

Mandy Yvonne Paschetag

# Ökologische Bewertung von Verfahren in Mehrzweckanlagen der Prozessindustrie

## **Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek**

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.ddb.de> abrufbar.

1. Aufl. - Göttingen : Cuvillier, 2021

Zugl.: (TU) Braunschweig, Univ., Diss., 2021

### **Herausgeber:**

Stephan Scholl, Wolfgang Augustin

ICTV – Institut für Chemische und Thermische Verfahrenstechnik

Langer Kamp 7

38106 Braunschweig

Telefon + 49 (0)531 391 2781

Telefax + 49 (0)531 391 2792

[ictv@tu-braunschweig.de](mailto:ictv@tu-braunschweig.de)

[www.ictv.tu-bs.de](http://www.ictv.tu-bs.de)

© CUVILLIER VERLAG, Göttingen 2021

Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen

Telefon: 0551-54724-0

Telefax: 0551-54724-21

[www.cuvillier.de](http://www.cuvillier.de)

Alle Rechte vorbehalten. Ohne ausdrückliche Genehmigung des Verlages ist es nicht gestattet, das Buch oder Teile daraus auf fotomechanischem Weg (Fotokopie, Mikrokopie) zu vervielfältigen.

1. Auflage, 2021

Gedruckt auf umweltfreundlichem, säurefreiem Papier aus nachhaltiger Forstwirtschaft.

ISSN 1860-1316

ISBN 978-3-7369-7455-5

eISBN 978-3-7369-6455-6



# Ökologische Bewertung von Verfahren in Mehrzweckanlagen der Prozessindustrie

Von der Fakultät für Maschinenbau  
der Technischen Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig

zur Erlangung der Würde  
einer Doktor-Ingenieurin (Dr.-Ing.)

genehmigte Dissertation

von: Mandy Yvonne Paschetag (geb. Wartke)  
aus: Rathenow

eingereicht am: 25.06.2020  
mündliche Prüfung am: 27.11.2020

Gutachter: Prof. Dr.-Ing. Stephan Scholl  
Prof. Dr.-Ing. Christoph Herrmann

2021





# Vorwort

Die Arbeit mit dem Titel

## „Ökologische Bewertung von Verfahren in Mehrzweckanlagen der Prozessindustrie“

entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftliche Mitarbeiterin am Institut für Chemische und Thermische Verfahrenstechnik (ICTV) der Technischen Universität Braunschweig. Ein großer Teil dieser Arbeit wurde finanziert vom Bundesministerium für Bildung und Forschung im Rahmen des Forschungsprojektes „Chemische Prozesse – Verbundprojekt: Innovative Apparate- und Anlagenkonzepte zur Steigerung der Energieeffizienz von Produktionsprozessen – Innova<sup>2+</sup>“ (FKZ: 033 RC 1013).

Ich möchte an dieser Stelle meinem Doktorvater Herrn Prof. Dr.-Ing. Stephan Scholl für sein entgegengebrachtes Vertrauen, für seine Anregungen zum Thema und für seine Unterstützung danken sowie für die Möglichkeit, das Thema der ökologischen Bewertung von Prozessen der stoffwandelnden Industrie am Institut in den letzten Jahren etablieren zu können. Herrn Prof. Dr.-Ing. Christoph Herrmann danke ich für sein Interesse an meiner Arbeit und die Bereitschaft, das Zweitgutachten zu erstellen. Ebenso gilt mein Dank Herrn Prof. Dr. Georg Garnweiner für die Übernahme des Prüfungsvorsitzes.

Den Kollegen\*innen der Firma Merck KGaA, insbesondere Marco Kohnke, Christian Jürgens und Reinhard Stoller, danke ich für die angenehme Zusammenarbeit und Offenheit sowie die Mühe all die angefragten Informationen und Daten bereitzustellen. Mein ganz besonderer Dank gilt Michael Häberl für die unermüdliche Diskussionsbereitschaft und den fachlichen Austausch. Vor allem aber danke ich ihm für das unerschütterliche Vertrauen in diese Arbeit und die motivierenden und menschlichen Gespräche, die wesentlich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben – sowie die Erkenntnis: Manchmal ist ein Eis doch die Lösung!

Den Kollegen\*innen im Institut danke ich für die sehr gute Arbeitsatmosphäre und insbesondere meinen Bürokollegen Robert Goedecke und Niels Wellner für die offenen Diskussionen und Hilfestellungen. Ebenso gilt mein Dank Marion Harms für die administrative Unterstützung, die im Arbeitsalltag vieles einfacher gestaltete. Außerdem gebührt mein Dank den Studierenden, die durch Studien-, Diplom- oder Masterarbeiten sowie als studentische Hilfskräfte tatkräftig und mit viel Begeisterung diese Arbeit unterstützt haben.

Bei meinen Eltern und Brüdern möchte ich mich ganz herzlich dafür bedanken, dass sie alle meine Entscheidungen stets unterstützt haben und mir unermüdlich mit Rat und Tat zur Seite stehen. Ein ganz besonderer Dank gilt meinem lieben Ehemann André. Ihm danke ich von ganzem Herzen für seine fortwährende Unterstützung, seine Aufmunterung und unermessliche Geduld sowie für unsere wunderbaren Jungs Bennet, Lennart und Julius. Ihr Anblick erinnert mich jeden Tag daran, was wirklich wichtig im Leben ist und das die kleinen Schritte jene mit großer Bedeutung sind.

Herford, Mai 2021





# Inhaltsverzeichnis

<b>Kurzfassung .....</b>	<b>III</b>
<b>Abstract .....</b>	<b>IV</b>
<b>Verzeichnisse.....</b>	<b>V</b>
Abkürzungen .....	V
Lateinische Buchstaben.....	VII
Griechische Buchstaben.....	VII
Indizes.....	VIII
<b>1 Einleitung.....</b>	<b>1</b>
<b>2 Ökologische Bewertung von Produktionsprozessen .....</b>	<b>4</b>
2.1 Aufbau einer Ökobilanz .....	4
2.2 Vorgaben zur Erfassung von potentiellen Umweltwirkungen.....	7
2.3 Prozessökobilanz.....	12
2.3.1 Anwendung in der Industrie und Forschung.....	13
2.3.2 Inputs und Outputs eines Prozesses als Basis für die ökologische Bewertung.....	15
2.4 Verbrauchsdaten von Produktionsprozessen in Mehrzweckanlagen .....	19
2.5 Produktionsanlagen in der ökologischen Bewertung.....	24
2.6 Einordnung der eigenen Arbeit.....	33
<b>3 Modellierungsansatz für Produktionsprozesse.....</b>	<b>35</b>
3.1 Das 3-Ebenen-Modell zur Abbildung von Produktionsprozessen.....	35
3.2 Abbildung von Grundoperationen absatzweise betriebener Prozesse in Mehrzweckanlagen (MZA) .....	40
3.3 Einflussgrößen bei der Ermittlung von Verbrauchsdaten.....	47
<b>4 Produktionsprozesse im Mehrzweckanlagenumfeld.....</b>	<b>53</b>
4.1 Mehrzweckanlagen – Flexible Produktionsanlagen .....	55
4.2 Ansatz zur Integration anlagenbedingter ökologischer Aufwendungen .....	58
4.2.1 Datenerfassung.....	58
4.2.2 Abschreibung ökologischer Aufwendungen.....	65
4.2.3 Allokationsansätze für die Zuordnung von ökologischen Aufwendungen.....	70
4.3 Anwendungsbeispiel.....	73
4.3.1 Aufbau und Struktur der untersuchten Mehrzweckanlage.....	73
4.3.2 Zuordnung der ökologischen Aufwendungen nach verschiedenen Allokationsansätzen .....	78



