100	100	13761	14.9	100	100	13761	14.2	100	100	13761	4.5	
Total																
Lösungsmittel	Mischung 5 Methanol-Toluol-Wasser			Mischung 6 Wasser-Methanol-Toluol			Mischung 7 Benzol-Toluol-Wasser									
	LM	UBP/kg	UBP /10 ⁶	Mol. %	Mass. %	kg	Mol. %	Mass. %	kg	Mol. %	Mass. %	kg	Mol. %	Mass. %	kg	UBP /10 ⁶
Aceton	1890															
Benzol	1050												49.9	45.9	6311	6.6
Methanol	420			98.9	98	13485	5.7	1.4	2.46	339	0.1					
Phenol	329															
Toluol	1100			0.6	1.8	248	0.3	0.01	0.04	7	<0.1	49.9	54	7444	8.2	
Wasser	0.003			0.5	0.2	28	<0.1	98.6	97.5	13414	<0.1	0.2	0.1	66	<0.1	
Total				100	100	13761	6.0	100	100	13760	0.1	100	100	13761	14.8	

IV.2.1. Belastung der LM-Herstellung

Die theoretischen ALM-Gemische beinhalten Lösungsmittel, deren Herstellung unterschiedliche ökologische Belastungen verursachen. Die Auswahl der LCI's der Lösungsmittel ist auf Grund der verwendeten Datenbank begrenzt. Abbildung IV-1 zeigt die Belastung (pro kg) der Herstellung der Lösungsmittel, welche in den neuen ALM-Gemischen enthalten sind.

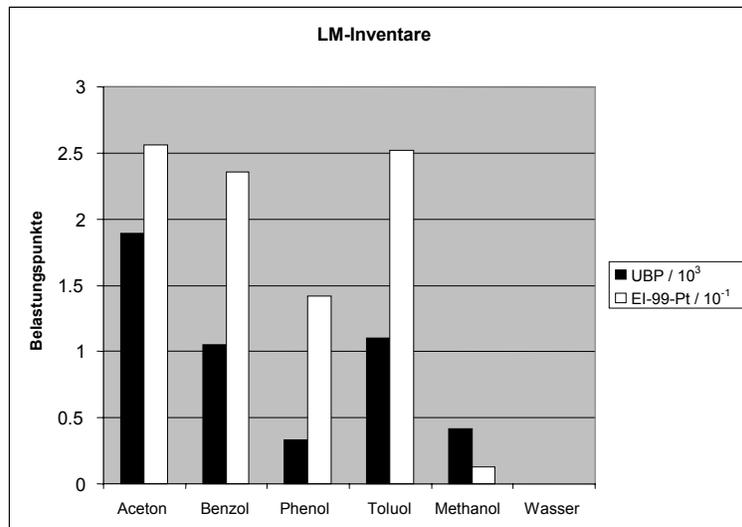


Abbildung IV-1 Abbildung IV-1 zeigt die ökologische Belastung in UBP bzw. EI-99-Points, die durch die Herstellung von einem Kilogramm Lösungsmittel verursacht wird.

Das Aceton der Mischung 4 (Aceton-Toluol-Wasser) verursacht durch die petrochemische Herstellung die grösste ökologische Belastung aller gewählten Lösungsmittel. Dieser Mischung gegenüber steht die Mischung 6 (Wasser-Toluol-Methanol). Deren Herstellung verursacht auf Grund des hohen Wasseranteils sehr kleine Belastungen. Auch die Herstellung der Mischungen 3 (Phenol-Methanol-Wasser) und 5 (Methanol-Toluol-Wasser) verursacht kleine Belastungen.

IV.2.2. Gutschriften für die Energieerzeugung in der ALV

Je mehr Energie die Verbrennung eines ALM-Gemisches in der ALV erzeugt, desto grösser sind die ökologischen Gutschriften. Die Gutschriften in der Verbrennung sind damit direkt vom Heizwert und somit auch von der Verbrennungsenthalpie des ALM abhängig. Tabelle IV-3 zeigt die unterschiedlichen Verbrennungsenthalpien der ausgewählten Lösungsmittel [21]. Die Mischungen 1 (Toluol-Methanol-Wasser) und 2 (Benzol-Methanol-Wasser) haben sehr hohe Verbrennungsenthalpien, da sie praktisch reine Kohlenwasserstoffgemische sind. Auch die Mischung 3 (Phenol-Methanol-Wasser) hat noch eine hohe Verbrennungsenthalpie. Die Verbrennungsenthalpie der Mischung 6

(Wasser-Toluol-Methanol) hingegen ist wegen des Wasseranteils sehr niedrig. Auch die Mischung 5 (Methanol-Toluol-Wasser) hat eine niedrige Verbrennungsenthalpie.

Tabelle IV-3 Verbrennungsenthalpien der ausgewählten Lösungsmittel (aus [21])

Lösungsmittel	Aceton	Benzol	Methanol	Phenol	Toluol	Wasser
Verbrennungsenthalpie [MJ/kg]	28.6	40.1	19.9	31	40.5	0

Die Verbrennungsenthalpie der ALM-Gemische wurde bestimmt, indem aus den Verbrennungsenthalpien der darin enthaltenen Lösungsmittel der nach der Masse gewichtete Durchschnitt berechnet wurde.

IV.2.3. Dampfaufwand der Rektifikation

Der Energiebedarf der Rektifikation beinhaltet im Wesentlichen den Dampfaufwand (siehe Kapitel III, Vergleich der Szenarien "Rektifikation mit Integration der Stoffflüsse der ALV" und "Rektifikation mit Fremdenergie"). Der Dampfaufwand für die Rektifikation eines anderen ALM-Gemisches ist schwierig abzuschätzen, da mehrere Parameter einen Einfluss darauf haben: Der Dampfbedarf ist abhängig von der Anzahl der Moleküle, die getrennt werden müssen, den Siedepunkten der ALM-Komponenten, den Differenzen der Siedepunkte und den Wechselwirkungen der Inhaltsstoffe untereinander.

In Bezug auf den Dampfaufwand für die Rektifikation der definierten ALM-Gemische kann deshalb nur mit Sicherheit gesagt werden, dass die Mischung 7 (Toluol-Benzol-Wasser) einen grösseren Dampfaufwand als die Mischungen 1 (Toluol-Methanol-Wasser) und 2 (Benzol-Methanol-Wasser) hat, weil zwei Produkte (Toluol und Benzol) aus der Rektifikation gewonnen werden. Die Mischung 3 (Phenol-Methanol-Wasser) hat wahrscheinlich auch einen grösseren Dampfbedarf als die Mischungen 1 und 2, da Phenol einerseits einen sehr hohen Siedepunkt (182°C [21]) hat und die Wechselwirkungen der Komponenten untereinander stark sind.

IV.3. Belastung durch die ALM-Verbrennung in der ALV

IV.3.1. Analyse der Belastungsquellen

Damit ein Berechnungsverfahren für die Abschätzung der Umweltbelastung der Verbrennung der definierten ALM-Gemische (vgl. Tabelle IV-2) in der ALV erstellt werden kann, wird die Belastung der Verbrennung des durchschnittlichen ALM in der ALV analysiert. Die Analyse soll zeigen, welche Emissionen hauptsächlich für die Belastung verantwortlich sind, aus welchen Prozessen sie stammen und wie sie für die Verbrennung eines beliebigen ALM berechnet werden kann.

Analyse der Bewertung mit der Methode der ökologischen Knappheit

Die Ergebnisse der Analyse des ALV-Inventares bewertet mit der Methode der ökologischen Knappheit sind in Tabelle IV-4 zusammengefasst. Über 90% der gesamten Belastung der ALV wird durch die Schadstoffe CO₂, SO_x, NO_x und NMVOC verursacht, wobei das CO₂ mit einem Anteil von 65% an der Gesamtbelastung die weitaus wichtigste Emission ist. Damit 95% der Belastung der ALV erfasst werden, müssen die Emissionen Quecksilber (1.9% der Gesamtbelastung), Staub (1.3% der Gesamtbelastung) und Abwasser (1.1% der Gesamtbelastung) miteinbezogen werden.

Tabelle IV-4 Die für die Umweltbelastung der ALV wichtigsten Emissionen und deren Ursprung, bewertet mit der "Methode der ökologischen Knappheit".

Umweltbelastung der ALV		Verantwortliche Prozesse für die Emissionen [in %, bezogen auf den emittierten Schadstoff]			
Emissionen	[%]	Verbrennung	NaOH	Heizöl EL	Strom CH
CO ₂	65	89	7	1	1.4
SO _x	11	3	68	10	14
NO _x	10	49	29	12	8
NMVOC	5	-	10	88	2
Total	91				

Verursacht werden diese Emissionen im wesentlichen durch vier Prozesse: die Verbrennung und die der ALV vorgelagerten Prozesse der Herstellung von Natronlauge, Heizöl EL und Strom (CH).

Der Prozess "Verbrennung" beinhaltet sämtliche Prozessemissionen, die bei der Verbrennung, Rauchgasreinigung und Abwasserbehandlung in der ALV entstehen. Die Verbrennung ist der wichtigste Prozess, da dadurch beinahe 90% des gesamten CO₂ entstehen, was schon zirka 60% der gesamten Umweltbelastung bedeutet. Die Natronlauge erfüllt zwei Funktionen: zum einen wird sie für die Rauchgaswäsche eingesetzt, wo SO_x und Halogenwasserstoffe aus dem Rauch entfernt werden und zum zweiten um in

der Abwasserreinigung den pH bei der Sulfitoxidation einzustellen. Das Heizöl EL dient als Zusatzbrennstoff beim Anfahren der Öfen und als Sicherheitsreserve, falls die Verbrennung nicht optimal verläuft und zusätzlicher Brennstoff benötigt wird. Ausserdem wird es beim Betrieb des Überhitzers zusammen mit vordestilliertem ALM (Regenerat) eingesetzt. Der Strom wird grösstenteils für den Betrieb des Saugzuges, der die Abluft in die Brennkammer saugt und für Pumpensysteme in allen Bereichen der ALV gebraucht [18].

Die Bildung des CO_2 in der Verbrennung erfolgt durch Oxidation des im ALM vorhandenen Kohlenstoffs, welche bei Betriebstemperaturen um 1200°C näherungsweise als vollständige Oxidation betrachtet werden kann. Die Ursache der Bildung von NO_x in der ALV konnte nicht schlüssig geklärt werden. Die Wichtigkeit, welche die thermische NO_x -Bildung und der Stickstoffanteil im ALM haben, ist auch der Betreiberfirma der ALV nicht genau bekannt. Grundsätzlich gibt es keine eindeutige Zuordnung von speziellen Emissionsniveaus zu einzelnen Brennertypen [2]. Messwerte von Ölkesselfeuerungen zeigten, dass bei der Verbrennung von Heizöl EL die thermische NO_x -Bildung die weitaus wichtigere ist [2]. Desweiteren kann vermutet werden, dass diese hohen Temperaturen die thermische NO_x -Bildung fördern. Aus diesen Gründen wird angenommen, dass die thermische NO_x -Bildung dominiert. Die Bildung von SO_x ist vor allem bei Verbrennungsprozessen wichtig und ist abhängig von Schwefelgehalt des Brennstoffes. Da die ALV jedoch eine nachgeschaltete Rauchgasreinigung und Abwasserbehandlungsstufe besitzt, werden keine grossen Mengen an SO_x bei der Verbrennung abgegeben. Das SO_x fällt hauptsächlich bei der Produktion von Natronlauge in der Vorprozesskette an.

Analyse der Bewertung mit der Methode Eco-Indicator 99

Die Aufschlüsselung der Umweltbelastung der ALV wurde auch für das mit Eco-Indicator 99 bewertete Ökoinventar durchgeführt. Tabelle IV-5 zeigt diese Resultate. Die Schadensklassen "Climate change", "Fossil fuels" und "Respiratory inorganics" verursachen rund 90% der Gesamtbelastung, wobei die ersteren beiden besonders gewichtig sind und einen Anteil von knapp 80% haben. Damit 95% der Belastung der ALV erfasst werden, müssen die Schadensklassen "Karziogene", "Eutrophierung" und "Landverbrauch" miteinbezogen werden.

Die Bewertung des ALV-Inventares mit dem Eco-Indicator 99 zeigt, dass hauptsächlich die vier Prozesse Verbrennung, Herstellung von Natronlauge, Heizöl EL und Strom (CH) für die Belastung durch die Schadensklassen verantwortlich sind.

Das bei der Verbrennung freiwerdende CO_2 trägt am stärksten zur Schadensklasse "Climate change" bei. Für die Kategorie "Fossil fuels" fällt die Verwendung von Heizöl stark ins Gewicht. Die NO_x Emissionen der Verbrennung und die SO_x Belastung durch den Herstellungsprozess von Natronlauge tragen massgeblich zur Belastung der Schadensklasse "Respiratory inorganics" bei.

Tabelle IV-5 Die für die Umweltbelastung der ALV wichtigsten Emissionen und deren Ursprung, bewertet mit der Methode "Eco-Indicator 99".

Umweltbelastung der ALV		Verantwortliche Prozesse für die Emissionen [in %, bezogen auf den emittierten Schadstoff]			
Schadensklassen	[%]	Verbrennung	NaOH	Heizöl	Strom
Fossil fuels	48	<1	32	56	8
Climate change	30	92	6	<1	1.5
Respiratory inorganics	13	24	48	12	12
Total	90				

Mit der Bewertungsmethode Eco-Indicator 99 werden ähnliche Resultate erzielt wie mit der Methode der ökologischen Knappheit: Es werden mit beiden Bewertungsmethoden dieselben vier Prozesse als Hauptursache der Umweltbelastung der ALV identifiziert. Dafür sind in beiden Fällen die Emissionen CO₂, SO_x und NO_x weitgehend verantwortlich. Der wichtigste Unterschied der beiden Methoden liegt in der Gewichtung der Ressourcen. Der Eco-Indicator 99 gewichtet den Ressourcenverbrauch, wie er vor allem durch den Gebrauch des Heizöls entsteht, stärker, während die Methode der ökologischen Knappheit diesen nicht als ausschlaggebend einstuft (vgl. Kapitel III.4.1).

Für die folgenden Betrachtungen wird auf die Resultate der Eco-Indicator 99 Bewertung verzichtet. Die Gründe sind einerseits die zuvor erwähnten Parallelen zur Methode der ökologischen Knappheit (Identifikation der gleichen Prozesse, die massgeblich zur Belastung beitragen) und zum anderen ist es sehr aufwändig, die Eco-Indicator 99 Resultate auf die Stufe der verantwortlichen Emissionen oder Ressourcen zu analysieren, da diese Bewertungsmethode mit mehreren Aggregationsstufen arbeitet (vgl. Abb. III-8).

IV.3.2. Bewertung der Verbrennung der ALM-Gemische

Auf Grund der Analyse der durch die ALV verursachten Umweltbelastung wurden die wichtigsten Emissionen (CO₂, SO_x, NO_x und NMVOC) und die dafür verantwortlichen Prozesse (Verbrennung, Herstellung von Natronlauge, Heizöl und Strom) erkannt. Daraus soll ein Berechnungsverfahren für die Abschätzung der Belastung, die durch die Verbrennung eines ALM-Gemisches entsteht, erarbeitet werden. Die gesamte Belastung wird dazu unterteilt in Belastungen, die von der ALM-Zusammensetzung abhängig sind und Belastungen, die nur durch den Betrieb der ALV entstehen. Tabelle IV-6 zeigt in Form einer Matrix die Unterteilung der Belastung durch die Emissionen (CO₂, SO_x, NO_x und NMVOC) und Prozesse (Verbrennung, Herstellung von Natronlauge, Heizöl und Strom) in ALM abhängige und betriebsbedingte Belastungen. Damit sind 91% der gesamten Belastung erfasst (vgl. Tabelle IV-4). Für die restlichen 9% kann keine ALM-Abhängigkeit bestimmt werden, da sie sich aus mehreren Emissionen zusammensetzen. Dieser Rest wird zwecks Vereinfachung als betriebsbedingte Belastung betrachtet.