4.3.3	Erkenntnisse aus der ökologischen Bewertung der MZA .....	84
<b>5</b>	<b>Ökologische Bewertung eines Produktionsprozesses in einer Mehrzweckanlage .....</b>	<b>86</b>
5.1	Beschreibung des Produktionsprozesses im MZA-Umfeld .....	86
5.2	Modellierung des Produktionsprozesses .....	88
5.3	Festlegung der Ziele und des Untersuchungsrahmens .....	91
5.4	Stoff- und Energiebilanz als Basis der Sachbilanzerstellung .....	95
5.4.1	Datenerhebung .....	96
5.4.2	Stoff- und Energiebilanz .....	96
5.5	Wirkungsabschätzung .....	98
5.5.1	Bewertung des Produktionsprozesses .....	98
5.5.2	Bewertung der Grundoperationen des Produktionsprozesses .....	101
5.6	Analyse des Produktionsprozesses .....	104
5.6.1	Schwerpunktanalyse I: Untersuchung der Betriebsweise der MZA .....	106
5.6.2	Schwerpunktanalyse II: Ressourcen- und Energieeinsatz .....	107
5.6.3	Schwerpunktanalyse III: Untersuchungen zu den Grundoperationen .....	115
5.6.4	Schwerpunktanalyse IV: Untersuchungen zu den Rüst- und Reinigungsvorgängen .....	123
5.6.5	Sensitivitätsstudie I: Recycling von Lösemittel .....	125
5.6.6	Sensitivitätsstudie II: Einfluss der Faktoren „Apparat“, „Betrieb“ und „Prozess“ .....	129
5.7	Auswertung und Diskussion der Ergebnisse .....	132
5.7.1	Belastbarkeit der Ergebnisse .....	133
5.7.2	Auswertung der Ergebnisse und Empfehlungen .....	134
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick .....</b>	<b>139</b>
6.1	Zusammenfassung .....	139
6.2	Ausblick .....	143
<b>7</b>	<b>Literaturverzeichnis .....</b>	<b>146</b>
<b>A</b>	<b>Anhang .....</b>	<b>155</b>
A.1	Ergänzungen zur Modellierung .....	155
A.2	Ergänzungen zur ökologischen Bewertung .....	155
A.2.1	Zur ökologischen Bewertungen der in der Mehrzweckanlage (MZA) verbauten Hauptapparate .....	155
A.2.2	Datenerhebung für die ökologischen Bewertung .....	156
A.2.3	Getroffene Annahmen bei der Datenerhebung .....	158
A.2.4	Übersicht über die Wirkungskategorien .....	160
A.2.5	Ergänzungen zu den Ergebnissen der ökologischen Bewertung des Produktionsprozesses .....	160
A.3	Ergänzungen zu den Prozessanalysen .....	162
A.3.1	Ergänzungen Schwerpunktanalyse II .....	162
A.3.2	Ergänzungen Schwerpunktanalyse III .....	164
A.3.3	Ergänzungen Sensitivitätsstudie I .....	166



## Kurzfassung

Die vorliegende Arbeit behandelt das Thema ökologische Bewertung von Verfahren in Mehrzweckanlagen der Prozessindustrie. Als Beispiel dient ein Produktionsprozess aus dem Bereich der Spezialchemie, der in einer Mehrzweckanlage betrieben wird. Aus den Charakteristika der Struktur und des Betriebes dieses Anlagentyps resultieren Besonderheiten in der Produktion, die bei der ökologischen Bewertung berücksichtigt werden müssen. Zum einen können verschiedenste Prozesse parallel betrieben werden und zum anderen sind ein großer Apparatepark sowie eine Vielzahl an zentralen Anlagenbestandteilen für die Produktion notwendig. In diesem Zusammenhang ist die Bereitstellung von Daten für die ökologische Bewertung mit Herausforderungen verbunden. Ziel dieser Arbeit war die Entwicklung einer Methode, die eine umfassende, transparente Bewertung in einem überschau- und handhabbaren Aufwand ermöglicht und die Besonderheiten der Produktionsstätte berücksichtigt.

Dazu wurden zunächst die Vorgaben aus Normen, Leitlinien, Handbücher, etc. zur ökologischen Bewertung von Produktionsprozessen im Detail beleuchtet und die Anforderungen zusammengestellt. Die Erfassung der ein- und austretenden Stoffe und Energien eines Produktionsprozesses folgt einer Klassifizierung gegliedert in inputseitig Edukte, Hilfsstoffe, Betriebsstoffe, Anlage sowie elektrischer Energie und outputseitig Produkt, Reststoffe und Emissionen. Diese Gliederung unterstützt die Auswertung der Ergebnisse aus verfahrenstechnischer Sicht. Zur Abbildung der Produktionsprozesse wurde ein modular nach Grundoperationen strukturiertes 3-Ebenen-Modell entwickelt, das die Möglichkeit bietet sowohl die Grundoperationen im Detail abzubilden, als auch die einzelnen Prozesse im Ganzen zu bilanzieren. Außerdem erlaubt das Modell die Einbettung der Prozesse oder einzelner Grundoperationen in die betriebliche Infrastruktur. Durch die Nutzung von parametrisierten Bausteinen, die für verschiedene Apparate und Prozessschritte erstellt wurden, können die Verbrauchsdaten in Abhängigkeit von apparativen, betrieblichen und prozesslichen Parametern ermittelt werden. Durch die Einbindung von zentralem Equipment werden auch dessen Verbräuche berücksichtigt.

Für die Erfassung der ökologischen Aufwendungen verursacht durch die Produktionsanlage wurde ein Ansatz entwickelt, der zum einen die Lebensdauer der Anlage, als auch die Aufwendungen für deren Instandhaltung über diese Zeitspanne berücksichtigt. Dieser Ansatz dient der Ermittlung der jährlichen ökologischen Aufwendungen und postuliert einen Aufwand von 15 % der Bereitstellungs- und Entsorgungsaufwendungen orientiert an den verbauten Materialarten und -mengen. Um eine transparente und gerechte Verteilung auf die verschiedenen Prozesse im Produktionsjahr zu gewährleisten, wurden vier Allokationsansätze untersucht, die sich im Detaillierungsgrad und damit verbunden dem Aufwand der Datenerfassung unterscheiden.

Anhand des Beispielprozesses konnte die Anwendung des Modellierungsansatzes und der Einfluss der Produktionsanlage dargestellt werden. Durchgeführte Analysen und Studien zeigen die Anwendungsmöglichkeiten in Bezug auf Bilanzierung und ökologische Bewertung in verschiedensten Detaillierungsgraden: Prozess-, Grundoperations- und Apparateebene. Eine umfangreiche Sensitivitätsstudie am Beispiel des Prozessschrittes Heizen belegt außerdem den Einfluss verschiedener verfahrenstechnischer Größen auf die Verbrauchsdatenermittlung und die Ergebnisse der ökologischen Bewertung.



## Abstract

The present thesis deals with the ecological assessment of processes in multi-purpose plants in the process industry. A production process from the field of special chemicals, which is operated in a multi-purpose plant, serves as an example. Due to the characteristic traits and structure of this type of plant special features arise in the production, which must be taken into account in the ecological assessment. On the one hand, various production processes can be operated in parallel and, on the other hand a large equipment park and a multitude of central facility components is necessary for the production. In this context, the provision of data is associated with various challenges for the ecological assessment. The aim of this present thesis was to develop a method that enables a comprehensive assessment in a transparent manner under consideration of specifics in the production facility and with a manageable effort for the users.

For this purpose, the specifications in standards, guidelines, handbooks, etc. for the ecological assessment of production processes were initially investigated in detail and the included requirements compiled. The recording of all material and energetic in- and outputs of a production process follows a classification divided in educts, auxiliaries, utilities, plant as well as electrical energy for the inputs and product, residues and emissions for the outputs. This classification supports the evaluation and interpretation of the results from a process engineering point of view. For the depiction of production processes a modular 3-level-model structured according to basic operations was developed, which offers the possibility to illustrate the unit operations in detail as well as to balance the individual processes as a whole. Additionally, the model allows the embedding of processes or single unit operations into the company's infrastructure. By using parameterized building blocks, which were created for different equipment and process steps, the consumption data can be determined depending on operational, as well as process and equipment related parameters. By integration of central plant equipment its consumption, which is normally excluded, is also taken into account.

An approach has been developed for the assessment of the ecological expenditures caused by the production plant, which considers the lifespan of the investigated plant as well as the expenditures for maintenance across this period of time. This approach serves to assess the related annual ecological expenditures and postulates an expense of 15% of the of the provision and disposal expenditures based on the installed types and quantities of equipment material used. In order to ensure a transparent and fair distribution of the expenditures across the different processes of a production year, four allocation approaches were investigated, which differ in their level of detail and their related effort for data acquisition

The application of the modelling approach as well as the impact of the production plant was presented on the basis of an example process. Conducted analyses and studies show possible applications in terms of balancing and ecological assessment in various levels of detail: process, unit operation and equipment level. A comprehensive sensitivity study using the example of the process step *heating* also demonstrates the influence of different process engineering related variables on the determination of consumption data and the results of the ecological assessment.



# Verzeichnisse

## Abkürzungen

Symbol	Bedeutung
A	Anlage
AfA	Absetzung für Abnutzung
AG	Anlagegüter
ALO	Landwirtschaftliche Landnutzung
Äq.	Äquivalent(e)
BA	Bilanzausbeute
BAZ	Belegungsanzahl
BD	Belegungsdauer
BS	Betriebsstoffe
C22	Hastelloy
CC	Klimaänderung
DG	Detaillierungsgrad
DIN	Deutsche Norm
E	Energie, elektrisch
ED	Edelstahl
Ed	Edukt(e)
EE	Environmental Expenditures
EEIO-LCA	Environmental Extended Input-Output Life Cycle Assessment (erweiterte Input-Output-Ökobilanz)
EFS	Ecological Footprint Standards
Em	Emailliert
Em	Emissionen
EN	Europäische Norm
EU	Europäische Union
F&E	Forschung und Entwicklung
FD	Verbrauch fossiler Rohstoffe
fE	Funktionelle Einheit
FE	Überdüngung Frischwasser
FET	Frischwasser Ökotoxizität
GHG	Greenhouse Gas Protocol
GO	Grundoperation
HA	Hauptapparat



<b>Symbol</b>	<b>Bedeutung</b>
HS	Hilfsstoffe
HT	Humantoxizität
IBC	Intermediate bulk container
IR	Ionisierende Strahlung
ISO	Internationale Norm
LCA	Life Cycle Assessment (Ökobilanz)
MD	Verbrauch mineralischer Rohstoffe
ME	Überdüngung Seewasser
MET	Seewasser Ökotoxizität
MPA	Mehrproduktanlage
MZA	Mehrzweckanlage
NLT	Natürliche Landumwandlung
NV	Nennvolumen
OD	Ozonabbau
Öko	Ökologisch
PEF	Product Environmental Footprint
P-LCA	process-based Life Cycle Assessment (prozessbasierte Ökobilanz)
PMF	Feinstaubbildung
POF	Photochemische Oxidation
Pr	Produkt
RS	Reststoffe
RWA	Rührwerksreaktor
SSNM	Stoffstromnetzmodellierung
St	Stahl
TA	Terrestische Versauerung
TAn	Teilanlage(n)
TET	Terrestische Ökotoxizität
T-Niveau	Temperaturniveau
T-Rampe	Temperaturrampe
ULO	Urbane Landnutzung
WIW	Wirkungsindikatorwert
WK	Wirkungskategorie (Umweltproblemfeld)
WT	Wärmeträger
WÜ	Wärmeübertrager
ZE	Zentrale Elemente



## Lateinische Buchstaben

Symbol	Einheit	Bedeutung
AB	[kg]	Abfälle
AUF	[kg]	Aufbereitung
B	[-]	Anzahl Belegungen
C <sub>p</sub>	[J/kgK]	Wärmekapazität
EE	[kg x-Äq.]	Environmental Expenditures (ökologische Aufwendungen)
K	[W/Km <sup>2</sup> ]	Wärmedurchgangskoeffizient
M	[kg]	Masse
MAT	[kg]	Material(ien)
N	[-]	Anzahl
N	[-]	Anzahl der Prozesse
P	[%]	linearer Abschreibungssatz
Q	[J]	Wärmemenge
ST	[kg]	Stoff(e)
T	[a]	Zeit
T	[°C], [K]	Temperatur
BD	[h]	Belegungsdauer
Tan	[-]	Teilanlage
WIW	[kg x-Äq.]	Wirkungsindikatorwert
Y	[-]	Anzahl Batchansätze
Z	[-]	Anzahl belegter TA
ΔT	[°C], [K]	Temperaturdifferenz

## Griechische Buchstaben

Symbol	Einheit	Bedeutung
λ(t)	[-]	Ausfallrate
H	[-]	Wirkungsgrad
Λ	[W/m <sup>2</sup> K]	Wärmeleitfähigkeit



## Indizes

Symbol	Bedeutung
(a)	Jährlich
A	Anlage
App	Apparat(e)
A	Außen
AfA	Absetzung für Abnutzung laut AfA-Tabellen der Chemischen Industrie
AG	Anlagegüter
Aufw	Aufwendungen
BS	Betriebsstoff(e)
E	elektrische Energie
Ed	Edukt(e)
Em	Emissionen
Gesamt	Gesamt
heq	Hauptequipment
HS	Hilfsstoff(e)
I	Innen
Inst	Instandhaltung
K	Wärmedurchgangskoeffizient
Linear	Linear
Max	Maximal
neq	Nebenequipment
NUTZ	Nutzbar
NV	Nennvolumen
P	Prozess
p.a.	pro Jahr
RS	Reststoff(e)
TAn(a)	Teilanlage, jährlich
V	Verbrauchsstoff(e)
Verb	Verbaut
WK	Wirkungskategorie
X	zentrale Anlagenbestandteil(e)



# 1 Einleitung

„Hip und Grün – Unternehmen setzen verstärkt auf Nachhaltigkeit – Die Jugend demonstriert gegen den Klimawandel, die Grünen sind im Umfragehoch. Für Deutschlands Firmen wird ein ökologisches Image immer wichtiger.“ [1] Diese Schlagzeile vom 17.08.2019 im Karriere Portal des Handelsblattes spiegelt den aktuellen Zeitgeist der deutschen Industrie kurz und knapp wider. Nicht nur in Deutschland lässt sich beobachten, wie die Industrie sowohl aufgrund von Vorgaben und Gesetzen als auch aus eigenem Antrieb die Themen Klimaschutz und Nachhaltigkeit vorantreibt.