Tabelle IV-6 Unterteilung der Belastung durch die ALV in ALM abhängige (ALM) und betriebsbedingte (Betrieb) Belastungen auf Grund der wichtigsten Emissionen (CO₂, SO_x, NO_x und NMVOC) und Prozesse (Verbrennung, Herstellung von Natronlauge, Heizöl und Strom).

	Verbrennung	NaOH	Heizöl EL	Strom (CH)
CO ₂	ALM	ALM	ALM	Betrieb
SO _x	Betrieb	ALM	ALM	Betrieb
NO _x	Betrieb	ALM	ALM	Betrieb
NMVOC	Betrieb	ALM	ALM	Betrieb

Die Verbrennung des ALM ergibt ökologische Gutschriften für die Vermeidung der Energieproduktion in einem ölbefeuerten Kesselhaus (vgl. Kapitel III.3.2). Da in der ALV neben dem ALM auch Heizöl und Regenerat mitverbrannt wird, muss zwischen der Energieerzeugung durch das ALM und dem Heizöl (und Regenerat) unterschieden werden. Tabelle IV-7 zeigt die qualitative Aufteilung der Energie des durchschnittlichen ALM in der ALV-2 (vgl. auch Tabelle III-2). Die Energieerzeugung durch Heizöl und Regenerat (rund 18% der gesamten Energieproduktion der ALV) wird nicht mit ökologischen Gutschriften vergütet. Sie wird als ALM abhängige Belastung gewertet, denn für ALM mit hohem Heizwert muss für die Produktion von Dampf weniger Heizöl mitverbrannt werden. Die Energieerzeugung mittels ALM ist abhängig von der Verbrennungsenthalpie des ALM und bekommt ökologische Gutschriften.

Tabelle IV-7 Aufteilung der gesamten Energieproduktion der ALV im Referenzjahr 1998 nach den verschiedenen Brennstoffen (vgl. Tabelle III-2). Die Energiegewinnung aus Heizöl und Regenerat erhält keine ökologischen Gutschriften, während die Energiegewinnung aus ALM für die Vermeidung alternativer Energieproduktion mittels Ölfeuerung Gutschriften erhält.

	Verbrennungsenthalpie	Menge 1998	Energie pro Jahr [MJ/a]	Energie pro Jahr [MWh/a]
ALM	21 [MJ/kg]	33350 t	700*10 ⁶	194'542
Heizöl	42 [MJ/kg]	1800 t	75.6*10 ⁶	21'000
Regenerat	27 [MJ/kg]	3000 t	81*10 ⁶	22'500
Erdgas	≈ 40 [MJ/m ³]	47000 m ³	1.88*10 ⁶	522
Total		≈ 38150 t	857*10 ⁶	238'064

Diese Aufteilung der gesamten Belastung der ALV erlaubt es, eine modular aufgebautes Berechnungsverfahren für die Abschätzung der Umweltbelastung der Verbrennung eines ALM-Gemisches zu erstellen. Für jedes Modul kann die Belastung in Belastungspunkten (UBP) aus den Resultaten von SimaPro oder auf Grund von ALM abhängigen Berechnungen erfasst werden. Die Belastungspunkte der Module werden pro Kilogramm ALM angegeben. Folgende Module wurden definiert:

1.) Grundbelastung der ALV:

Diese Belastung ist betriebsbedingt. Sie beinhaltet die Belastung (1) der Herstellung von Strom und Heizöl für den Betrieb der Anlage, (2) des durch die hohen Temperaturen entstehenden NO_x, (3) der restlichen 9% der Gesamtbelastung, die wegen der Vielzahl von Emissionen nicht der ALM-Zusammensetzung zugeordnet werden kann und (4) durch die Verbrennung von Heizöl EL für die Inbetriebnahme der Brennöfen. Zusammen ergibt dies eine Grundbelastung der ALV von 110 UBP / kg ALM.

2.) Belastung durch die Verbrennung von Heizöl und Regenerat im Überhitzer:

Diese Belastung ist abhängig vom Energieinhalt des ALM. Je höher der Brennwert eines ALM-Gemisches ist, desto weniger Energie muss im Überhitzer aufgewendet werden, um Dampf zu produzieren. Es wird eine lineare Abhängigkeit zwischen der Verbrennungsenthalpie (ΔH_{comb}) des ALM und der Umweltbelastung durch den Überhitzer angenommen. Es wurde angenommen, dass die maximale Verbrennungsenthalpie eines ALM-Gemisches 40 MJ/kg enthalten kann. Bei diesem Maximalwert muss keine Energie vom Überhitzer für die Dampfproduktion beigezogen werden. Somit wird die Belastung durch den Überhitzer gleich 0. Aus dieser Annahme heraus wurde zusammen mit Daten aus SimaPro eine Gleichung (Gleichung IV-1) zur Berechnung der ALM abhängigen Belastung durch den Betrieb des Überhitzers abgeleitet.

$$\text{Belastung [UBP]} = -6.4 * \Delta H_{\text{comb}} (\text{ALM}) [\text{MJ/kg}] + 255 \quad (\text{IV-1})$$

3.) Belastung der SO_x und NO_x Emissionen (Herstellung) durch den Einsatz von NaOH:

Wird ein ALM verbrannt, welches Halogene oder Schwefelverbindungen enthält, müssen diese Komponenten mit Natronlauge oxidiert werden. Die Umweltbelastung der dafür benötigten Natronlauge wird diesen ALM-Gemischen in Abhängigkeit der molaren Schwefel- und (organischen) Chlorgehalte als Belastung angerechnet. Diese lassen sich gemäss der Gleichungen IV-2 und IV-3 berechnen.

$$\text{Anzahl Mole S [mol]} = \text{Menge S [g]} / 32 [\text{g/mol}] \quad (\text{IV-2})$$

$$\text{Anzahl Mole organisches Cl [mol]} = \text{Menge organisches Cl [g]} / 35 [\text{g/mol}] \quad (\text{IV-3})$$

Mit Hilfe von Daten aus SimaPro wurden zwei Gleichungen (Gleichung IV-4 und IV-5) zur Berechnung der ALM abhängigen Belastung durch den Einsatz von NaOH hergeleitet.

$$\text{Belastung [UBP]} = \text{S [mol]} * 136 \quad (\text{IV-4})$$

$$\text{Belastung [UBP]} = \text{Cl [mol]} * 70 \quad (\text{IV-5})$$

4.) Belastung des bei der Verbrennung entstehenden CO₂:

Bei der Verbrennung des ALM wird näherungsweise eine vollständige Oxidation angenommen. Somit hängt die von der ALM-Mischung ausgehende CO₂-Belastung direkt vom Kohlenstoffanteil im ALM ab. Die aus der Masse des Kohlenstoffes resultierende Masse CO₂ lässt sich mittels Gleichung IV-6 berechnen.

$$\text{Masse Kohlenstoff [kg]} * 3.67 = \text{Masse CO}_2 \text{ [kg]} \quad (\text{IV-6})$$

Mit Hilfe von Daten aus SimaPro wurde eine Gleichungen (Gleichung IV-7) zur Berechnung der ALM abhängigen Belastung des bei der Verbrennung entstehenden CO₂ hergeleitet.

$$\text{Belastung [UBP]} = \text{Masse CO}_2 \text{ [kg]} * 202 \quad (\text{IV-7})$$

5.) Energiegutschriften

Mit der Verbrennungswärme des ALM wird das im ALM enthaltene Wasser verdampft und auf die Betriebstemperatur von 1200°C erhitzt. Der Energieüberschuss wird für die Dampf- und Stromproduktion verwendet, womit die Energieproduktion in einem ölbefeuerten Kesselhaus vermieden wird. Dafür werden ökologische Gutschriften gegeben (vgl. Kap. III). Diese sind direkt abhängig vom der Verbrennungsenthalpie der ALM-Mischung abzüglich der Energie, welche für das Verdampfen des Wassers verloren geht.

Falls die Verbrennungsenthalpie eines ALM-Gemisches nicht bekannt sein sollte, kann diese auf Grund des Kohlenstoffgehaltes abgeschätzt werden. Aus den Stoffdaten von 16 Lösungsmittel wurde eine lineare Korrelation zwischen dem prozentualen Kohlenstoffgehalt und der Verbrennungsenthalpie erstellt (siehe Anhang B3). Daraus ergibt sich die in Gleichung IV-8 dargestellte Abschätzung für die Verbrennungsenthalpie.

$$\Delta H_{\text{comb}} \text{ [MJ/kg]} = 0.45 * \text{prozentualer Kohlenstoffanteil [\%]} + 2.3 \quad (\text{IV-8})$$

Die Energie für die Erhitzung des Wassers ($\Delta H_{\text{vap}}(\text{H}_2\text{O}, 1200^\circ\text{C})$ [MJ/kg]) in einem Kilogramm ALM auf 1200°C berechnet sich aus dem Wasseranteil ($f_{\text{H}_2\text{O}}$) des ALM-Gemisches (Gleichung IV-9). Der Faktor “5.1 [MJ]” wurde mit der Software Aspen [22] errechnet.

$$\Delta H_{\text{vap}}(\text{H}_2\text{O}) \text{ [MJ]} = (f_{\text{H}_2\text{O}}) * 5.1 \text{ MJ} \quad (\text{IV-9})$$

Die Energie zur Erzeugung von Dampf und Strom aus einem Kilogramm ALM (ΔH) berechnet sich aus der Differenz zwischen der Energie zur Verdampfung des Wassers und der Verbrennungsenthalpie des ALM-Gemisches (Gleichung IV-10). Ist die Differenz grösser 0, wird Energie benötigt, um das Wasser zu verdampfen. Diese Energie wird durch die Verbrennung von Heizöl gewonnen, was zu einer Belastung führt (Gleichung IV-12). Falls die Differenz kleiner 0 ist, kann mit dem ALM Dampf und Strom produziert werden (Gleichung IV-11). Dies wird mit ökologischen Gutschriften gewertet.

$$\Delta H_{\text{vap}}(\text{H}_2\text{O}) [\text{MJ}] - \Delta H_{\text{comb}} [\text{MJ}] = (\Delta H) [\text{MJ}] \quad (\text{IV-10})$$

$$\text{falls } \Delta H < 0 \rightarrow \text{ökologische Gutschrift [UBP]} = \Delta H [\text{MJ}] * 37.5 \quad (\text{IV-11})$$

$$> 0 \rightarrow \text{ökologische Belastung [UBP]} = \Delta H [\text{MJ}] * 37.5 \quad (\text{IV-12})$$

Zusammenfassend wird das modulare Berechnungsverfahren für die Abschätzung der Belastung der Verbrennung von ALM-Gemischen in Abbildung IV-2 dargestellt.

Berechnungsverfahren der Umweltbelastung für 1kg ALM	
1.) Grundbelastung der ALV:	+110 [UBP]
2.) Belastung durch den Betrieb des Überhitzers:	
	$-6.4 * \Delta H_{\text{comb}} (\text{ALM}) + 255 = + \text{Belastung [UBP]}$
3.) Belastung wegen des Einsatzes NaOH zur Oxidation von S und Cl:	
	$\text{S [mol/kg LM]} * 136 = + \text{Belastung [UBP]}$
	$\text{Cl [mol/kg LM]} * 70 = + \text{Belastung [UBP]}$
4.) Belastung wegen der CO ₂ -Emissionen des ALM	
	$\text{Masse organisches CO}_2 \text{ [kg/kg LM]} * 202 = + \text{Belastung [UBP]}$
5.) Nutzung der Verbrennungsenthalpie des ALM:	
	$\Delta H [\text{MJ}] < 0: \Delta H [\text{MJ}] * 37.5 = - \text{ökologische Gutschrift [UBP]}$
	$> 0: \Delta H [\text{MJ}] * 37.5 = + \text{Belastung [UBP]}$

Abbildung IV-2 Berechnungsverfahren für die Umweltbelastung in Umweltbelastungspunkten (UBP) der Verbrennung von 1 kg ALM in der ALV. Die aufgelisteten Punkte entsprechen den obig diskutierten Modulen.

Um das Berechnungsverfahren zu illustrieren, wird die Umweltbelastung der Verbrennung für das durchschnittliche ALM (vgl. Tabelle IV-1) und das Toluol-Gemisch (Mischung1, vgl. Tabelle IV-2) mit diesem Verfahren berechnet (siehe Abbildungen IV-3 und IV-4).

Berechnung der Belastung von 1 kg durchschnittlichem ALM

Eigenschaften des durchschnittlichen ALM [10]:

- Kohlenstoffanteil: 45%
- Verbrennungsenthalpie: 21 MJ/kg
- Wasseranteil: 17%
- S: 364 t/a; bei 33500 t ALM/a entspricht dies einem S-Anteil von 10.9 g / kg ALM.
- Cl: 1360 t/a; bei 33500 t ALM/a entspricht dies einem Cl-Anteil von 40.6 g / kg ALM

Berechnung für 1 kg durchschnittliches ALM:

- 1) Grundbelastung der ALV: +110 UBP
- 2) Belastung durch den Betrieb des Überhitzers: $-6.4 \cdot 21 + 255 = +121$ UBP
- 3) Belastung wegen des Einsatzes von NaOH:
 - S: $10.9 \text{ [g]} / 32 \text{ [g/mol]} = 0.68 \text{ [mol]} * 136 = +46$ UBP
 - Cl: $40.6 \text{ [g]} / 35 \text{ [g/mol]} = 2.3 \text{ [mol]} * 70 = +81$ UBP
- 4) Belastung wegen der CO₂-Emissionen des ALM: $0.45 \cdot 3.67 \cdot 202 = +334$ UBP
- 5) Nutzung der Verbrennungsenthalpie des ALM:
 - Energie zur Erhitzung des Wassers: $0.17 \cdot 5.1 \text{ [MJ]} = 0.87 \text{ [MJ]}$
 - Energie zur Dampferzeugung: $(0.87 \text{ [MJ]} - 21 \text{ [MJ]}) * 37.5 = -755$ UBP

Gesamtbewertung: $692 \text{ UBP} - 755 \text{ UBP} = \underline{-63 \text{ UBP}}$

Abbildung IV-3 Berechnung der Umweltbelastung des durchschnittlichen ALM mit dem erstellten Berechnungsverfahren.

Berechnung der Belastung von 1 kg des Toluol-Gemisches (Mischung 1)

Eigenschaften des Toluol-Gemisches (Mischung 1, vgl. Tabelle IV-1 und Anhang B1):

- Kohlenstoffanteil: 90%
- Verbrennungsenthalpie: 39.6 MJ/kg
- Wasseranteil: 0.1%
- S: 0 g/kg ALM
- Cl: 0 g/kg ALM

Berechnung für 1 kg durchschnittliches ALM:

- 1) Grundbelastung der ALV: +110 UBP
- 2) Belastung durch den Betrieb des Überhitzers: $-6.4 \cdot 39.6 + 255 = +2$ UBP
- 3) Belastung wegen des Einsatzes von NaOH: 0 UBP
- 4) Belastung wegen der CO₂-Emissionen des ALM: $0.9 \cdot 3.67 \cdot 202 = +667$ UBP
- 5) Nutzung der Verbrennungsenthalpie des ALM:
 - Energie zur Erhitzung des Wassers: $0.001 \cdot 5.1 \text{ [MJ]} = 0.005 \text{ [MJ]}$
 - Energie zur Dampferzeugung: $(0.005 \text{ [MJ]} - 39.6 \text{ [MJ]}) * 37.5 = -1485$ UBP

Gesamtbewertung: $779 \text{ UBP} - 1485 \text{ UBP} = \underline{-706 \text{ UBP}}$

Abbildung IV-4 Berechnung der Umweltbelastung des Toluol-Gemisches (Mischung 1, vgl. Tabelle IV-2) mit dem erstellten Berechnungsverfahren.