Seitens der Europäischen Union existieren Verordnungen, die ihren Mitgliedsländern sowohl die Meldung von Treibhausgasen als auch politische Maßnahmen zum Erreichen von Klimaschutzziele vorgeben. Dies mündet in Gesetzen, wie z. B. das erst im Dezember 2019 in der BRD verabschiedete Gesetz zur Senkung der Treibhausgasemissionen in verschiedenen Sektoren. Demnach sind für den Industriesektor in 2020 max. 186 Mio. t emittierte CO<sub>2</sub>-Äq zulässig, eine Summe, die bis 2030 um ca. 25 %, gesenkt werden muss. [2] Dies bedeutet für die deutsche Industrie eine große Herausforderung und zwingt die Unternehmen, sich intensiv mit den Themen Energie- und Ressourceneffizienz auseinanderzusetzen.

Viele Unternehmen beteiligen sich u. a. genau aus diesem Grund freiwillig an Vereinigungen, wie z. B. SPIRE<sup>1</sup> [3], in denen die Stärkung der Industrie in Europa durch eine Verbesserung von Prozessen und der Reduzierung des Energie- und Ressourcenverbrauchs sowie der Abfallmengen angestrebt wird. Diese Bestrebungen zielen auf die Reduzierung des Energiebedarfes der Prozessindustrie um 30 % und der primären, nicht erneuerbaren Rohstoffintensität um 20 %. Daraus resultierend wird eine Verbesserung der Effizienz des CO<sub>2</sub>-Fußabdrucks um 40 % bis zum Jahr 2030 im Vergleich zum Zeitraum 2008...2011 angestrebt. [4] Auch auf deutscher Ebene existieren solche Initiativen, wie z. B. CHEMIE<sup>3</sup>, die die Integration des Themas Nachhaltigkeit als Leitbild in der Chemischen Industrie anstrebt.

Ein besonderer Fokus dieser Thematik liegt momentan auf den Umweltwirkungen der Produktionen. Um die Umweltwirkungen zu erfassen, stellt die Ökobilanzierung ein mögliches Instrument dar. Für die Ermittlung eines sogenannten Umweltfußabdrucks existiert eine Vorgehensbeschreibung in Form einer Leitlinie, die u. a. die EU für die Bewertung von Produkten oder auch Organisationen empfiehlt [5]. Diese Empfehlung ist begründet mit verschiedenen Erwägungen, u.a. um zu verhindern, dass der aktuell irreführende „Wildwuchs an unterschiedlichen Methoden und Initiativen zur Bewertung und Offenlegung von Umweltleistungen“ [6] keinen vertrauensvollen Umgang mit Umweltleistungsdaten zulässt. Für Unternehmen fallen hohe Kosten an, wenn sie ihre Produkte bzw. Organisationen nach verschiedenen Methoden bewerten lassen müssen, um Anforderungen von Geschäftspartnern, Behörden, Investoren, etc. zu erfüllen. [6] Bezogen auf den einzelnen Produktionsprozess entspricht dies einer Prozessökobilanz, die nach Jacquemin et al. [7] verschiedene Funktionen übernehmen kann. Dazu gehören z. B. eine Verbesserung von Prozessen durch die Identifizierung von Abschnitten mit hohen ökologischen Auswirkungen oder das Management von Prozessen durch Vergleich der Ergebnisse mit einem Referenzprozess oder anderen zuverlässigen Ergebnissen.

Die Branche der chemischen Industrie gehört zu den energie- und emissionsintensivsten in Deutschland, bedingt zum einen durch hohen Energie- und Wärmebedarf und dem damit verbundenen Bedarf an fossi-

---

<sup>1</sup> Sustainable Process Industry through Resource and Energy Efficiency



len Rohstoffen sowie zum anderen durch die Edukte und Hilfsstoffe auf Basis fossiler Rohstoffe wie Erdgas und Erdöl [8]. Einen wesentlichen Anteil am Produktionswert der chemischen Industrie nimmt mit einem Anteil von 25,5 % das Produktionsgebiet der Spezialchemie ein [9]. Dieser Industriezweig bedient i. d. R. die Nachfrage nach Spezialitäten vorrangig im B2B-Umfeld, die in einem Umfang von mehreren 100 kg bis 1000 t pro Jahr produziert werden. 2017 exportierte die Branche Produkte im Wert von 55 Mrd. € [10]. Aufgrund der wachsenden Herausforderungen zum einen bedingt durch die gesetzlichen Forderungen als auch zum anderen durch die sich verändernden Wettbewerbsbedingungen steht dieser Industriezweig unter Druck, die Umweltperformance seiner Produktionen stetig zu verbessern. Im gleichen Maße muss die Entwicklung neuer Technologien und Produkte vorangetrieben werden, da die teilweise hochspezialisierten Erzeugnisse aufgrund dynamisch wachsender Märkte nur kurze Lebenszyklen aufweisen. Typisch sind dabei auch häufige Produktmodifikationen bedingt durch Forschungsaktivitäten.

Aufgrund der kleinen Produktionsmengen und dem häufig veränderten Produktportfolio kommen in der Spezialchemie häufig Mehrprodukt- und Mehrzweckanlagen zum Einsatz, die i. d. R. absatzweise bzw. in Kampagnen betrieben werden. Der Vorteil dieser Produktionsanlagen besteht darin, dass verschiedene Prozesse nacheinander oder auch zeitgleich in der Anlage betrieben werden können. Dieses hohe Maß an Flexibilität erlaubt eben jene notwendige schnelle Reaktion auf veränderte Marktanforderungen, häufig verknüpft mit der Nachfrage nach kleinen, individuell gefertigten Mengen. [11] Die ökologische Bewertung von Produktionsprozessen in Mehrprodukt- oder Mehrzweckanlagen ist aufgrund der Charakteristika in Struktur und Betrieb des Anlagentyps im Vergleich zur Produktion von Bulkchemikalien in Monoproduktanlagen mit einer Vielzahl von besonderen Herausforderungen verbunden. Im Wesentlichen lassen sich diese in zwei Bereiche zusammenfassen: Erstens, die Ermittlung und Zuordnung der Verbrauchsdaten zu den einzelnen Produktionsprozessen und Produkten und Zweitens, die Erfassung von ökologischen Aufwendungen, die durch die Anlage und deren Betrieb verursacht werden. Letztgenanntes umfasst in diesem Zusammenhang sowohl die Berücksichtigung der ökologischen Aufwendungen als auch deren Zuordnung zu einem einzelnen Prozess.

Diese Arbeit zielt darauf ab, eine Methode für die ökologische Bewertung von Produktionsprozessen, die in Mehrprodukt- und Mehrzweckanlagen betrieben werden, zu entwickeln. Die Grundlage dazu bildet die Bereitstellung einer geeigneten Datengrundlage zu den Verbräuchen der einzelnen Produktionsprozesse und zur Produktionsanlage selbst, die möglichst alle notwendigen Inputs und Outputs transparent wieder spiegelt. Nur so können Daten für Stakeholder, wie z. B. Kunden oder staatliche Institutionen, generiert und auch für interne Zwecke eine verlässliche Datenbasis geschaffen werden. Diese soll die Möglichkeit bieten, sowohl Potentialanalysen hinsichtlich der Energie- und Ressourceneffizienz durchzuführen als auch die Ableitung von Verbesserungsansätzen in der Produktion bzw. für einzelne Prozesse zu erlauben.

Die Arbeit ist strukturiert in sechs Kapiteln, siehe Abb. 1.1. In Kapitel 2 werden der grundlegende Aufbau von Ökobilanzen sowie die Erfassung von potentiellen Umweltwirkungen dargestellt. Aufbauend darauf erfolgen die Beschreibung der Prozessökobilanz und die Ermittlung dazu notwendiger Verbrauchsdaten mit dem Schwerpunkt Mehrzweckanlagen sowie einer Übersicht zu dem Umgang mit Produktionsanlagen in der ökologischen Bewertung von Produktionsprozessen. Das Kapitel schließt mit der Einordnung dieser Arbeit. Kapitel 3 präsentiert mit dem 3-Ebenen-Modell einen Modellierungsansatz und eine Modellierungsumgebung zur Abbildung von Produktionsprozessen unter Berücksichtigung der gesonderten Herausforderungen, die mit der Abbildung von absatzweise betriebenen Prozessen in Mehrzweckanlagen verbunden sind. Anhand einer Sensitivitätsstudie wird der Einfluss einzelner Apparate-, Betriebs- und Prozessparameter auf die Ermittlung von Verbrauchsdaten belegt. Die Ergebnisse werden in Kapitel 5 im Rahmen einer Sensitivitätsstudie zum Einfluss solcher Parameter auf die Ergebnisse einer ökologischen Prozessbewertung aufgegriffen und eingeordnet. In Kapitel 4 stehen die Struktur und Produktionsumgebung von Mehrzweckanlage sowie die daraus resultierenden Anforderungen für die Zuordnung der ökologischen Aufwendungen zu den einzelnen Produktionsprozessen, die durch die Produktionsanlage selbst



verursachten werden. Es wird ein Ansatz vorgestellt, der sowohl die Erfassung der Mehrzweckanlage im Rahmen einer ökologischen Bewertung als auch die Berücksichtigung der Lebensdauer und die damit verbundenen potentiellen Umweltwirkungen für Instandhaltung umfasst. Außerdem werden Allokationsansätze zur Zuordnung der anlagenbedingten ökologischen Aufwendungen vorgestellt. Schlussendlich wird der Ansatz an einer Mehrzweckanlage der Fa. Merck KGaA am Standort Darmstadt, Deutschland, angewandt und diskutiert.

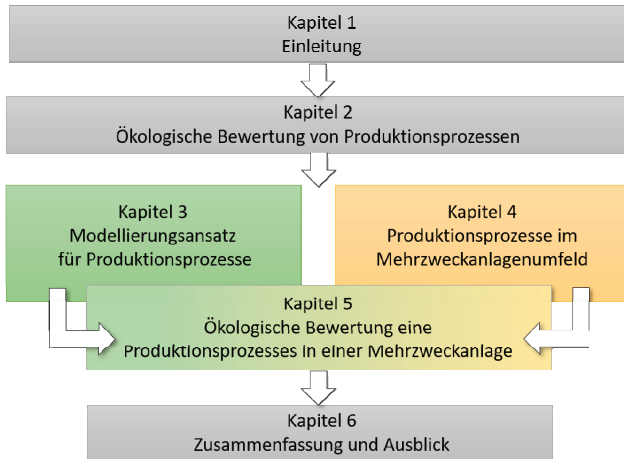


Abb. 1.1: Struktur der Arbeit

Das Kapitel 5 umfasst die Anwendung der in Kapitel 3 und Kapitel 4 vorgestellten Ansätze zur Modellierung und Integration der Produktionsanlage in die ökologische Bewertung von Produktionsprozessen, die in Mehrzweckanlagen betrieben werden. Dies erfolgt anhand eines konkreten Prozesses aus dem Umfeld der Spezialchemie, der orientiert an den Anforderungen der DIN EN ISO 14040/44 bewertet und hinsichtlich Verbesserungsansätzen sowie Potentialen analysiert wird. Das Kapitel schließt mit der Auswertung der Ergebnisse und dem Aussprechen von Empfehlungen zur Verbesserung der ökologischen Performance. Abschließend erfolgen in Kapitel 6 eine Zusammenfassung und ein Ausblick hinsichtlich weiterführender Untersuchungen.

Die gezeigten Ergebnisse resultieren aus Forschungsarbeiten, die im Rahmen des vom BMBF geförderten Forschungsprojekts “Innovative Apparate- und Anlagenkonzepte zur Steigerung der Effizienz von Produktionsprozessen – InnovA<sup>24</sup>“ (Förderkennzeichen 033 RC 1013 A) ermöglicht und in Zusammenarbeit mit der Fa. Merck KGaA mit Sitz in Darmstadt, Deutschland durchgeführt wurden. Die Fa. Merck stellte die Daten und Informationen zu der hier im Detail betrachteten Mehrzweckanlage, den darin betriebenen Prozessen sowie weitere benötigte Angaben zur Verfügung.

## 2 Ökologische Bewertung von Produktionsprozessen

Der Begriff *Ökobilanz* wurde erstmals in den achtziger Jahren des letzten Jahrhunderts durch das damalige Bundesamt für Umweltschutz in der Schweiz verwendet [12]. Eine der ersten konkreten Definitionen erarbeitet 1993 die Society of Environmental Toxicology and Chemistry (SETAC) im Rahmen eines Workshops im April 1993 in Sesimbra, Portugal, in dessen Rahmen der „Code of Practice“ veröffentlicht wurde. Dieser enthielt neben einer Definition des Begriffes Life Cycle Assessment (LCA) u.a. Rahmenbedingungen sowie Anwendungen und beschrieb den damaligen Stand der Technik. [13] Vier Jahre später erfolgte für den deutschsprachigen Raum eine Normung beim Deutschen Institut für Normung (DIN), die im Laufe der Jahre immer wieder angepasst wurde und aktuell in der internationalen Norm 14040 den Begriff für die Lebenszyklusanalyse eines Produktes wie nachfolgt definiert: „Die *Ökobilanz* bezieht sich auf die Umweltaspekte und potenziellen Umweltwirkungen (z. B. Nutzung von Ressourcen und die Umweltauswirkungen von Emissionen) im Verlauf des Lebensweges eines Produktes von der Rohstoffgewinnung über Produktion, Anwendung, Abfallbehandlung, Recycling bis zur endgültigen Beseitigung (d. h. „von der Wiege bis zur Bahre“).“ [14] Aktuell existiert eine Vielzahl von Methoden und Initiativen zur Bewertung und Veröffentlichung von Umweltleistungen. Aus diesem Grund wurde von der Europäischen Kommission eine Methodik vorgegeben, mit der Umweltwirkungen von Produkten über den gesamten Lebenszyklus bewertet werden sollen. Dies soll zum einen die Bewertung und Kennzeichnung der Produkte deutlich erleichtern und zum anderen das Vertrauen in Umweltleistungsdaten stärken. [5] Solch einen typischen Lebenszyklus eines Produktes mit verschiedenen Lebenszyklusstationen ist in der Abb. 2.1 skizziert. Einen Überblick über die bedeutendsten Stationen der Entwicklung hin zum heutigen Verständnis zum Thema *Ökobilanz* findet sich in dem Buch „Life Cycle Assessment – Theory and Practice“ [15].

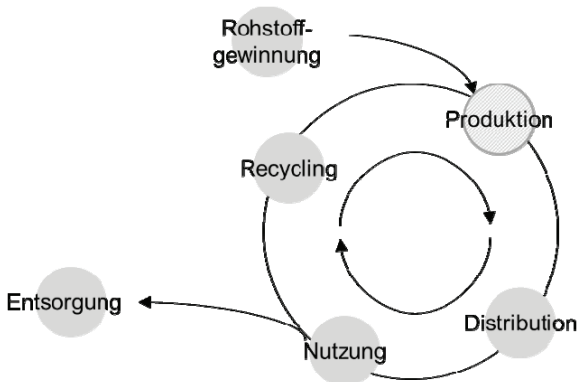


Abb. 2.1: Lebenszyklus eines Produktes (von der Wiege bis zur Bahre – cradle-to-grave)

In diesem Kapitel wird zunächst auf die wesentlichen Elemente einer *Ökobilanz* eingegangen und verschiedenen Standards, Leitlinien, Handbücher sowie Normen hinsichtlich der Vorgaben zur Erfassung von potentiellen Umweltwirkungen bezogen auf den Lebenszyklusabschnitt „Produktion“ untersucht.