Der Vergleich der berechneten Belastung der beiden ALM-Gemische zeigt, dass die Toluol-Mischung eine viel grössere ökologische Gutschrift erhält, als das durchschnittliche ALM. Dies ergibt sich, weil das Toluol-Gemisch keine Belastung wegen des Überhitzers und des Einsatzes von NaOH verursacht und gleichzeitig eine viel grössere Verbrennungsenthalpie hat. Zudem ist der Wasseranteil im Toluol-Gemisch sehr viel kleiner, womit beinahe die gesamte Verbrennungsenthalpie zur Erzeugung von Dampf benutzt werden kann.

IV.3.3. Ergebnisse der Bewertung

Für alle in Tabelle IV-2 definierten ALM-Gemische wurde nach dem vorgestellten Berechnungsverfahren die Umweltbelastung für 1 Charge ALM (13760 kg) berechnet. Die Resultate sind in Tabelle IV-8 aufgeführt. Die detaillierten Berechnungen befinden sich im Anhang B1.

Tabelle IV-8 Resultate der Verbrennung für 1 Charge ALM, berechnet nach dem in Kapitel IV.3.2 erstellten Berechnungsverfahren.

Mischung Nummer	Mischung (vgl. Tabelle IV-2)	Menge [kg]	Bewertung [UBP]/10 ⁶
0	Toluol -Methanol-Methyloxcarbonsäure-Wasser	13760	-9.7
1	Toluol -Methanol-Wasser	13761	-9.6
2	Benzol -Methanol-Wasser	13761	-9.6
3	Phenol -Methanol-Wasser	13761	-5.9
4	Aceton -Toluol-Wasser	13761	-5.8
5	Methanol -Toluol-Wasser	13761	-3.2
6	Wasser -Methanol-Toluol	13761	+5.6
7	Benzol-Toluol -Wasser	13761	-9.2

Für weitere Interpretationen wurde die Gesamtbewertung der ALM-Gemische in der ALV aufgeteilt in die fixe Belastung, die durch den Betrieb der ALV entsteht und die variable, ALM abhängige Belastung sowie die Gutschriften der Energiegewinnung (siehe Tabelle IV-9, Abbildung IV-5).

Tabelle IV-9 Bewertung der ALM-Mischungen in UBP, aufgeteilt nach ALM abhängigen und betriebsbedingten Belastungen sowie den Gutschriften durch die Energiegewinnung.

ALM-Gemisch Nummer	0	1	2	3	4	5	6	7
Belastung durch den Betrieb der ALV [UBP / 10 ⁶]	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5
Belastung durch das ALM-Gemisch [UBP / 10 ⁶]	9.2	9.2	9.3	8.5	7.4	5.6	4.1	9.3
Gutschriften der Energiegewinnung [UBP / 10 ⁶]	-20.4	-20.3	-20.4	-15.9	-14.7	-10.3	0	-20
Total [UBP / 10 ⁶]	-9.7	-9.6	-9.6	-5.9	-5.8	-3.2	+5.6	-9.2

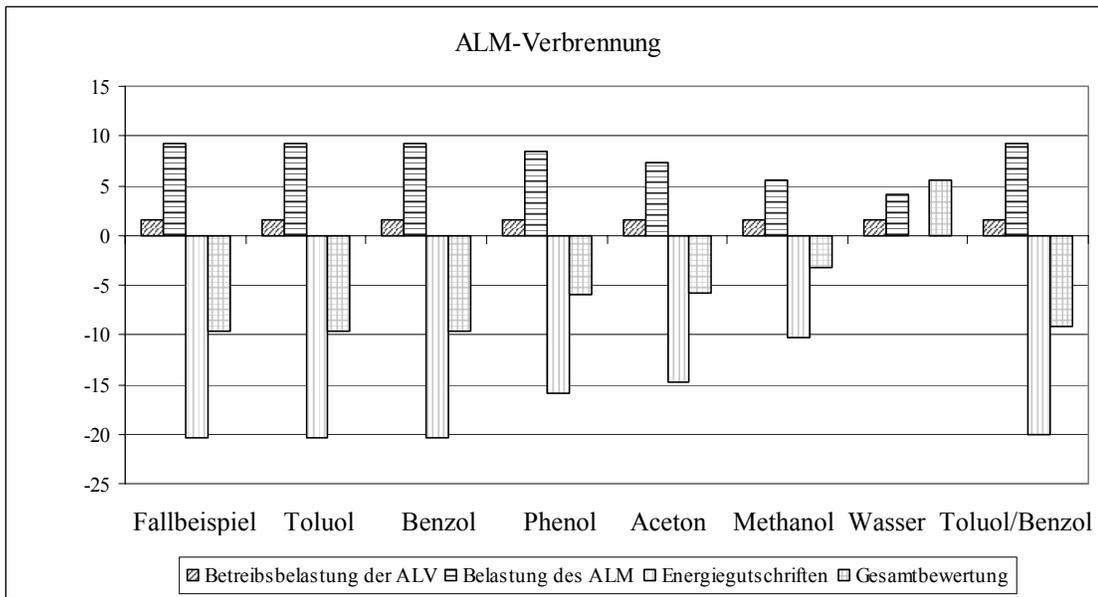


Abbildung IV-5 Bewertung der ALM-Mischungen in UBP, aufgeteilt nach ALM abhängigen und betriebsbedingten Belastungen sowie den Gutschriften durch die Energiegewinnung.

Die Bewertung der Verbrennung der ALM-Gemische zeigt, dass mit steigender Verbrennungsenthalpie auch der Wert der totalen Gutschrift für die Energiegewinnung steigt. Da mit steigender Verbrennungsenthalpie sich auch der Kohlenstoff-Gehalt (vgl. Korrelation des C-Gehaltes mit der Verbrennungsenthalpie, Anhang B3) erhöht und somit sich auch die Menge der CO₂-Emissionen vergrößert, kann geschlossen werden, dass die Verbrennungsenergie grössere Gutschriften erhält, als den CO₂-Emissionen Belastungspunkte angerechnet werden. Die Verbrennungsenthalpie eines ALM-Gemisches ist der dominierende Einflussfaktor auf die ökologische Bewertung der ALM-Verbrennung.

Tabelle IV-9 und Abb. IV-5 zeigen, dass die betriebsbedingte Belastung der ALV um Faktor 3 bis 4 geringer ist als die ALM abhängigen Belastungen. Die ALM abhängige Belastung wird hauptsächlich durch die CO₂-Emissionen verursacht. Aber die Bewertung des Wassergemisches ergibt, dass ein hoher Wasseranteil eines ALM-Gemisches auch eine wichtige Ursache der ALM abhängigen Belastung sein kann.

IV.4. Belastung der Rektifikation

IV.4.1. Analyse der Belastungsquellen

Damit die Umweltbelastung der Rektifikation der definierten ALM-Gemische (vgl. Tabelle IV-2) bestimmt werden konnte, wurde die Belastung, welche durch die Rektifikation des Fallbeispiels (Toluol-Methanol-Methyloxcarbonsäure-Wasser-Gemisch) verursacht wird, analysiert. Für die Analyse wurde nur der direkte Rektifikationsprozess einbezogen; die Belastungen und Gutschriften, welche durch die Verbrennung der Destillationsrückstände entstehen, wurden dafür hier nicht berücksichtigt. Diese werden bei der Bewertung des gesamten Szenarios miteinbezogen (vgl. Kapitel V).

Die Gesamtbelastung und die ökologischen Gutschriften wurden aufgeteilt in die Prozesse, welche zur Belastung beitragen und für die Gutschriften verantwortlich sind. Tabelle IV-10 gibt eine Übersicht über die Prozesse, welche zu Belastungspunkten und Gutschriften führen.

Tabelle IV-10 Tabelle IV-10 zeigt die Prozesse, welche für die Belastungen und Gutschriften der Rektifikation des Fallbeispiels (Toluol-Methanol-Methyloxcarbonsäure-Wasser-Mischung) verantwortlich sind. Die Umweltbelastung bezieht sich auf eine Charge ALM (13760 kg).

	Prozess	UBP	Prozentualer Anteil
Belastungen	Dampfverbrauch zur Betreibung der Kolonne	$1.49 \cdot 10^6$	56%
	Methanolverbrauch zwecks Spülung der Kolonne (500kg)	$6.6 \cdot 10^5$	25 %
	Prozessemissionen	$5 \cdot 10^5$	18 %
	Strom	$8 \cdot 10^4$	0.8%
	Stickstoff	$2 \cdot 10^4$	0.2%
	Total	$2.64 \cdot 10^6$	100%
Gutschriften	Wiedergewonnenes Lösungsmittel (Toluol)	$12.7 \cdot 10^6$	100%

Diese Untersuchung zeigt, dass der Energieverbrauch in Form von Dampf (Niederdruckdampf, 220°C, 6 bar) die weitaus grösste Belastung darstellt. Dieser Energieaufwand hängt von der ALM-Zusammensetzung ab. Die Belastung aus der Herstellung von Methanol, welches für die Reinigung der Kolonne verwendet wird, ist etwa halb so gross wie die Belastung durch den Dampf. Dennoch ist diese noch grösser als die direkten Prozessemissionen. Die Belastungen aus der Strom- und Stickstoffbereitstellung sind zwei Grössenordnungen kleiner als die Belastung durch den Dampf, womit sie auf die Gesamtbelastung nur einen sehr geringen Einfluss haben.

Das wiedergewonnene Lösungsmittel ist die einzige Gutschrift, die die Rektifikation direkt erhält. Diese Gutschrift beinhaltet die vermiedene Umweltbelastung der petrochemischen Herstellung der Lösungsmittel.

IV.4.2. Simulation der ALM-Gemische mit Aspen

Die Analyse der Rektifikation bezüglich der Belastungsursachen zeigte, dass der Dampfaufwand der wichtigste Faktor für die Belastung der Rektifikation ist. Somit muss für die definierten ALM-Gemische (vgl. Tabelle IV-2) der Dampfbedarf der Rektifikation abgeschätzt werden. Dazu wurde mit der Software Aspen Plus [21] eine Rektifikationskolonne spezifiziert, mit der die Rektifikation der ALM-Gemische simuliert wurde. Nebst dem Dampfaufwand wurde mit der Simulation auch die Ausbeute des wiedergewonnenen Lösungsmittels, dessen Reinheit und die Zusammensetzung des Destillationsrückstandes berechnet.

Für die Simulation wurde folgende Vorgehensweise gewählt: die simulierte Rektifikation des Toluol-Gemisches (Gemisch 1: Toluol-Methanol-Wasser, vgl. Tabelle IV-2) soll möglichst ähnliche Betriebsdaten wie die reale Rektifikation des Fallbeispiels (Toluol-Methanol-Methylenoxycarbonsäure-Wasser-Gemisch) im WSH aufweisen. Tabelle IV-11 zeigt die Betriebsdaten der Rektifikation im WSH [9] und die davon übernommenen Vorgaben für die simulierte Rektifikationskolonne.

Tabelle IV-11 Tabelle IV-11 zeigt die Betriebsdaten der Rektifikation im WSH und die davon übernommenen Vorgaben für die simulierte Rektifikationskolonne. 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 im WSH	Simulierte Rektifikation
Energiebedarf	t Dampf	15	15 (nur Toluol-Gemisch)
Produktausbeute	Mol %	85	80-90
Produktreinheit	Mol %	99.5	mind. 99.5
Produkt	L/Stunde	bis 1300	1000

Insbesondere musste die simulierte Rektifikation des Toluol-Gemisches auch die selbe Energie pro Charge ALM (13760 kg) benötigen, da diese gemäss der Analyse der Rektifikation die wichtigste Belastungsquelle ist. Die Energie wird vollumfänglich in Form von Dampf (Niederdruckdampf 220°C, 6 bar) bezogen, was einer Dampfmenge von 15 t entspricht [14]. Auf Grund dieser Vorgabe wurde eine Rektifikationskolonne spezifiziert, mit welcher alle ALM-Gemische rektifiziert wurden. Tabelle IV-12 zeigt die Spezifikationen der Rektifikationskolonne, wie sie mit Aspen berechnet wurde.

Die Rektifikation des Fallbeispiels im WSH wird in einem Batchprozess betrieben. Mit der Software Aspen konnten aber nur kontinuierliche Prozesse simuliert werden. Somit musste ein Batchprozess modelliert werden.

Tabelle IV-12 Tabelle IV-12 zeigt die mit Aspen Plus berechneten Spezifikationen der Rektifikationskolonne. Mit diesen Spezifikationen wurde die Trennung sämtliche ALM-Gemische berechnet.

Spezifikation der Kolonne	
Anzahl Trennstufen	10
ALM Zufluss	Stufe 10
Molares Rücklaufverhältnis	39
Eintrittstemperatur des ALM [°C]	25

Um mit der Simulation die realen Gegebenheiten im Batchreaktor anzunähern, wird im Modell das Sumpfprodukt, das die Rektifikationskolonne als Flüssigkeit verlässt, durch einen nachgeschalteten Verdampfer ebenfalls in die Gasphase gebracht. Abbildung IV-6 zeigt den schematischen Aufbau des Simulations-modelles für das Toluol-Gemisch (Mischung 1, vgl. Tabelle IV-2).

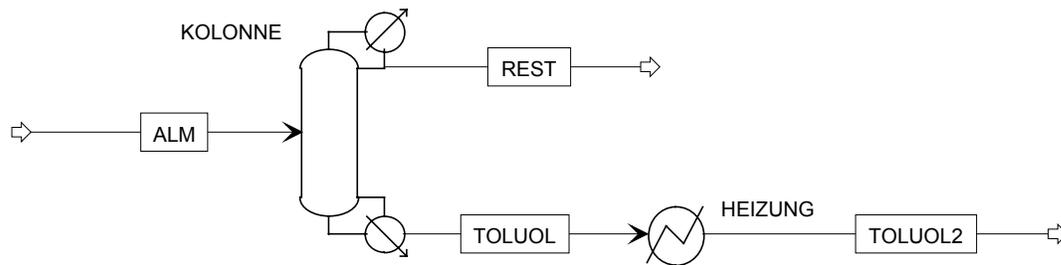


Abbildung IV-6 Modellierung der realen Batchkolonne mit einer kontinuierlichen Rektifikationskolonne in Aspen. Das Toluol wird im Modell flüssig vom Boden abgezogen. Die nachgeschaltete Heizung simuliert die Gegebenheiten im Batchreaktor, wo der gesamte Inhalt verdampft wird.

Der gesamte Energieaufwand der Rektifikation setzt sich nun aus der Energie für den Reboiler und der Energie der Heizung zusammen. Unter der Annahme, dass dem System sämtliche Energie durch Heissdampf (Niederdruckdampf) zugeführt wird, lässt sich der Dampfaufwand pro Charge ALM (13760 kg) berechnen. Die durch die Kondensation des Destillates zurückgewonnene Energie wird nicht berücksichtigt, da sie zur Unterstützung weiterer Prozesse eingesetzt wird und nicht in Umweltbelastungspunkten ausgedrückt werden kann.

Für die Simulation der ALM-Gemische wurde nun immer die selbe spezifizierte Kolonne verwendet. Falls damit bei der Trennung eines ALM-Gemisches die Vorgaben an Ausbeute und Reinheit des Produktes nicht erreicht wurden, 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. Die Abänderung von Kolonnenparametern (z.B. Anzahl Trennstufen) hat aber Auswirkungen auf die Plausibilität der Resultate. Die Ergebnisse der Simulation der ALM-Gemische mit Aspen sind in Tabelle IV-13 zusammengestellt.

Tabelle IV-13 Resultate der Simulation der ALM-Gemische mit Aspen. Mit Hilfe der Simulation wurde die Produktausbeute, die Produktreinheit, die Zusammensetzung des Destillationsrückstandes und der Energieaufwand in Form von Niederdruckdampf der ALM-Gemische berechnet.