Anschließend erfolgt eine detailliertere Betrachtung zur Prozessökobilanz und die Beschreibung des in dieser Arbeit verwendeten Ansatzes zur Erfassung von Verbrauchsdaten. Verschiedenen, in der Literatur existierende Vorgehensweisen werden vorgestellt und eingeordnet sowie auf die Berücksichtigung der Produktionsanlage in der ökologischen Bewertung von Produktionsprozessen eingegangen. Schlussendlich erfolgt eine Einordnung dieser Arbeit.

## 2.1 Aufbau einer Ökobilanz

In Abb. 2.2 sind die mit dem Erstellen einer Ökobilanz verbundenen, zu erarbeiteten Sachverhalte dargestellt – vergleichend die Vorgaben in der Leitlinie der EU zur Erstellung eines Produktumweltfußabdrucks (product environmental footprint – PEF) und in der internationalen Norm, die i. d. R. in der Literatur als Standard herangezogen werden. Die EU-Leitlinie unterteilt das Vorgehen in fünf verschiedene Schritte: Zieldefinition, Festlegung Untersuchungsrahmen, Ressourcennutzungs- und Emissionsprofil, Wirkungsabschätzung sowie Auswertung und Berichterstattung. In der Norm sind vier Phasen angegeben, da die Festlegung von Ziel und Untersuchungsrahmen in einem Schritt zusammengefasst werden, sich inhaltlich von den Angaben in der EU-Leitlinie aber grundlegend nicht unterscheiden. Im Wesentlichen sind die Vorgaben in der Leitlinie konkreter und das Vorgehen genauer beschrieben. Ist das Vorgehen in der Norm als iterativ beschrieben, so setzt die EU-Leitlinie die Reihenfolge fest und sieht keine nachträgliche Anpassung einzelner Inhalte, wie z. B. Systemgrenzen, vor.

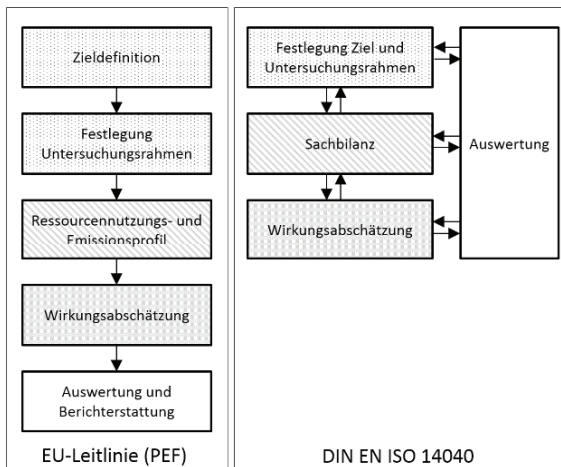


Abb. 2.2: Phasen einer Ökobilanz: links nach Vorgaben der EU-Leitlinie für einen product environmental footprint (PEF) [5], rechts nach DIN EN ISO 14040 [14]; inhaltlich ähnliche Phasen der beiden Vorgaben sind entsprechend durch Staffierung und Farbe gekennzeichnet.

Die Phase *Definition von Ziel und Untersuchungsrahmen* umfasst u. a. Angaben zur beabsichtigten Anwendung und zur Zielgruppe. Außerdem ist eine konkrete Formulierung des Untersuchungsrahmens und damit z. B. der funktionellen Einheit<sup>2</sup> vorgegeben. Außerdem sind die Systemgrenzen festzusetzen, an denen die Inputs und Outputs des betrachteten Produktsystems/ Prozesses erfasst werden. Hinzu kommen

<sup>2</sup> Die funktionelle Einheit stellt in der ökologischen Bewertung die Größe dar, auf die sich die betrachteten Inputs und Outputs und damit die potentiellen Umweltwirkungen beziehen.

Angaben zu den zu untersuchenden Umweltproblemfeldern (Wirkungskategorien, WK) als auch die für die Wirkungsabschätzung herangezogenen Charakterisierungsmodell sowie Allokationsregeln, die festlegen wie die Umweltwirkungen z. B. auf die funktionelle Einheit und evtl. vorhandene Nebenprodukte verteilt werden.

Die Erstellung der *Sachbilanz* bzw. des *Ressourcennutzungs- und Emissionsprofils* stellt das Kernstück und den aufwendigsten Teil der Ökobilanz dar. In dieser Phase müssen alle Inputs und Outputs des zu untersuchenden Systems erfasst werden. Dies bedeutet zunächst das Zusammentragen und Erfassen aller benötigten Daten sowie bei Lücken zu treffenden Annahmen. Anschließend erfolgt die Übertragung der Input- und Outputströme in Elementarflüsse<sup>3</sup>, z. B. durch Nutzung generischer Datensätze aus Datenbanken wie *ecoinvent* [16]. Dieser Schritt dient der Erstellung der eigentlichen Sachbilanz, die in Summe alle mit dem Produktsystem/Prozess zusammenhängenden Ströme aus der und in die Umwelt repräsentiert.

In der Phase der *Wirkungsabschätzung* erfolgt die Verknüpfung zwischen den Elementarflüsse aus der Sachbilanz und ihren potentiellen Umweltwirkungen. Für die im Vorfeld festgelegten Umweltproblemfelder werden dazu über gewählte Charakterisierungsmodelle sogenannte Wirkungsindikatorwerte ermittelt. Ein Wirkungsindikatorwert repräsentiert die Summe der ökologischen Aufwendungen in einer WK, die aus den zugeordneten Inputs und Outputs resultieren. Mittels der Charakterisierungsfaktoren werden die Elementarflüsse auf einen Referenzstoff (z. B. Kohlenstoffdioxid, CO<sub>2</sub>) bezogen, der die Umweltwirkung repräsentiert. Die verschiedenen Charakterisierungsmodelle sind i. d. R. in Bewertungsmethoden zu finden. Die Vorgaben in der internationalen Norm sind dazu wagen und geben lediglich eine Empfehlung bzgl. der zu betrachtenden Umweltproblemfelder. In der Leitlinie der EU hingegen sind sowohl die Umweltproblemfelder als auch die zu nutzenden Charakterisierungsmodelle vorgegeben.

In der letzten Phase, der *Auswertung*, erfolgt die Analyse und Ergebnisdarstellung sowie das Ableiten von Schlussfolgerungen und Empfehlungen. Ebenfalls Bestandteil dieser Phase sind u. a. Prüfungen bzgl. Zuverlässigkeit, Vollständigkeit und Sensitivitäten.

Die kurze Beschreibung der einzelnen Phasen dient an dieser Stelle dem Überblick und erhebt nicht den Anspruch einer vollständigen, detaillierten Beschreibung zu den Arbeitsschritten und Anforderungen. Im nachfolgenden Kapitel werden verschiedene Literaturquellen vorgestellt, die das Vorgehen bei einer ökologischen Bewertung behandeln. Für nähere Erläuterungen zum Aufbau einer Ökobilanz bzw. dem Vorgehen sei an dieser Stelle auf diese Quellen verwiesen.

Bezogen auf den Begriff Ökobilanz ursprünglich auf Produkte und deren Lebensweg, wird dieser seit einigen Jahren auch für die Umweltbewertung u. a. von Dienstleistungen, Unternehmen oder Verhaltensweisen verwendet [17]. Bereits 1997 unterteilten die Autoren Hilty und Rautenstrauch [18] im Zuge der Betrachtung von betrieblichen Umweltinformationssystemen Ökobilanzen nach verschiedenen Untersuchungsschwerpunkten in *Produktökobilanz*, *Betriebsökobilanz* und *Prozessökobilanz*. Der Betrachtungsrahmen der Produktökobilanz umfasst in diesem Zusammenhang die Umweltbelastungen, die ein Produkt über seinen Lebensweg verursacht, siehe Abb. 2.1. Im Vergleich dazu stellt die Betriebsökobilanz eine periodenbezogene Betrachtung sämtlicher Inputs und Outputs eines Betriebes bzw. die Prozessökobilanz eine Input-/Output-Analyse bezogen auf einen Produktionsprozess dar, siehe den in Abb. 2.1 straffierten Lebenszyklusabschnitt *Produktion*. [18]

Der Fokus dieser Arbeit liegt auf den Prozessökobilanzen, also der ökologischen Bewertung von einzelnen Produktionsprozessen mit Schwerpunkt stoffwandelnde Industrie. Nachfolgend wird dazu ein Überblick über existierende Vorgaben sowie die darin enthaltenen Ansätze und Hinweise zur Erfassung der

---

<sup>3</sup> Elementarflüsse sind Stoff- und Energieströme, die direkt aus der Umwelt entnommen (z. B. Erze) oder in diese abgegeben werden (z. B. Abwärme).

ökologischen Aufwendungen, die mit dem Lebenszyklusabschnitt Produktion zusammenhängen, gegeben. Neben verschiedenen Beispielen aus der Industrie und Forschung wird ein Ansatz zur Erfassung sämtlicher Inputs und Outputs eines Produktionsprozesses vorgestellt, der in dieser Arbeit Anwendung findet. Neben den eigentlichen Produktionsprozessen liegt ein weiterer Schwerpunkt auf dem Input Produktionsanlage, dessen Lebenszyklus und den daraus resultierenden Umweltwirkungen.

## 2.2 Vorgaben zur Erfassung von potentiellen Umweltwirkungen

Für das Vorgehen zur Erfassung von ökologischen Aufwendungen wurden in den letzten ca. 30 Jahren verschiedene Standards, Leitlinien, Handbücher und Normen erarbeitet. Diese liefern in unterschiedlichen Detaillierungsgraden Anweisungen, Anhaltspunkte und Hinweise, welche Aspekte und Faktoren bei der ökologischen Bewertung von Produkten, Unternehmen etc. zu berücksichtigen sind. Im Folgenden werden verschiedene Publikationen vorgestellt. Diese werden mit Fokus auf „Produktion“ als Lebenszyklusabschnitt eines Produktes bzw. im Unternehmen und den damit verbundenen Vorgaben zur Bewertung von Produktionsstätten bzw. -anlagen zusammengefasst.

### Ecological Footprint Standards 2009

Die „Ecological Footprint Standards 2009“ (EFS) dienen der Sicherstellung einer in der Community vorgeschlagenen „Best Practise“ zur Ermittlung eines konsistenten ökologischen Fußabdruckes. Der ökologische Fußabdruck beschreibt in diesem Zusammenhang nach wissenschaftlichen Prinzipien die zur Verfügung stehenden natürlichen Ressourcen und Biokapazitäten im Verhältnis zur Nachfrage der Bevölkerung [19]. Die Standards umfassen neben der Analyse auch die Kommunikation der Ergebnisse und wurden entworfen für alle Fußabdruckstudien subnationaler Art, die sowohl die Bevölkerung als auch Produkte oder Unternehmen betreffen. Ziel ist es, eine einheitliche Bewertung der ermittelten Fußabdrücke im Hinblick auf Genauigkeit, Vollständigkeit und Transparenz zu gewährleisten. [20] Die EFS wurden von einem Konsortium, bestehend aus Vertretern von Hochschulen, Regierung- und Nicht-Regierungsorganisationen sowie Consultingunternehmen, entwickelt. Die Idee des Modells zu den „Ecological Footprints“ und die Gründung des „Global Footprint Network“ im Jahre 2003 stammen vom Schweizer Mathis Wackernagel [21, 22].

Die Standards zur Erfassung von Produkten stellen zwei Ansätze zur Berechnung des ökologischen Fußabdrucks eines fertigen Endproduktes vor: Die prozessbasierte Ökobilanz (P-LCA) und die auf Umwelteffekte erweiterte Input-Output-Bilanzierung (EEIO-LCA). Der Ansatz der P-LCA ermöglicht eine detaillierte Darstellung, da im Vergleich zur Input-Output-Analyse, gezielt einzelne Produkte betrachtet werden können. Im Vergleich dazu ist der EEIO-LCA Ansatz allgemeiner gefasst und sieht typischerweise keine Betrachtung einzelner Produkttypen vor. Als Vorteil wird hingegen dargestellt, dass die Produktionskette „Upstream“ vollständig abgedeckt werden kann, was bei der P-LCA im Allgemeinen nicht möglich ist [20]. Detaillierte Angaben, welche Aspekte in den einzelnen Lebensphasen und somit auch für die Bewertung eines Produktionsprozesses zu berücksichtigen sind, werden in den Standards nicht gegeben. Bezüglich der Erfassung von ökologischen Aufwendungen, die im Zusammenhang mit Produktionsanlagen stehen, finden sich keine Vorgaben. Die Standards verweisen allerdings bei der Ermittlung von neuen P-LCA Daten, wenn also für einen Lebensabschnitt eines Produktes nicht auf Datensätze aus Datenbanken zurückgegriffen werden kann, auf die Einhaltung der Vorgaben in den Normen DIN EN ISO 14040/44.

### DIN EN ISO 14040/44

Die DIN EN ISO 14040 und 14044 gehören zu der Normenfamilie, die das Umweltmanagement beschreibt. Die aktuellen Versionen beider Normen wurden vom CEN 2006 angenommen, wobei die DIN EN ISO 14040 die Normen DIN EN ISO 14040:1997, 14041:1998, 14042:2000 und 14043:2000 ersetzt.

Die DIN EN ISO 14040:2006 beschreibt die Grundsätze und Rahmenbedingungen, die bei der Erstellung einer Ökobilanz zu berücksichtigen sind. Sie beschreibt keine Methodik und liefert auch keine Hinweise, welche Methoden in den einzelnen Phasen der Ökobilanz zur Anwendung kommen sollen. Im Zusammenhang mit dem Festsetzen der Systemgrenzen, die für das zu bewertende Produkt<sup>4</sup> gelten, wird allerdings beispielhaft auf verschiedene Prozessmodule verwiesen. Diese Prozessmodule stellen die kleinsten Abschnitte im Lebenszyklus eines Produktes dar, wie z. B. „Herstellung von Betriebsstoffen“, für die Input- und Outputdaten zur Erstellung der Sachbilanz zu generieren sind. [14] Eines der benannten Prozessmodule umfasst die „Herstellung, Wartung und Außerbetriebsetzung der Produktionsanlagen“. Konkrete Vorgaben, wie und in welchem Umfang die Produktionsanlagen zu erfassen sind, liefert die Norm allerdings nicht.