Nr.	Produkt	Produktmenge [kg]	Ausbeute [Mass. %]	Reinheit [Mol %]	Energie [t Dampf]	Destillationsrückstand [Mass. %]	Menge [kg]
0	Toluol	11543	85.6	99.5	15	Toluol (35) MeOH (25) Methyloxycarbonsäure (40)	2650
1	Toluol	12029	89.5	>99.5	15.5	Toluol (71) MeOH (26) Wasser (3)	2231
2	Benzol	11986	89	>99.5	16.2	Benzol (72) MeOH (26) Wasser (2)	2275
3	Phenol	12001	89	>99.5	18	Phenol (77) MeOH (20) Wasser (3)	2259
4	Aceton	10923	81	>99.5	79	Aceton (69) Toluol (8) MeOH (20) Wasser (3)	1990
5	MeOH	5933	44	>99.5	96	MeOH (98) Toluol (0.5) Wasser (1.5)	8014
6	Wasser	12001	89	>99.5	61	Wasser (78) MeOH (20) Toluol (2)	2321
7	Benzol Toluol	6185 7295	98 97	99.5 99.5	75	Benzol (29) Toluol (49) MeOH (22) Wasser (0)	978

Mit Ausnahme der Fälle 4 und 5 konnten mit der spezifizierten Rektifikationskolonne die ALM-Gemische befriedigend aufgetrennt werden. Die Resultate der Reinheit, Ausbeute und der Zusammensetzung sind konsistent. Deshalb erscheinen auch die berechneten Werte für den Dampfaufwand plausibel.

Aus dem ALM-Gemisch 7 werden zwei Lösungsmittel zurückgewonnen (Toluol und Benzol). Dafür muss das ALM-Gemisch zwei Mal rektifiziert werden, was im (kontinuierlichen) Modell mit zwei aufeinander folgenden Rektifikationskolonnen simuliert wurde. Der Energiebedarf der Rektifikationen ist dabei höher als bei dem Toluol- bzw. Benzol-Gemisch (Mischungen 1 und 2), da die Produkte aus diesem ALM-Gemisch von 46% (Benzol) und 54% (Toluol) auf eine Reinheit von 99.5% rektifiziert werden.

Die Gemische 4 und 5 konnten mit der spezifizierten Modellkolonne nicht gemäss den Vorgaben (vgl. Tabelle IV-11) 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 81% liegt innerhalb der Vorgaben. Die Methanol-Mischung erreichte mit dieser Kolonnenspezifizierung ebenfalls die geforderte Produktreinheit von mindestens 99.5%, doch ist die Ausbeute mit 41% ungenügend.

Für die Rektifizierung der Methanol- und Aceton-Gemische in dieser Simulation wird sehr viel Energie gebraucht (96 bzw. 79 t Dampf / Charge). Dieser grosse Energiebedarf lässt sich erklären, indem bei beiden Gemischen die Anzahl der aufzutrennenden Moleküle sehr gross ist und diese wegen der molekularen Wechselwirkungen mit Wassermolekülen mehr Energie benötigen. Ausserdem besteht ein weiterer Unterschied der Fälle 4 und 5 gegenüber den übrigen Gemischen darin, dass die Produkte Aceton und Methanol als Destillat aus der Kolonne austreten, während die anderen Produkte aus dem Blasensumpf gewonnen werden. Die Resultate des Energieverbrauches der Fälle 4 und 5 sind somit systematisch anders berechnet worden, weshalb sie im Vergleich zu den übrigen Resultaten mit Unsicherheiten behaftet sind.

IV.4.3. Bewertung der Rektifikation der ALM-Gemische

Die Analyse (vgl. Tabelle IV-10) und die Simulation der Rektifikation der ALM-Gemische zeigen die Prozesse und deren Beiträge zur Belastungen und Gutschriften der Rektifikation. Daraus lässt sich in Anlehnung an das in Kapitel IV.3. vorgestellte Berechnungsverfahren der Bewertung der Verbrennung ebenfalls ein modular aufgebautes Berechnungsverfahren für die Rektifikation erstellen. Für jedes Modul kann die Belastung in Belastungspunkten (UBP) aus den Resultaten von SimaPro und Aspen oder auf Grund von ALM abhängigen Berechnungen erfasst werden. Die Belastungspunkte der Module werden pro Kilogramm ALM angegeben. Folgende Module wurden definiert:

1.) Grundbelastung der Rektifikation

Diese Belastung ist unabhängig von der ALM-Zusammensetzung. Sie beinhaltet vorgelagerte Prozesse wie Strom- und Stickstoffverbrauch, für die nicht eine Abhängigkeit vom Inhalt des ALM gefunden werden konnte sowie die Bereitstellung von Methanol für die Reinigung der Kolonne. Zusammen ergibt dies eine Grundbelastung der Rektifikation von 50 UBP / kg ALM.

2.) Belastung durch direkte Prozessemissionen

Die direkten Prozessemissionen der Rektifikation bestehen im wesentlichen aus VOC-Emissionen in die Luft und DOC-Emissionen ins Wasser. Auch diese werden als ALM unabhängig behandelt, da sie im Rahmen dieser Arbeit nicht zugeordnet werden können. Durch die direkten Prozessemissionen ergibt sich eine Belastung von 35 UBP / kg ALM.

3.) Belastung durch Dampfverbrauch

Die Simulation mit Aspen hat gezeigt, dass der Dampfverbrauch für die Rektifikation direkt abhängig von der ALM-Zusammensetzung ist. Ein kg Dampf (Niederdruckdampf), das aus der ALV bezogen wird, verursacht eine Belastung von 99.3 UBP.

4.) Gutschrift für die Wiedergewinnung von Lösungsmittel

Diese Gutschrift ist direkt abhängig von der Belastung durch die Herstellung des wiedergewonnenen Lösungsmittels und somit von der ALM-Zusammensetzung.

Zusammenfassend wird das modulare Berechnungsverfahren für die Abschätzung der Belastung der Rektifikation der ALM-Gemische in Abbildung IV-7 dargestellt.

Berechnungsverfahren der Umweltbelastung für 1 kg ALM durch die Rektifikation

1). Grundbelastung der Rektifikation pro kg ALM : **50 UBP**

2). Belastung durch direkte Prozessemissionen pro kg ALM: **35 UBP**

3). Belastung durch den Energieverbrauch in Form von Dampf:
pro kg Dampf aus der ALV: 99.3 UBP

4). Gutschrift für die Wiedergewinnung von Lösungsmittel:
Menge [kg] des LM pro kg ALM bestimmen * Ausbeute der Kolonne * vermiedene Belastung des Lösungsmittels (Tabellenwert)

LM	Aceton	Benzen	Methanol	Phenol	Toluol	Wasser
UBP/kg	1890	1050	420	329	1100	0.0027

Abbildung IV-7 Berechnungsverfahren für die Umweltbelastung in Umweltbelastungspunkten (UBP) der Rektifikation von 1 kg ALM. Die aufgelisteten Punkte entsprechen den obig diskutierten Modulen.

Um das Berechnungsverfahren zu illustrieren, wird die Umweltbelastung der Rektifikation des Fallbeispiels (Mischung 0, vgl. Tabelle IV-1) mit diesem Verfahren berechnet (siehe Abbildungen IV-8).

Beispielrechnung anhand des Fallbeispiels (Mischung 0):

- 1) 50 UBP
- 2) 35 UBP
- 3) $1.09 * 99.3 = 108$ UBP
- 4) $0.83 * 0.856 * 1100$ (Toluol) = -923 UBP

TOTAL: 193 UBP – 923 UBP = -730 UBP /kg ALM (SimaPro: -734 UBP)

Berechnung pro Charge ALM (13760 kg): $13760 * -730 = -10 * 10^6$ UBP

Abbildung IV-8 Berechnung der Umweltbelastung der Rektifikation des Fallbeispiels (Mischung0, vgl. Tabelle IV-1) mit dem erstellten Berechnungsverfahren.

IV.4.4. Ergebnisse der Bewertung

Für alle definierten ALM-Mischungen (vgl. Tabelle IV-2) wurde gemäss des vorgestellten Berechnungsverfahrens die Umweltbelastung durch die Rektifikation für eine Charge ALM (13760 kg) berechnet. Die Resultate sind in Tabelle IV-14 aufgeführt. Die detaillierten Berechnungen befinden sich im Anhang B2.

Tabelle IV-14 Resultate der Rektifikation von 1 Charge ALM (13760 kg), berechnet nach dem in Kapitel IV.4.3. erstellten Berechnungsverfahren. Die Tabelle IV-14 gliedert die Resultate der Belastung in ALM abhängige und betriebsbedingte Emissionen.

Nr.	Produkt	Dampf- verbrauch [UBP / 10 ⁶]	Betrieb [UBP / 10 ⁶]	Gutschrift [UBP / 10 ⁶]	Bewertung pro Charge [UBP / 10 ⁶]
0	Toluol	1.48	1.17	12.7	-10.1
1	Toluol	1.54	1.17	13.2	-10.5
2	Benzol	1.61	1.17	12.6	-9.8
3	Phenol	1.79	1.17	3.9	-0.97
4	Aceton	7.87	1.17	20.7	-11.7
5	Methanol	9.52	1.17	2.5	+8.2
6	Wasser	6.05	1.17	$32 * 10^{-6}$	+6.1
7	Benzol / Toluol	7.44	1.17	14.5	-5.9

Die Resultate der Bewertung der Rektifikation zeigen, dass die ALM bzw. Lösungsmittel abhängigen Parameter "Dampfverbrauch" und die "Belastung durch die Herstellung von Lösungsmittel" die Bewertung der Rektifikation massgeblich beeinflussen. Der Einfluss dieser Parameter wird sehr stark von der ALM-Zusammensetzung bestimmt. So reicht das Spektrum von Bewertungen, die hauptsächlich durch die Gutschriften der wiedergewonnenen Lösungsmittel zustande kommen (Toluol, Aceton) über ausgeglichene Verhältnisse (Phenol) zu solchen, die beinahe ausschliesslich aus der Belastung durch den Energieverbrauch bestehen (Methanol, Wasser).

Die fixe Belastung durch den Betrieb der Rektifikationskolonne ist immer geringer als die Belastung durch das ALM selbst. Das Verhältnis zwischen der variablen und konstanten Belastung in der Rektifikation geht von Faktor 1.3 bei Mischungen mit vergleichsweise geringem Dampfaufwand (Toluol, Benzol) bis Faktor 8 bei ALM-Gemischen mit hohem Dampfbedarf (Methanol). Dabei wird der grösste Teil der betriebsbedingten Belastung durch die Bereitstellung von Methanol für die Reinigung der Kolonne verursacht und ist deshalb keine direkten Betriebsbelastung.

IV.4.5. Verbrennung der Destillationsrückstände

Die bei der Rektifikation anfallenden Destillationsrückstände werden in der ALV verbrannt. Deshalb wurde für die ALM-Gemische die Verbrennung derer Destillationsrückstände mit dem in Kapitel IV.3. erstellten Berechnungsverfahren berechnet. Die Berechnungen sind im Anhang B1 zu finden. Die Zusammensetzung der Destillationsrückstände sind Ergebnisse der Simulation der Rektifikationskolonne mit der Software Aspen Plus (vgl. Kapitel IV.4). Die Verbrennungsenthalpie und der Kohlenstoffanteil wurde durch die Beiträge der Rückstandskomponenten berechnet. Die Resultate der Verbrennung der Destillationsrückstände sind in Tabelle IV-15 abgebildet.

Tabelle IV-15 Die Verbrennung der Destillationsrückstände der ALM-Gemische in der ALV ergibt zusätzliche Belastungen oder Gutschriften für das Systemmodell der Rektifikation. Die Resultate der Verbrennung der Destillationsrückstände sind in Tabelle IV-15 zusammengefasst. Die detaillierten Berechnungen befinden sich im Anhang B1.

Nummer	Zusammensetzung (Mass.%)	Menge [kg]	Bewertung [UBP / 10 ⁶]
0	Toluol (35) Methanol (25) Methyloxcarbonsäure (40)	2650	-1.4
1	Toluol (71) Methanol (26) Wasser (3)	2230	-1.2
2	Benzol (72) Methanol (26) Wasser (2)	2275	-1.2
3	Phenol (77) Methanol (20) Wasser (3)	2259	-0.9
4	Aceton (69) Toluol (8) Methanol (20) Wasser (3)	1990	-0.8
5	Methanol (98) Toluol (0.5) Wasser (1.5)	8014	-1.9
6	Wasser (78) Methanol (20) Toluol (2)	2321	+0.4
7	Benzol (29) Toluol (49) Methanol (22) Wasser (0)	978	-0.4

V. Synthese

V.1. Ergebnisse

Die drei Komponenten des Systemmodells - Belastung durch die ALV, Belastung durch die Rektifikation und Belastung durch die Herstellung von Lösungsmittel - wurden mit Hilfe der erarbeiteten Berechnungsverfahren und bestehender Ökoinventare von Lösungsmittel in Abhängigkeit der ALM-Zusammensetzung mit der Methode der ökologischen Knappheit bewertet. Für einen umfassenden ökologischen Vergleich der thermischen und stofflichen ALM-Verwertung sind die Resultate der Bewertung der definierten ALM-Gemische in Tabelle V-1 dargestellt. Als Basis der Bewertung wird die Menge einer Charge ALM (13760 kg) verwendet.

Tabelle V-1 In Tabelle V-1 werden die mit UBP bewerteten Szenarien ALM-Verbrennung und ALM-Rektifikation für die definierten ALM verglichen. Als Basis der Bewertung wird eine Charge ALM (13760 kg) verwendet. Das Total der funktionellen Einheit setzt sich aus den Belastungen bzw. Gutschriften der drei Teile "Herstellung von Lösungsmittel", "Verbrennung in der ALV" und "Rektifikation" zusammen.

ALM-Mischung (Nummer)	Szenario	LM-Herstellung [UBP / 10 ⁶]	Verbrennung [UBP / 10 ⁶]	Rektifikation [UBP / 10 ⁶]	Total [UBP / 10 ⁶]
Toluol (1)	Verbrennung	15	-9.6	-	5.4
	Rektifikation	15	-1.2	-10.5	3.3
Benzol (2)	Verbrennung	14.6	-9.6	-	5
	Rektifikation	14.6	-1.2	-9.8	3.6
Phenol (3)	Verbrennung	5.6	-5.9	-	-0.3
	Rektifikation	5.6	-0.9	-1	3.7
Aceton (4)	Verbrennung	23.5	-5.8	-	17.7
	Rektifikation	23.5	-0.8	-11.7	11
Methanol (5)	Verbrennung	5.4	-3.2	-	2.2
	Rektifikation	5.4	-1.9	+8.2	11.7
Wasser (6)	Verbrennung	0.2	+5.6	-	5.8
	Rektifikation	0.2	-0.4	+6.1	5.9
Toluol / Benzol (7)	Verbrennung	14.4	-9.2	-	5.2
	Rektifikation	14.4	-0.4	-5.9	8.1

V.2. Diskussion

V.2.1. Diskussion der ALM-Gemische

Toluol-Gemisch (Mischung 1):

Dieses Gemisch hat den höchsten Brennwert aller untersuchten ALM-Gemische ($\Delta H_{\text{comb}}=39.6$ MJ/kg). Dafür wird dem Toluol-Gemisch durch die Verbrennung in der ALV auch eine sehr hohe Gutschrift zugeschrieben. Da jedoch die Herstellung von Toluol mit einer hohen Umweltbelastung verbunden ist (1100 UBP/kg), übertrifft die stoffliche Gutschrift für die Wiedergewinnung des Toluols in der Rektifikation knapp die thermische Gutschrift der Verbrennung. Zusammen mit der thermischen Gutschrift der Verbrennung des Destillationsrückstandes erweist sich die Rektifikation als die ökologisch bessere Variante.

Benzol-Gemisch (Mischung 2):

Das Benzol-Gemisch verhält sich bezüglich des Systemmodells in vielerlei Hinsichten sehr ähnlich wie das Toluol-Gemisch. Da die industrielle Benzolherstellung derjenigen von Toluol weitgehend ähnelt, wird das Inventar der Benzolherstellung mit einer ähnlich hohen Umweltbelastung bewertet (1050 UBP/kg). Der Brennwert der Benzol-Mischung ($\Delta H_{\text{comb}}=39.5$ MJ/kg) ist ebenfalls vergleichbar mit demjenigen der Toluol-Mischung. Somit werden dem Benzol-Gemisch in diesem Systemmodell annähernd dieselben thermischen und stofflichen Gutschriften gegeben, was zum gleichen Ergebnis wie beim Toluol-Gemisch führt: die Verbrennung des Benzol-Gemisches verursacht eine grössere ökologische Belastung als die Rektifikation.

Phenol-Gemisch (Mischung 3):

Diese Mischung besitzt einen relativ hohen Brennwert ($\Delta H_{\text{comb}}=30.7$ MJ/kg), was zu einer grösseren Gutschrift durch die Verbrennung führt. Die stoffliche Gutschrift der Rektifikation dagegen ist sehr klein. Der Grund dafür ist einerseits der höhere Energieaufwand (18 t Dampf / Charge ALM) und die sehr geringe Umweltbelastung der Phenolherstellung (329 UBP/kg). Daher wird die Wiedergewinnung des Phenols in der Rektifikation nur mit sehr geringen Gutschriften bewertet. Somit ist die thermische Gutschrift für diese Mischung ausschlaggebend, und die Verbrennung des Phenol-Gemisches wird als die ökologisch bessere Variante bewertet. Allerdings ist es nicht nachvollziehbar, weshalb das Inventar des Phenols im Vergleich zu den Toluol- und Benzolinventaren mit einer so geringen Belastung bewertet wird. Phenol ist ein hochwertiges Raffinerieprodukt, zu dessen Herstellung mehrere Prozessstufen notwendig sind, was die Umweltbelastung erhöhen sollte.

Aceton-Gemisch (Mischung 4):

Der Brennwert der Aceton-Mischung ($\Delta H_{\text{comb}}=28.8$ MJ/kg) liegt ähnlich hoch wie derjenige des Phenolgemisches und erhält daher auch eine ähnlich hohe Gutschrift

in der Verbrennung. Die Gutschrift der Rektifikation ist aber wegen der hohen Bewertung des Aceton-Inventares (1890 UBP/kg) doppelt so gross, wie die thermische Gutschrift. Dies obwohl die Rektifizierung des Aceton-Gemisches sehr energieaufwändig ist (79 t Dampf / Charge ALM).

Methanol-Gemisch (Mischung 5):

Die ökologische Belastung durch die Herstellung von Methanol (420 UBP) ist ähnlich gering, wie diejenige des Phenols. Im Gegensatz dazu liegt der Brennwert dieser Mischung aber deutlich tiefer ($\Delta H_{\text{comb}}=20$ MJ/kg). Durch den sehr hohen Dampfbedarf der Rektifikation (96 t Dampf / Charge ALM) und die geringe Produktausbeute in der Rektifikation (44%) ergibt die Rektifikation netto eine Umweltbelastung. Somit resultiert die Verbrennung des Methanol-Gemisches als die ökologisch bessere Variante.

Wasser-Gemisch (Mischung 6):

Die Behandlung des Wasser-Gemisches ergibt bei beiden Behandlungsoptionen eine Belastung. Die Belastung durch die Verbrennung dieses Gemisches setzt sich aus der fixen, betriebsbedingten Belastung und dem zusätzlichen Heizölbedarf für die Erhitzung des Wassers auf 1200°C zusammen. Für die Rektifikation ergibt sich die Belastung aus dem hohen Dampfaufwand (61 t Dampf / Charge ALM) und daraus, dass für wiedergewonnenes Wasser keine stoffliche Gutschrift gegeben wird. In diesem Systemmodell werden beide Behandlungsoptionen als gleich belastend bewertet. Für dieses Gemisch wäre wohl die Behandlung in einer Abwasserreinigungsanlage die ökologisch wie ökonomisch sinnvollere Variante.

Toluol / Benzol-Gemisch (Mischung 7):

Dieses Gemisch unterscheidet sich lediglich bezüglich des Energieaufwandes der Rektifikation (75 t Dampf / Charge ALM) gegenüber den Mischungen 1 und 2, denn der Brennwert und die Umweltbelastung durch die Herstellung der Lösungsmittel sind gleich hoch, wie bei der Toluol- bzw. Benzolmischung. Daher wird die Rektifikation ökologisch schlechter bewertet, als bei den Mischungen 1 und 2. Der höhere Energieaufwand der Rektifikation bewirkt, dass für dieses Gemisch die Verbrennung die ökologisch bessere Variante ist.

Zusammenfassend wird in Tabelle V-2 für die ALM-Mischungen ein qualitativer Vergleich der Einflussfaktoren “stoffliche Gutschriften”, “thermische Gutschriften” und “Belastung durch den Dampfaufwand in der Rektifikation” auf die Bewertung gemacht.

Tabelle V-2 Qualitativer Vergleich der Einflussfaktoren “stoffliche Gutschriften”, “thermische Gutschriften” und “Belastung durch den Dampfaufwand in der Rektifikation” auf die Bewertung. Zeichenerklärung: ++: sehr gross +: gross -:klein --: sehr klein.

Nr.	Mischung	stoffliche Gutschriften	thermische Gutschriften	Dampfaufwand in der Rektifikation	Ökologisch bessere Behandlung
1	Toluol /Methanol/Wasser	+	++	-	Rektifikation
2	Benzol /Methanol/Wasser	+	++	-	Rektifikation
3	Phenol /Methanol/Wasser	-	+	+	Verbrennung
4	Aceton /Toluol/Wasser	++	+	++	Rektifikation
5	Methanol /Toluol/Wasser	-	-	++	Verbrennung
6	Wasser /Methanol/Toluol	--	--	++	ausgeglichen
7	Benzol/Toluol /Wasser	+	++	+	Verbrennung

V.2.2. Schlussfolgerungen

ALM abhängige und betriebsbedingte Belastungen

Sowohl die Resultate der Verbrennung der ALM-Gemische (vgl. Tabelle IV-9) als auch diejenigen der Rektifikation (vgl. Tabelle IV-14) haben gezeigt, dass die ALM-Zusammensetzung einen grösseren Einfluss auf die Belastung hat, als die betriebsbedingten Belastungen. Bei der Verbrennung sind die ALM abhängigen Belastungen der ALM-Gemische um Faktor 3 bis 4 grösser. Eine Ausnahme ist das Wasser-Gemisch. Weil durch die Verbrennung des Wassers direkt kein CO₂ entsteht, ist bei diesem Gemisch diese ALM abhängige Belastung nicht wichtig. Die Verbrennung von Heizöl zur Verdampfung des Wassers verursacht aber indirekte CO₂-Emissionen, welche um Faktor 2 grösser als die Betriebsemissionen sind. In der Rektifikation sind die ALM abhängigen Belastungen, für die massgeblich der Dampfaufwand verantwortlich ist, zwischen 2 und 8 Mal grösser als die betriebsbedingten Belastungen.

Dominierende Parameter des Systemmodells

Die Diskussion der ALM-Gemische (Kapitel V.2.1.) hat gezeigt, dass die ökologische Bewertung in diesem Systemmodell massgeblich durch drei Parameter bestimmt wird:

- Belastung durch die Herstellung von Lösungsmittel (Lösungsmittelinventare)
- Gutschriften der Verbrennung (Heizwert des ALM)
- Gutschriften der Rektifikation (Lösungsmittelinventare und Energieaufwand der Rektifikation)

In speziellen Fällen wird diese Aussage relativiert. So haben die Gutschriften bei der Bewertung des Wasser-Gemisches keinen wichtigen Einfluss. Die Herstellung von Wasser verursacht keine nennenswerte Umweltbelastung. Somit hat der Parameter "Lösungsmittelinventar" keine Bedeutung. Zudem ergeben sich wegen des niedrigen Heizwertes des Wasser-Gemisches keine thermischen Gutschriften. Daher bestimmen der Energieaufwand der Rektifikation und der Energieaufwand für die Verdampfung des Wassers in der Verbrennung für dieses Gemisch die Bewertung. Wenn aber ALM, welche Lösungsmittel beinhalten, deren Bewertung des Ökoinventars eine Umweltbelastung ergibt, betrachtet werden und es sich um organische Lösungsmittel handelt (Brennwert), bestimmen die obig aufgezählten Parameter die Bewertung.

Bedeutung der Lösungsmittelinventare

Mit der Auswahl der ALM-Gemische wurde eine grosse Variation der Einflussparameter erreicht. So variiert der Brennwert der Mischungen von beinahe 0 (Wasser) bis etwa 40 MJ/kg (Toluol). Der Dampfaufwand schwankt zwischen 15 und 96 Tonnen pro Charge und die Belastung der Herstellung der Lösungsmittel geht von Wasser bis zu hochwertigen petrochemischen Produkten. Damit gibt es für alle Parameter auch Mischungen in denen sie Extremwerte annehmen.

Die Einflüsse der Parameter auf die Bewertung sind aber unterschiedlich. So ist die ökologisch günstigere Behandlung der Toluol- und Benzol-Mischungen die Rektifikation, obwohl diese wegen der hohen Brennwerte maximale Gutschriften aus der Verbrennung erhalten. Für die Methanol- und Phenol Mischung ist die Verbrennung aus ökologischer Sicht vorzuziehen. Für diese Mischungen werden in der Verbrennung aber nur kleine Gutschriften oder sogar eine zusätzliche Belastungen gegeben. Somit kann geschlossen werden, dass der Einfluss des Brennwertes auf die gesamte Bewertung klein ist. Um den Einfluss des Dampfaufwandes und der stofflichen Gutschriften zu untersuchen, können die Aceton- und Methanolgemische betrachtet werden. Beide haben einen sehr hohen Dampfaufwand in der Rektifikation. Da für die Wiedergewinnung von Aceton im Gegensatz zu Methanol sehr hohe Gutschriften gegeben werden, wird die Rektifikation besser bewertet als die Verbrennung. Das Methanol-Gemisch erhält kleine stoffliche Gutschriften. Trotz der ebenfalls geringen thermischen Gutschriften ist die Verbrennung ökologisch besser. Auf Grund dieses Sachverhaltes kann geschlossen werden, dass die stofflichen Gutschriften im Vergleich zum Dampfaufwand einen wichtigeren Einfluss auf die Bewertung haben.

Betrachtet man die absoluten Einflüsse der Parameter in Belastungspunkten, so wird die Wichtigkeit der Lösungsmittelinventare noch deutlicher. Die maximale Differenz der Belastungspunkte innerhalb der 7 Gemische liegt für den Brennwert und den Energieaufwand der Rektifikation bei zirka $7 \cdot 10^6$ UBP, während die Belastung durch die Herstellung der Lösungsmittel zwischen 0 und $24 \cdot 10^6$ UBP liegt.

Für die Lösungsmittel, deren Herstellung grosse Umweltbelastungen ergeben (Aceton, Toluol, Benzol) ist die Rektifikation die ökologisch bessere ALM-Behandlungsoption. Stammt also das bei der Rektifikation eingesparte Lösungsmittel aus einem aufwändigen chemischen Herstellungsprozess, so ist diese – aus Sicht der Ökobilanz – der Verbrennung vorzuziehen.

V.3. Evaluation der Methode

V.3.1. Unsicherheiten der wichtigsten Einflussparameter

Lösungsmittelinventare

Die Resultate zeigen, dass den Inventaren der Lösungsmittel eine zentrale Bedeutung zukommt. Diese weisen je nach Quelle sehr starke Unterschiede auf, was sich natürlich einschneidend auf die Gesamtbewertung auswirkt. Deshalb wurde versucht, für die ALM-Gemische möglichst Inventare aus der gleichen Quelle zu verwenden, damit diese Unterschiede weniger gross sind. Das Phenol-Inventar beispielsweise stammt aus einer anderen Quelle als die Toluol/Benzol Inventare. Dies ist möglicherweise der Grund, weshalb es zu diesen Unterschieden der Belastungen durch die Lösungsmittelherstellung kommt. Die Vergleichbarkeit der Lösungsmittelinventare ist die Grundproblematik dieses Systemmodelles. Deshalb sollte für zukünftige Arbeiten auf diesem Gebiet dem Aufbau der Lösungsmittelinventare besonders Rechnung getragen werden.

Dampfverbrauch

Der Dampfverbrauch der ALM-Gemische wurde mit Hilfe von Prozesssimulationen mit der Software Aspen [22] errechnet. Diese Simulationen müssten noch weiter verbessert werden. So würde man mit der direkten Simulation einer Batchkolonne Resultate erhalten, die besser gesichert wären. Die Simulation des Methanol-Gemisches zeigt, dass dieser Fall im Speziellen besser simuliert werden müsste, da mit der in dieser Arbeit verwendeten Simulation das Gemisch mit einer so geringen Produktausbeute rektifiziert wird, wie sie in realen Systemen nicht vorkommt. Die Resultate von Prozesssimulationen sollten mit Hilfe von Literaturwerten bzw. Expertenmeinungen auf ihre Plausibilität hin geprüft werden.

Heizwert

Der Heizwert der untersuchten ALM-Gemische konnte mittels Literaturdaten zuverlässig ermittelt werden. Sollten ALM-Gemische mit speziellen Komponenten betrachtet werden, so kann der Heizwert mittels der in Kapitel IV.3.2. vorgeschlagenen Korrelation der Verbrennungsenthalpie mit dem Kohlenstoffgehalt angenähert werden. Für ALM-Gemische, welche Substanzen mit vielen Heteroatomen beinhalten, müsste jedoch diese Korrelation verbessert werden oder auf andere Abschätzmethoden ausgewichen werden.

V.3.2. Weitere Unsicherheiten

ALM-Zusammensetzung

Die Verfahren zur Berechnung der Belastungen bzw. Gutschriften in der ALV und Rektifikation entstanden durch die Analyse des durchschnittlichen ALM und des Fallbeispiels. Daraus ging hervor, dass die Belastungen und Gutschriften hauptsächlich durch die Freisetzung oder Einsparung von Energie bestimmt wird. Die Berechnungsverfahren sind also so ausgelegt, dass sie die Energieumsetzungen in den Behandlungsszenarien in Belastungspunkte ausdrücken können. Sie können damit aber andere ökologische Einflussgrößen, wie beispielsweise Schwermetalle oder Halogene, nicht umfassend erfassen und sind deshalb für ALM-Gemische mit solchen Inhaltsstoffen nicht geeignet.

Einfluss der Methodenwahl

Die Wahl der Methode kann die Konsistenz der Modellierung stark beeinflussen. Nach der gewählten Methode der ökologischen Knappheit spielen die Emissionen CO_2 , SO_x und NO_x sowie die Bewertung des Ressourcenverbrauches die zentrale Rolle. Die Analysen der Verbrennung und Rektifikation haben gezeigt, dass die Methode Eco-Indicator 99 im wesentlichen die gleichen Faktoren für die Bewertung der Belastung gewichtet. Der Ressourcenverbrauch würde allerdings stärkeres Gewicht bekommen, was die Rektifikation gegenüber der Verbrennung noch stärker favorisieren würde.

VI. Literaturverzeichnis

- [1] Bruder, C. 2000. Abfalllösungsmittelmanagement in der chemisch-pharmazeutischen Industrie. Diplomarbeit, erstellt in der Gruppe Umwelt- und Sicherheitstechnologie. ETH Zürich.
- [2] Frischknecht, R., U. Bollens, S. Bosshard, M. Ciot, L. Ciseri, G. Doka, R. Hirschler, 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, ETH Zürich; Paul Scherrer Institut, Villigen/Würenlingen.
- [3] Hellweg, S., T. Hofstetter, and K. Hungerbühler. 2001. Modeling waste incineration for life-cycle inventory analysis in Switzerland, *Environmental Modeling and Assessment* 6: 219-235.
- [4] Vauck, W., and H. Müller. 1988. Grundoperationen chemischer Verfahrenstechnik, 7. edition. VCH, New York.
- [5] Badertscher, B. 2001. Valorec Services AG. Persönliches Gespräch.
- [6] Der Schweizerische Bundesrat. 1985. Luftreinhalte-Verordnung (LRV), SR, vol. 814.318.142.1.
- [7] Valorec Services AG. 2001. Recycling and Solvent-Center Jahresbericht 2000.
- [8] Valorec Services AG. 2001. ALV Jahresbericht 2000.
- [9] Ciba-Geigy AG. 1995. Betriebsvorschrift Toluol wg.dest. aus 8623.
- [10] Jahn, C., and T. Hofstetter. 2000. Abfalllösungsmittelbewirtschaftung in der chemischen Industrie. Zwischenbericht zu Handen des BfE Projekt 31239, Vertrag 71186, erstellt in der Gruppe Umwelt- und Sicherheitstechnologie. ETH Zürich.
- [11] Valorec Services AG. 2001. ALV-2 (Abfall-Lösungsmittel-Verwertungsanlage 2). Vivendi Environnement.
- [12] Der Schweizerische Bundesrat. 1998. Gewässerschutz-Verordnung (GSchV), SR, vol. 814.201.
- [13] Begleitgruppensitzung. 2000. Protokoll vom 17. August 2000. ETH Zürich.
- [14] Valorec AG. 1999. ALV Jahresbericht 1998.

- [15] Pré Consultants. 2001. SimaPro, 5 edition, Amersfoort.
- [16] BUWAL. 1998. Bewertung von Ökobilanzen mit der Methode der ökologischen Knappheit - Ökofaktoren 1997. SRU Nr. 297. Bundesamt für Umwelt, Wald und Landschaft (BUWAL).
- [17] 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.
- [18] Unger, R. 2001. Valorec Services AG. Persönliches Gespräch.
- [19] Sorensen, J. M., and W. Arlt. 1981. Liquid-Liquid Equilibrium Data Collection - Ternary Systems, vol. V Part 2. Dechema - Deutsche Gesellschaft für chemisches Apparatewesen.
- [20] Sorensen, J. M., and W. Arlt. 1981. Liquid-Liquid Equilibrium Data Collection - Binary Systems, vol. V Part 1. Dechema - Deutsche Gesellschaft für chemisches Apparatewesen.
- [21] McGraw-Hill. Chemical Properties Handbook, 1st edition.
- [22] Aspen Technologie Inc. 2001. Aspen Plus, 10.2 edition.
- [23] Aegerter, D. Valorec Services AG. Persönliches Gespräch.

VII. Anhang

Teil A: Stoffdaten und Umrechnungen

Stoffdaten der verwendeten LM

Substanz	Toluol	Methanol	Wasser	Aceton	Phenol	Benzol	Methylox-carbonsäure
CAS-Nr.	108-88-3	67-56-1	7732-18-5	67-64-1	108-95-2	71-43-2	501-97-3
Summenformel	C ₇ H ₈	CH ₄ O	H ₂ O	C ₃ H ₆ O	C ₆ H ₆ O	C ₆ H ₆	C ₉ H ₁₀ O ₃
MW	92	32	18	58	94	78	166
Siedepunkt [°C]	110.63	64.55	100	56.07	181.84	80.09	
Dichte [g/L]	867	790	1000	786	1070	879	863 ¹
Verbrennungs-enthalpie [MJ/kg]	40.5	19.9	0	28.6	31	40.1	32 ²
%C	91	37.5	0	62	76	92	65

Umrechnungen der Energieinhalte von Dampf

1 Tonne Hochdruckdampf (45 bar/475°C) = 3382 MJ = 0.939 MWh

1 Tonne Niederdruckdampf (6 bar/220°C) = 2895 MJ = 0.897 MWh

(aus [14])

¹ berechnet aus Rektifikationsunterlagen

² abgeschätzt

Teil B: Berechnungen zu den ALM-Gemischen

B1: Berechnungen zur ALV

Die Berechnungen der Umweltbelastung (UBP) werden gemäss des in Kapitel IV.3 (Abbildung IV-2) erstellten Berechnungsverfahrens gemacht. Die aufgelisteten Punkte 1 bis 5 entsprechen den im Berechnungsverfahren verwendeten Modulen.

Fallbeispiel

Substanz	SF	Menge [kg]	Verbrennungsenth. [MJ/kg]	%C
Toluol	C7H8	13485	40.5	91
Methanol	CH4O	69	19.9	37.5
Methyloxcarbonsäure	C9H10O3	138	32 (Schätzung)	65
Wasser	H2O	69	0	0
Total / Durchschnitt (gewichtet)		13760	39.6	90

Berechnung

- 1) +110 UBP
- 2) +2 UBP
- 3) +0
- 4) $0.9 \text{ kgC} * 3.67 = 3.3 \text{ kg CO}_2 * 202 = +667 \text{ UBP}$
- 5) -1484 UBP

TOTAL: 779 UBP – 1484 UBP = -705 UBP

Rektifikationsrückstand Fallbeispiel

Substanz	SF	Menge [kg]	Verbrennungsenth.	%C
Toluol	C7H8	928	40.5	91
Methanol	CH4O	662	19.9	37.5
Methyloxcarbonsäure	C9H10O3	1060	32	65
Total / Durchschnitt (gewichtet)		2650	32	67

Berechnung

- 1) + 110 UBP
- 2) + 50 UBP
- 3) +0
- 4) $0.67 * 3.67 = 2.5 \text{ kg CO}_2 * 202 = +497 \text{ UBP}$
- 5) -1200 UBP

TOTAL: 657 UBP – 1200 UBP = -543 UBP

ALM-Gemisch 1: Toluol-Methanol-Wasser

Substanz	SF	Menge [kg]	Verbrennungsenth. [MJ/kg]	%C
Toluol	C7H8	13440	40.5	91
Methanol	CH4O	301	19.9	37.5
Wasser	H2O	20	0	0
Total / Durchschnitt (gewichtet)		13761	39.6	90

Berechnung:

- 1) +110 UBP
- 2) +2 UBP
- 1) +0
- 2) $0.9 \cdot 3.67 = 3.3 \cdot 202 = 667$ UBP
- 3) $39.5 \cdot 37.5 = -1481$ UBP

TOTAL: 779 UBP – 1481 = -702 UBP

Rektifikationsrückstand ALM-Gemisch 1

Substanz	SF	Menge [kg]	Verbrennungsenth. [MJ/kg]	%C
Toluol	C7H8	1411	40.5	91
Methanol (inkl. Spülung 500kg)	CH4O	800	19.9	37.5
Wasser	H2O	20	0	0
Total / Durchschnitt (gewichtet)		2231	33	71

Berechnung:

- 1) +110 UBP
- 2) +44 UBP
- 3) +0
- 4) $0.75 \cdot 3.67 = 2.75 \cdot 202 = 525$ UBP
- 5) $0.01 \cdot 5.1 = 0.051 \cdot 33 = -32.9 \cdot 37.5 = -1233$ UBP

TOTAL: 679 UBP – 1233 = -554 UBP

ALM-Gemisch 2: Benzol-Methanol-Wasser

Substanz	SF	Menge [kg]	Verbrennungsenth. [MJ/kg]	%C
Benzol	C6H6	13467	40.1	92
Methanol	CH4O	268	19.9	37.5
Wasser	H2O	26	0	0
Total / Durchschnitt (gewichtet)		13761	39.5	90.8

Berechnung:

- 1) +110 UBP
- 2) +2 UBP
- 3) +0
- 4) $0.91 \cdot 3.67 = 3.3 \cdot 202 = 675$ UBP
- 5) $39.5 \cdot 101 = -1484$ UBP

TOTAL: 787 UBP – 1484 = -697 UBP

Rektifikationsrückstand ALM-Gemisch 2

Substanz	SF	Menge [kg]	Verbrennungsenth. [MJ/kg]	%C
Benzol	C6H6	1481	40.1	92
Methanol (inkl. Spülung 500kg)	CH4O	768	19.9	37.5
Wasser	H2O	26	0	0
Total / Durchschnitt (gewichtet)		2275	33	76

Berechnung:

- 1) +110 UBP
- 2) + 44 UBP
- 3) +0
- 4) $0.76 \cdot 3.67 = 2.8 \cdot 202 = 563 \text{ UBP}$
- 5) $0.01 \cdot 5.1 \cdot 33 \cdot 37.5 = -1238$

TOTAL: 717 UBP – 1238 = -521 UBP

ALM-Gemisch 3: Phenol-Methanol-Wasser

Substanz	SF	Menge [kg]	Verbrennungsenth. [MJ/kg]	%C
Phenol	C6H6O	13485	31	76
Methanol	CH4O	248	19.9	37.5
Wasser	H2O	28	0	0
Total / Durchschnitt (gewichtet)		13761	30.7	75

Berechnung:

- 1) +110 UBP
- 2) +59 UBP
- 3) +0
- 4) $0.75 \cdot 3.67 = 2.75 \cdot 202 = 556 \text{ UBP}$
- 5) $30.68 \cdot 37.5 = -1151 \text{ UBP}$

TOTAL: 725 UBP – 1151 = -426 UBP

Rektifikationsrückstand ALM-Gemisch 3

Substanz	SF	Menge [kg]	Verbrennungsenth. [MJ/kg]	%C
Phenol	C6H6O	1483	31	76
Methanol (inkl. Spülung 500kg)	CH4O	748	19.9	37.5
Wasser	H2O	28	0	0
Total / Durchschnitt (gewichtet)		2259	27	66

Berechnung:

- 1) +110 UBP
- 2) +5 UBP
- 3) +0
- 4) $0.66 \cdot 3.67 = 2.4 \cdot 202 = 489 \text{ UBP}$
- 5) -1012 UBP

TOTAL: 604 UBP – 1012 = -408 UBP

ALM-Gemisch 4: Aceton-Toluol-Wasser

Substanz	SF	Menge [kg]	Verbrennungsenth. [MJ/kg]	%C
Aceton	C3H6O	13485	28.6	62
Toluol	C7H8	248	40.5	91
Wasser	H2O	28	0	0
Total / Durchschnitt (gewichtet)		13761	28.8	63

Berechnung:

- 1) +110 UBP
- 2) +71 UBP
- 3) +0
- 4) $0.63 \cdot 3.67 = 2.28 \cdot 202 = 467$ UBP
- 5) $28.7 \cdot 37.5 = -1079$ UBP

TOTAL: 648 UBP – 1079 = -431 UBP

Rektifikationsrückstand ALM-Gemisch 4

Substanz	SF	Menge [kg]	Verbrennungsenth. [MJ/kg]	%C
Aceton	C6H6	1214	28.6	62
Toluol	C7H8	248	40.5	91
Methanol aus Spülung	CH4O	500	19.9	37.5
Wasser	H2O	28	0	0
Total / Durchschnitt (gewichtet)		1990	27	58

Berechnung:

- 1) +110 UBP
- 2) +82 UBP
- 3) +0
- 4) $0.58 \cdot 3.67 = 2.1 \cdot 202 = 430$ UBP
- 5) -1012 UBP

TOTAL: 622 UBP – 1012 = -390 UBP

ALM-Gemisch 5: Methanol-Toluol-Wasser

Substanz	SF	Menge [kg]	Verbrennungsenth. [MJ/kg]	%C
Methanol	CH4O	13485	19.9	37.5
Toluol	C7H8	248	40.5	91
Wasser	H2O	28	0	0
Total / Durchschnitt (gewichtet)		13761	20	38

Berechnung:

- 1) +110 UBP
- 2) +127 UBP
- 3) +0
- 4) $0.38 \cdot 3.67 = 1.4 \cdot 202 = 282$ UBP
- 5) $19.9 \cdot 37.5 = -750$ UBP

TOTAL: 519 UBP – 750 = -231 UBP

Rektifikationsrückstand ALM-Gemisch 5

Substanz	SF	Menge [kg]	Verbrennungsenth. [MJ/kg]	%C
Toluol	C7H8	2	40.1	92
Methanol (inkl. Spülung 500kg)	CH4O	7984	19.9	37.5
Wasser	H2O	28	0	0
Total / Durchschnitt (gewichtet)		8014	20	37.5

Berechnung:

- 1) +110 UBP
- 2) +127 UBP
- 3) 0
- 4) $0.38 \cdot 3.67 = 1.38 \cdot 202 = 278$ UBP
- 5) -750 UBP

TOTAL: 515 UBP - 750 = -235 UBP

ALM-Gemisch 6: Wasser-Methanol-Toluol

Substanz	SF	Menge [kg]	Verbrennungsenth. [MJ/kg]	%C
Wasser	H ₂ O	13414	0	0
Methanol	CH ₄ O	339	19.9	37.5
Toluol	C ₇ H ₈	7	40.5	91
Total / Durchschnitt (gewichtet)		13760	0.5	0.8

Berechnung:

- 1) +110 UBP
- 2) +252 UBP
- 3) +0
- 4) $0.01 \cdot 3.67 = 0.04 \cdot 202 = 7$ UBP
- 5) $4.7 = +37.25$ UBP

TOTAL: 406 UBP

Rektifikationsrückstand ALM-Gemisch 6

Substanz	SF	Menge [kg]	Verbrennungsenth. [MJ/kg]	%C
Wasser	H ₂ O	1475	0	0
Methanol (inkl. Spülung 500kg)	CH ₄ O	839	19.9	37.5
Toluol	C ₇ H ₈	7	40.5	91
Total / Durchschnitt (gewichtet)		2321	7.3	14

Berechnung:

- 1) +110 UBP
- 2) +208 UBP
- 3) +0
- 4) $0.014 \cdot 3.67 \cdot 202 = 10$ UBP
- 5) $-0.64 \cdot 5.1 - 7.3 \cdot 37.5 = -151$ UBP

TOTAL: 328 UBP - 151 = +177 UBP

ALM-Gemisch 7: Benzol-Toluol-Wasser

Substanz	SF	Menge [kg]	Verbrennungsenth. [MJ/kg]	%C
Benzol	C ₆ H ₆	6311	40.1	92
Toluol	C ₇ H ₈	7444	40.5	91
Wasser	H ₂ O	66	0	0
Total / Durchschnitt (gewichtet)		13761	39	91

Berechnung:

- 1) +110 UBP
- 2) +6 UBP
- 3) +0
- 4) $0.91 \cdot 3.67 \cdot 202 = 675$ UBP
- 5) 1460 UBP

TOTAL: 781 UBP – 1460 = -666 UBP

Rektifikationsrückstand ALM-Gemisch 7

Substanz	SF	Menge [kg]	Verbrennungsenth. [MJ/kg]	%C
Benzol	C6H6	189	40.1	92
Toluol	C7H8	223	40.5	91
Methanol (inkl. Spülung 500kg)	CH4O	500	19.9	37.5
Wasser	H2O	66	0	0
Total / Durchschnitt (gewichtet)		978	27	58

Berechnung: +110 UBP

- 1) +82 UBP
- 2) +0
- 3) $0.58 \cdot 3.67 \cdot 202 = 430$ UBP
- 4) $0.07 \cdot 5.1 \cdot 27 \cdot 37.5 = -1012$ UBP

TOTAL: 622 UBP – 1012 = -390 UBP

B2: Berechnungen zur Rektifikation

Die Berechnungen der Umweltbelastung (UBP) werden gemäss des in Kapitel IV.4 (Abbildung IV-7) erstellten Berechnungsverfahrens gemacht. Die aufgelisteten Punkte 1 bis 4 entsprechen den im Berechnungsverfahren verwendeten Modulen.

Fallbeispiel (Mischung 0)

- 1) 50 UBP
 - 2) 35 UBP
 - 3) $1.09 * 99.3 = 108$ UBP
 - 4) $0.98 * 0.856 * 1100$ (Toluol) = -923 UBP
- TOTAL: 193 UBP - 923 UBP = -730 UBP Resultat aus Simapro: -734 UBP
 Berechnung pro Charge ALM (16000l) : $13761 * -730 = -10.1$ E6 UBP

ALM-Gemisch 1: Toluol-Methanol-Wasser

- Berechnung für 1 kg ALM:
- 1) +50 UBP
 - 2) +35 UBP
 - 3) $+(15.5/13.76)*99.3=112$ UBP
 - 4) $-0.87*1100= 961$ UBP
- TOTAL: 193.9 UBP - 961 UBP = -764 UBP
 Berechnung pro Charge ALM (13760 kg) : $13760 * -764 = -10.5$ E6 UBP

ALM-Gemisch 2: Benzol-Methanol-Wasser

- Berechnung für 1 kg ALM:
- 1) +50 UBP
 - 2) +35 UBP
 - 3) $+(16.2/13.7)*99.3=117$ UBP
 - 4) $0.87*1050$ (Benzol)= 914 UBP
- TOTAL: 202 UBP - 914 UBP = -712 UBP
 Berechnung pro Charge ALM (13760 kg) : $13760 * 712 = -9.8$ E6 UBP

ALM-Gemisch 3: Phenol-Methanol-Wasser

- Berechnung für 1 kg ALM:
- 1) +50 UBP
 - 2) +35 UBP
 - 3) $+(18/13.76)*99.3=130$ UBP
 - 4) $-0.87*329$ (Phenol)= 286 UBP
- TOTAL: 215 UBP - 286 UBP = -71 UBP
 Berechnung pro Charge ALM (13760 kg) : $13760 * -71 = -0.97$ E6 UBP

ALM-Gemisch 4: Aceton-Toluol-Wasser

- Berechnung für 1 kg ALM:
- 1) +50 UBP
 - 2) +35 UBP
 - 3) $+(79/13.7)*99.3=572$ UBP
 - 4) $0.8*1890$ (Aceton)= 1507 UBP
- TOTAL: 657 UBP - 1507 UBP = -850 UBP
 Berechnung pro Charge ALM (13760 kg) : $13760 * -850 = -11.7$ E6 UBP

ALM-Gemisch 5: Methanol-Toluol-Wasser

Berechnung für 1 kg ALM:

- 1) +50 UBP
- 2) +35 UBP
- 3) $+(96/13.76)*99.3=692$ UBP
- 4) $-0.43*420$ (Methanol)= 181 UBP

TOTAL: 777 UBP – 181 UBP = 596 UBP

Berechnung pro Charge ALM (13769 kg) : $13760*596 = +8.2$ E6 UBP

ALM-Gemisch 6: Wasser-Methanol-Toluol

Berechnung für 1 kg ALM:

- 1) +50 UBP
- 2) +35 UBP
- 3) $+(61/13.76)*99.3=440$ UBP
- 4) $-0.87*0.0027$ (Wasser)= 0 UBP

TOTAL: 440 UBP – 0 UBP = +440 UBP

Berechnung pro Charge ALM (13760 kg) : $13760*440 = +6.1$ E6 UBP

ALM-Gemisch 7: Benzol-Toluol-Wasser

Berechnung für 1 kg ALM:

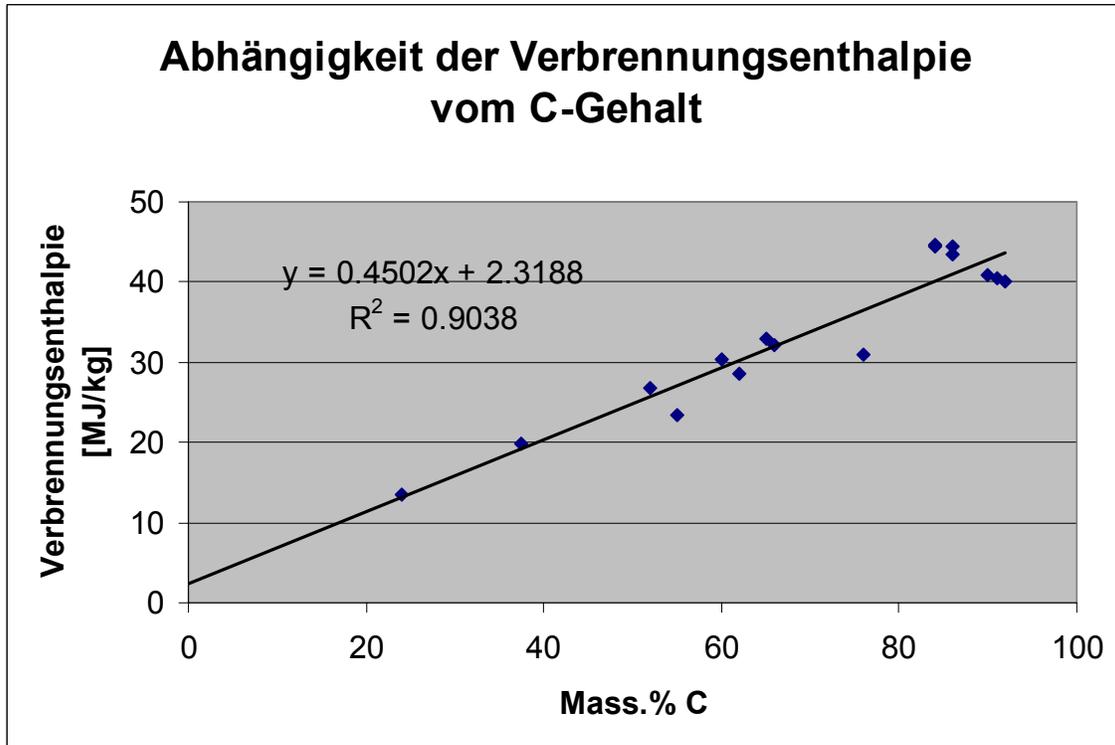
- 1) +50 UBP
- 2) +35 UBP
- 3) $+(75/13.76)*99.3=541$ UBP
- 4) $-0.45*1050$ (Benzene) = 472 + $0.53*1100$ (Toluol) = 583 = 1055 UBP

TOTAL: 626 UBP – 1055 UBP = -429 UBP

Berechnung pro Charge ALM (13760 kg) : $13760*-429 = -5.9$ E6 UBP

B3: Verbrennungsenthalpie und C-Gehalt

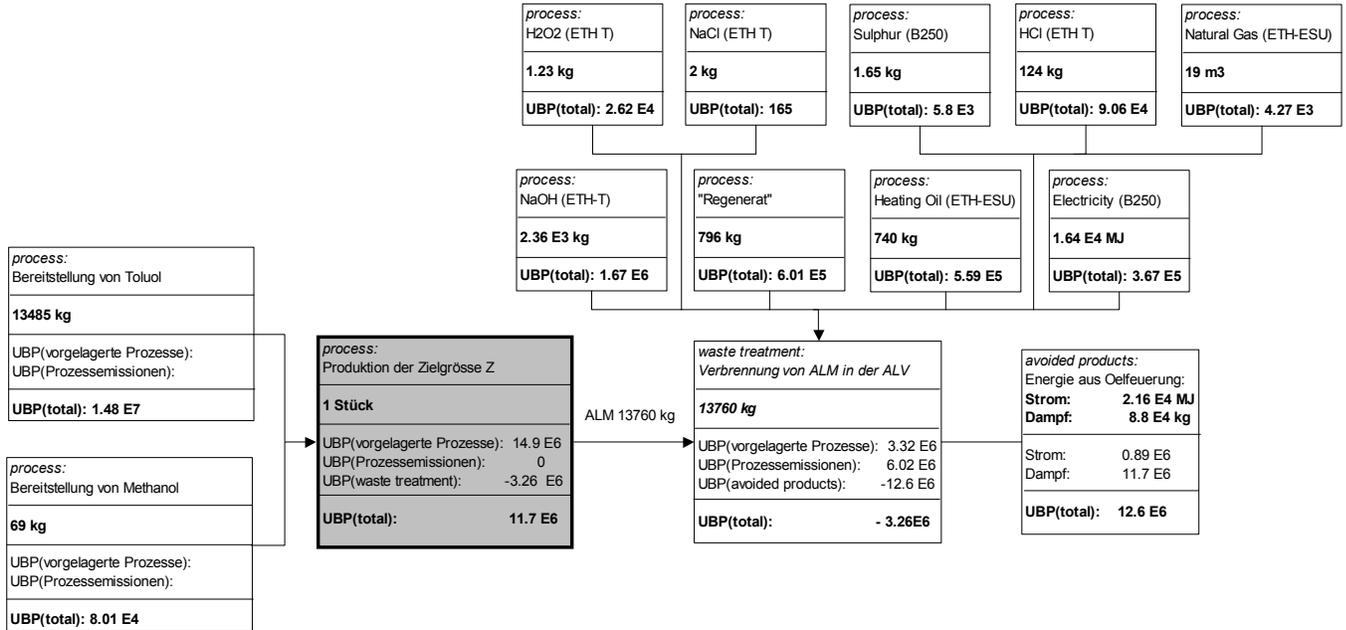
Substanz	SF	MW	%C	Enthalpy of combustion [MJ/kg]
Methanol	CH4O	32	37.5	19.9
Ethanol	C2H6O	46	52	26.8
Isopropanol	C3H8O	60	60	30.4
2-Butanol	C4H10O	74	65	32.9
Phenol	C6H6O	94	76	31
Benzol	C6H6O	78	92	40.1
Toluol	C7H8	92	91	40.5
1-Hexen	C6H12	84	86	44.4
Cyclohexan	C6H12	84	86	43.4
n-Hexan	C6H14	86	84	44.7
n-Heptan	C7H16	100	84	44.5
Aceton	C3H6O	58	62	28.6
Xylol	C8H10	106	90	40.8
Tetrahydrofuran	C4H8O	72	66	32.2
Methylenchlorid	CH3CL	50.5	24	13.4
Ethylacetat	C4H8O2	88	55	23.4



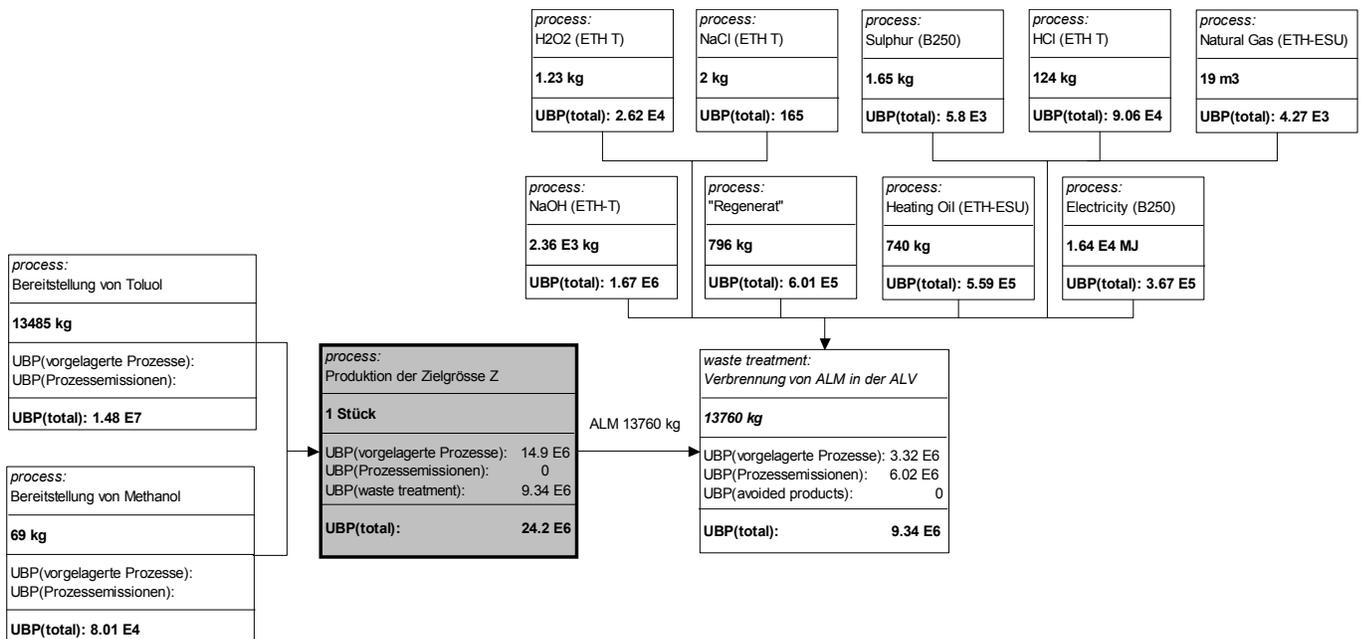
Teil C: Rohdaten der Resultate aus SimaPro

Die in den Abbildungen verwendeten Begriffe für die Prozesse stammen alle aus SimaPro.

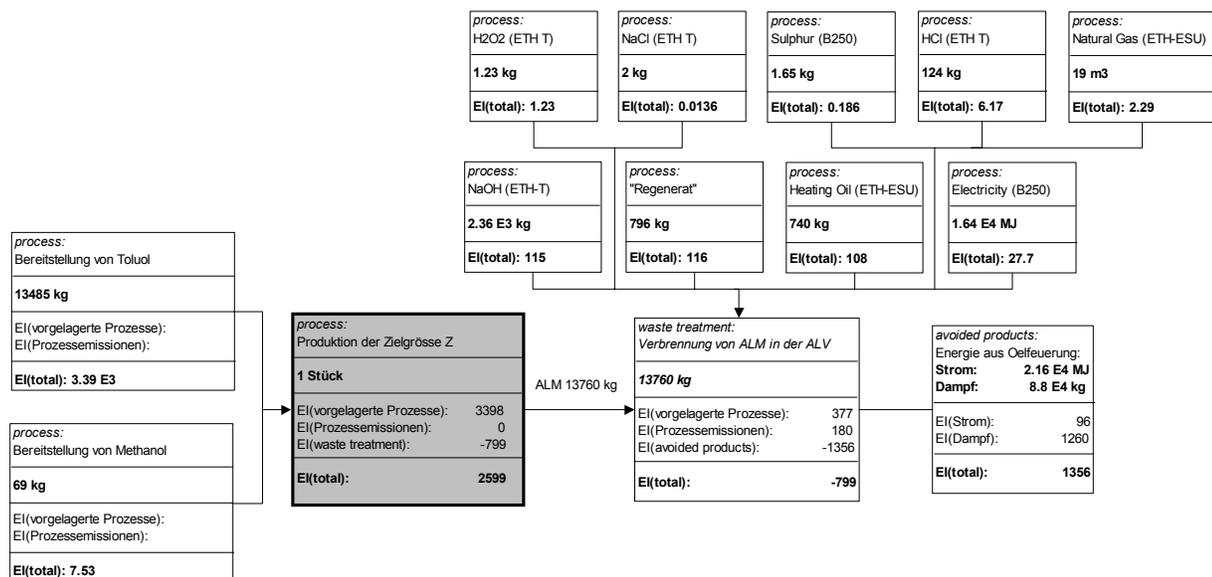
ALM-Verbrennung in der ALV mit Energiegutschriften [UBP]



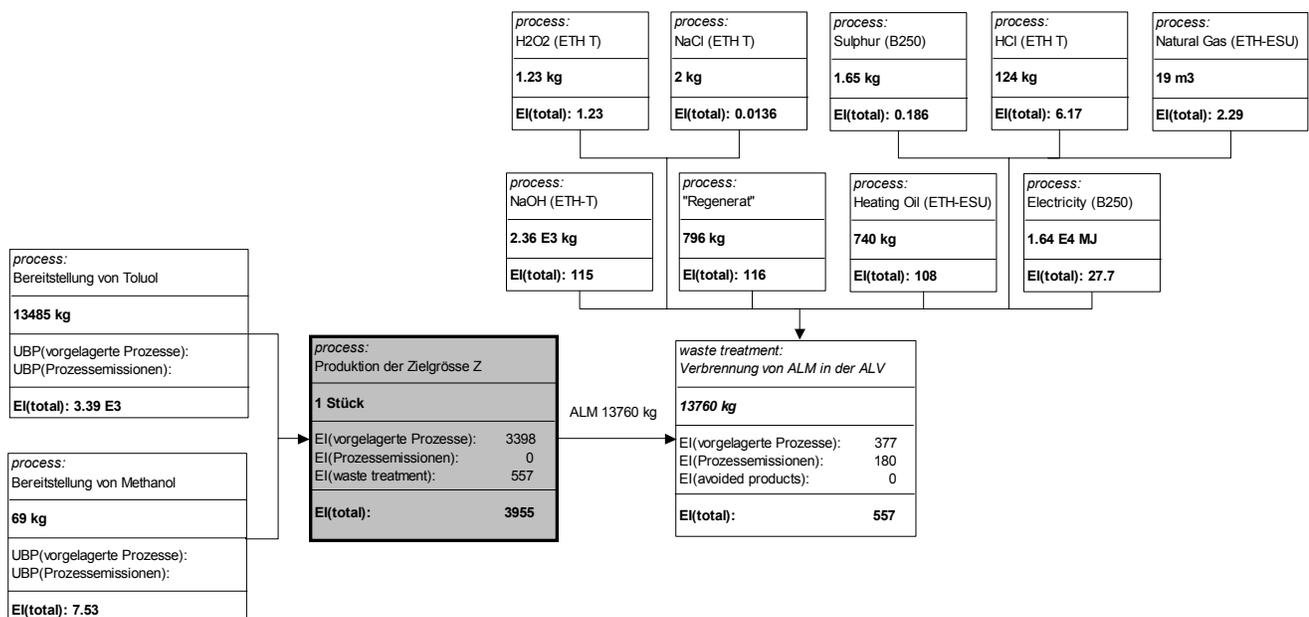
ALM-Verbrennung in der ALV ohne Energiegutschriften [UBP]



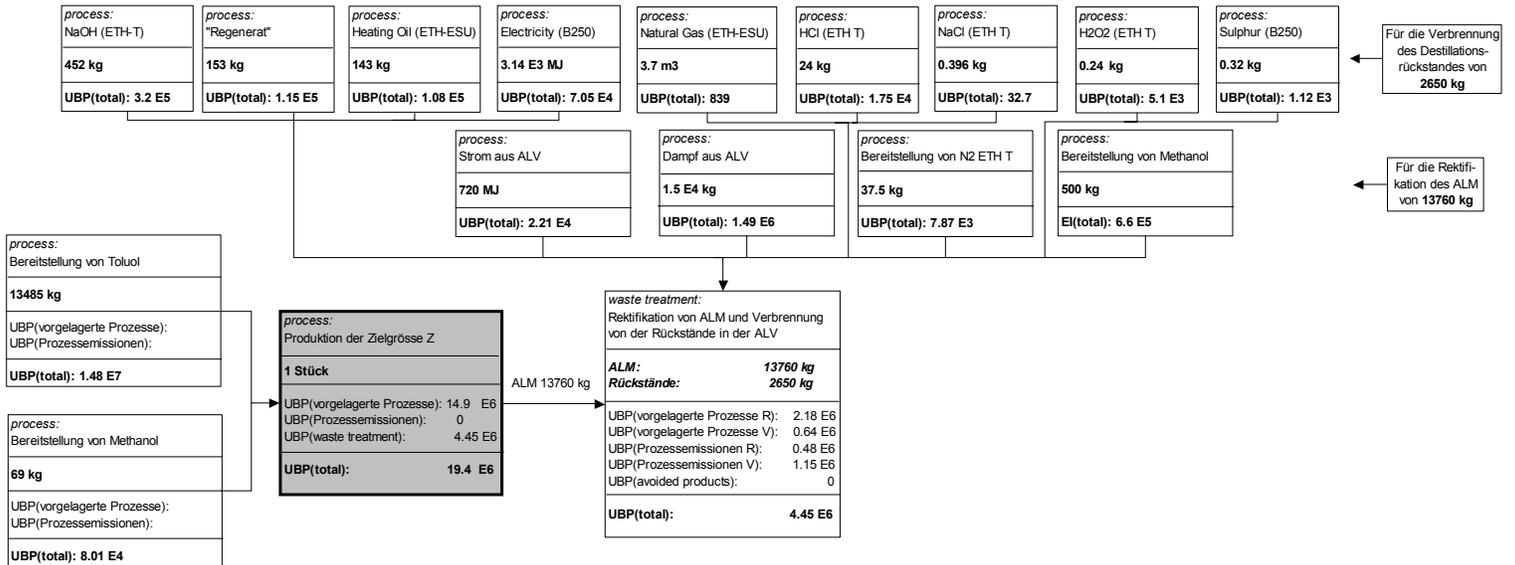
ALM-Verbrennung in der ALV mit Energiegutschriften [EI-Pt]



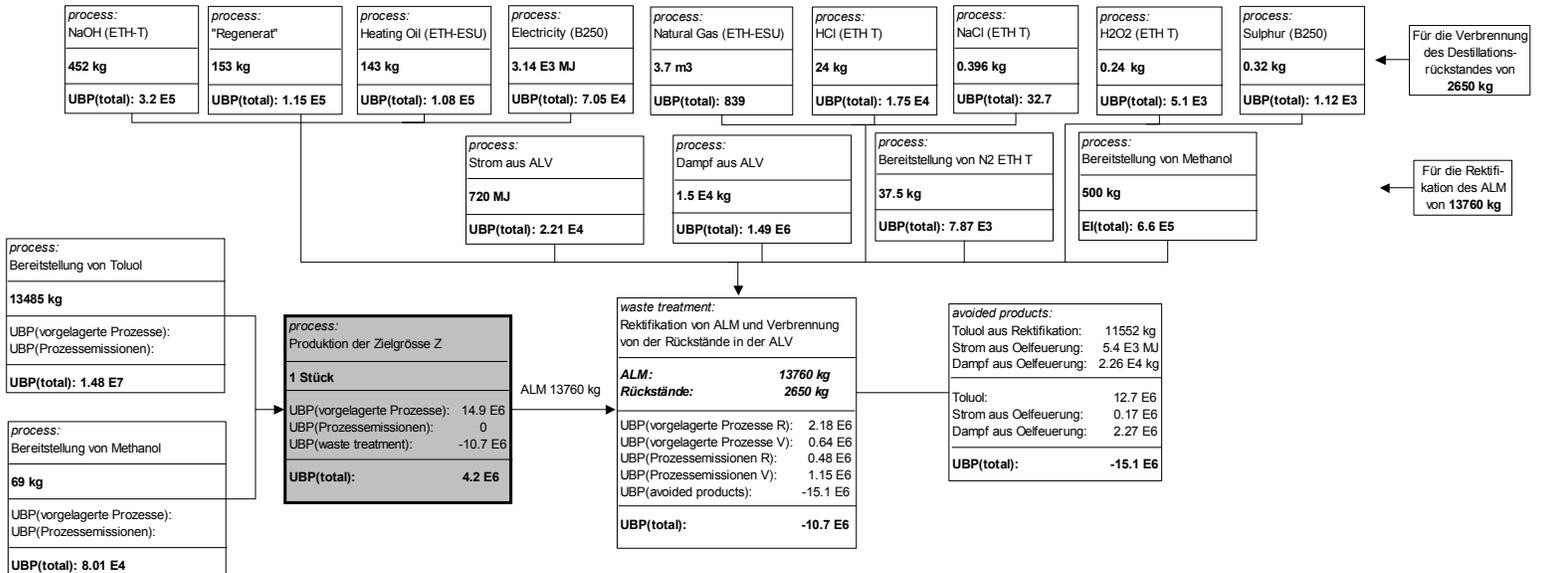
ALM-Verbrennung in der ALV ohne Energiegutschriften [EI-Pt]



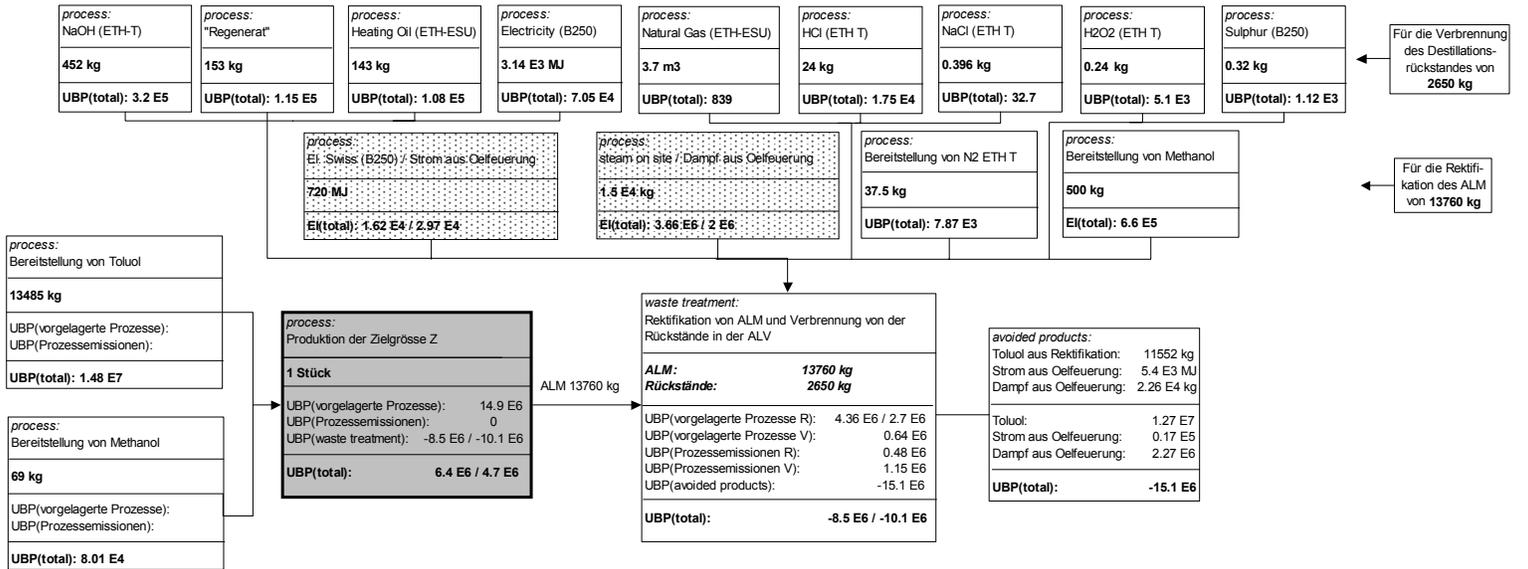
ALM-Rektifikation mit Energie aus der ALV ohne Gutschriften [UBP]



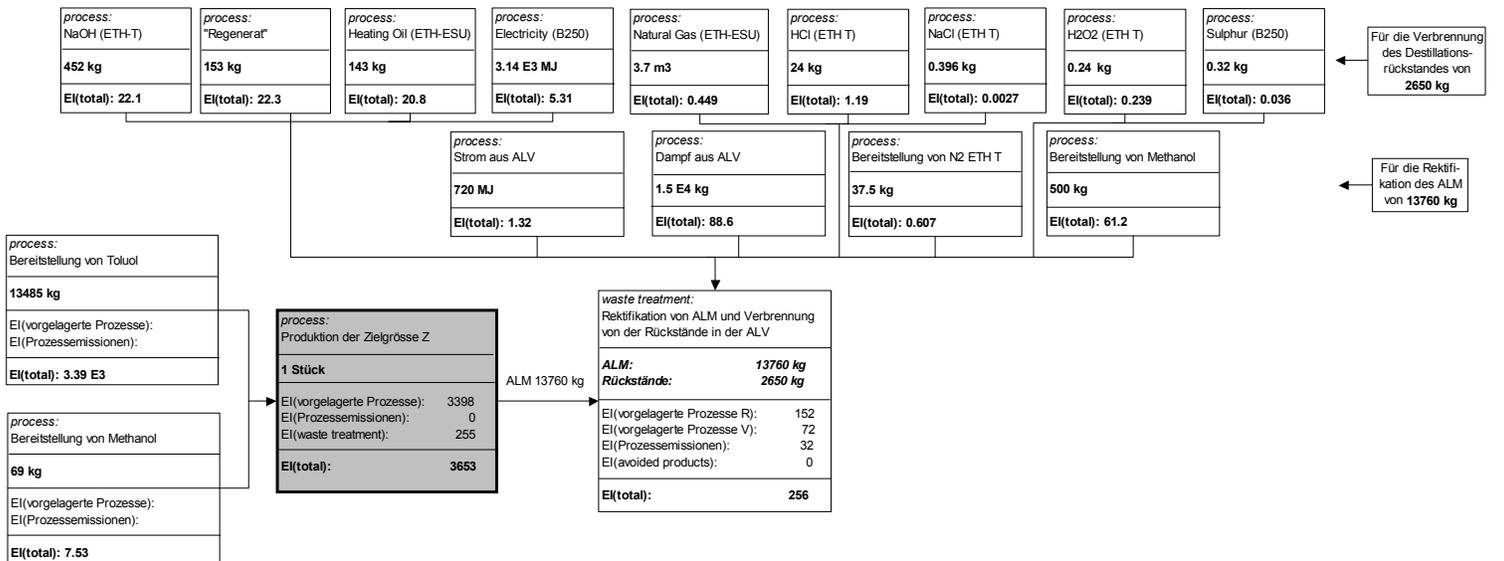
ALM-Rektifikation mit Energie aus der ALV mit Gutschriften [UBP]



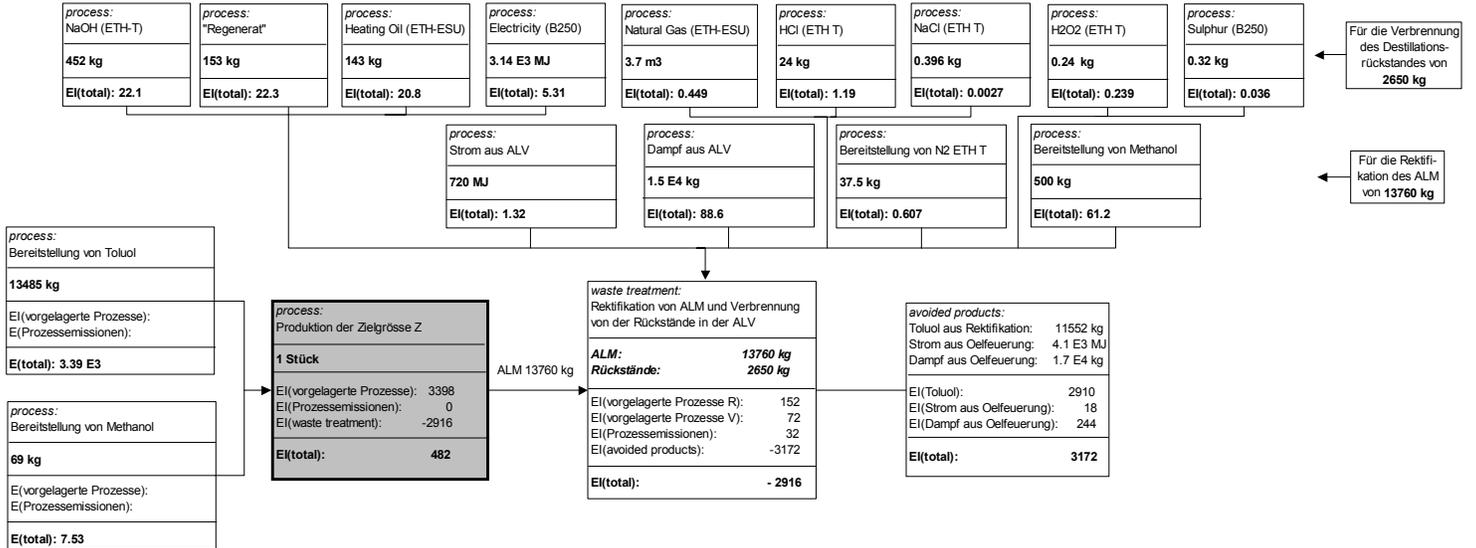
ALM-Rektifikation mit Fremdenergie mit Gutschriften [UBP]



ALM-Rektifikation mit Energie aus der ALV ohne Gutschriften [EI-Pt]



ALM-Rektifikation mit Energie aus der ALV mit Gutschriften [EI-Pt]



ALM-Rektifikation mit Fremdenergie mit Gutschriften [EI-Pt]