Die DIN EN ISO 14044:2006 beschreibt, basierend auf den Vorgaben der DIN EN ISO 14040, eine Methodik bezogen auf die zu erfüllenden Anforderungen sowie eine Anleitung zur Erstellung einer Ökobilanz. Inhaltlich liefert diese Norm konkrete Vorgaben, wie und welche Inhalte in den einzelnen Phasen der Ökobilanz zu erarbeiten sind. Dies umfasst u. a. auch das Vorgehen bei der Datenerfassung, bei der Durchführung von Allokationen, bei der Auswahl der Wirkungskategorien und Charakterisierungsmodelle sowie Vorgaben zu den Beurteilungen, z. B. in Hinblick auf die Datenqualität. Hinzu kommen Angaben zu Abschneidekriterien sowie durchzuführende Prüfungen z. B. bzgl. Konsistenz, Sensitivität, Vollständigkeit etc. Methodisch sind zur Erfassung der Produktionsstätte für die Bewertung auch in dieser Norm keine Angaben vorhanden. Zu einem Produktionsprozess sind konkrete Vorgaben zu Inputs und Outputs aufgeführt, wobei die Produktionsanlage in diesem Zusammenhang nicht benannt ist.

### Handbuch der Ökobilanzierung

Der Leitfaden „Environmental Life Cycle Assessment of products. Guide and Backgrounds“ wurde 1992 vom Centre for Environmental Sciences – Leiden University (CML) in Zusammenarbeit mit der Netherlands Organisation for Applied Scientific Research (TNO) und dem Fuels and Raw Materials Bureau (Bureau B&G) erarbeitet. In den darauffolgenden Jahren folgten viele, vor allem methodische Entwicklungen [23], die im Rahmen eines fünfjährigen Forschungsprojektes „LCA in environmental policy“<sup>5</sup> (1997-2001) in einen überarbeiteten Leitfaden integriert wurden. Die Erstellung des neuen Leitfadens mit dem Titel „Handbook on Life Cycle Assessment. Operational Guide to the ISO Standards.“ erfolgte federführend durch das CML, unterstützt durch das Institute of Environmental Studies (Vrije Universiteit – IVM), der School of Systems Engineering, Policy Analysis and Management (Delft University of Technology – TUD/TB), Bureau B&G, dem Interfaculty Department of Environmental Science (University of Amsterdam – UVA), der IVAM-Environmental Research, TNO und der 2.-0 LCA Consultants.

Für die Erstellung von Ökobilanzen wurde neben den Angaben zu den Inputs und Outputs nach den in der DIN EN ISO 14041<sup>6</sup> genannten Datenkategorien, die Erfassung von Equipment in dem neu entwickelten Leitfaden vorgegeben. Als mögliches Vorgehen zur Erfassung von Anlagegütern bei unsicherer Datenla-

---

<sup>4</sup> Der Begriff „Produkt“ dient in der ISO EN DIN 14040/44 als Oberbegriff für vier verschiedene Kategorien: Dienstleistungen, Software, Hardware und verfahrenstechnischen Produkte.

<sup>5</sup> gefördert von Niederländischen Ministerien: Ministerium für Wohnungsbau, Raumordnung und Umwelt sowie dem Ministerium für Wirtschaft, dem Ministerium für Landwirtschaft, Naturschutz und Fischerei und dem Ministerium für Verkehr, Öffentlichkeitsarbeit und Wassermanagement

<sup>6</sup> Die DIN EN ISO 14041 wurde ebenso wie die Norm 14042 und 14043 2006 in die DIN EN ISO 14040 und 14044 überführt.

ge wurde der Ansatz von Erwin Lindeijer<sup>7</sup> vorgeschlagen. Der Untersuchungsansatz von Lindeijer zielt auf die Erfassung der Gebäude – ohne Maschinenpark – ab und dient einer ersten Abschätzung der ökologischen Auswirkungen, die durch Anlagegüter verursacht werden. Die Bewertung basiert auf nur wenigen Daten, wie bebauter Oberfläche, Höhe der Anlage, jährliche Produktionsmenge oder Lebensdauer [nach 23].

Die Abschätzung der ökologischen Aufwendungen kann dabei auf drei verschiedenen Stufen erfolgen, abhängig von den zur Verfügung stehenden Daten [nach 23]:

1. Basierend auf den durchschnittlichen Umweltwirkungen je m<sup>3</sup> Gebäudevolumen unter Berücksichtigung der bebauten Oberfläche und Höhe der Anlage (bzw. gesamte Gebäudevolumen) sowie der jährlichen Produktion des Unternehmens.
2. Basierend auf den Umweltwirkungen verschiedener Bauelemente unter Berücksichtigung der bebauten Oberfläche und Höhe der Anlage, der jährlichen Produktion und dem Bodenbelag der Anlage.
3. Basierend auf den Umweltwirkungen verschiedener Bauelemente und der gesamten Bodenfläche, Gebäudefläche und Gebäudevolumen sowie der abgeschätzten Massen von Maschinen und Equipment, der Art und Größe des Bodenbelags in der Anlage, der erwarteten Lebensdauer des Gebäudes, des jährlichen Energiebedarfs (wenn möglich) und der jährlichen Produktion des Unternehmens.

Die Recherchen der Autoren des Handbuchs zeigen, dass in LCA-Studien die Anlagegüter sehr oft abgeschnitten werden, ohne deren Relevanz in den Untersuchungen zu berücksichtigen. Abschneiden bedeutet in diesem Zusammenhang, dass die ökologischen Aufwendungen, die mit den Anlagegütern selbst einhergehen, in der Bewertung nicht erfasst werden. Zu diesen Aufwendungen gehören u. a. die Bereitstellung der verbauten Materialien, der Bau der Apparate und des Equipments, der Rückbau der Anlagen oder die damit verbundenen Transportwege.

Im Handbuch wird vorgeschlagen, dass bei Anlagegütern eine Orientierung an den Abschneidekriterien für zu erfassende Inputs und Outputs erfolgen sollte und damit Produktionsanlagen inklusive zugehöriges Equipment in jeder LCA-Studie zu berücksichtigen sind. Die in dem Handbuch differenzierten drei Ansätze zur Reduzierung oder Vermeidung von Abschneidung (Nutzung Input-Output-Modelle [24, 25], Sekundärdaten ähnlicher Module aus Datenbanken, wie z. B. ecoinvent [16], sowie festgelegte allgemeingültige Abschneidekriterien, wie z. B. in DIN EN ISO 14044 [26] verweisen auf Abschätzungen, um auftretende Datenlücken zu kompensieren. Eine konkrete Vorgabe bzw. Hinweise auf welcher Basis eine Abschätzung zu erfolgen hat oder wie die Lebensdauer der Anlage in die Betrachtung zu integrieren ist, werden nicht gegeben.

### Greenhouse Gas Protocol (GHG – Protocol)

Das GHG-Protocol (Treibhausgas-Protokoll) ist ein vom World Resource Institute (WRI) und World Business Council for Sustainable Development (WBCSD) entwickelter Standard zur Berichterstattung über Treibhausgasemissionen [27]. Dieser Standard wird von vielen Unternehmen der deutschen Industrie zur Ermittlung der eigenen Treibhausgasemissionen angewandt, die diese der Öffentlichkeit z. B. im jährlichen Corporate Responsibility Bericht präsentieren - vorrangig für die direkten (Scope 1) und indirekten (Scope 2) Luftemissionen. Zu den direkten Emissionen zählen Treibhausgasausstöße, die u. a. unmittelbar bei der Verbrennung fossiler Energieträger (z. B. Erzeugung Strom, Dampf) und bei Prozessen freigesetzt oder durch den Fuhrpark verursacht werden. Die indirekten Emissionen umfassen Treibhausgasfreisetzungen, die u. a. bei der Bereitstellung der zugekauften Energien (z. B. Strom, Heißwasser, Fernwärme) auftreten. Diese Angaben finden sich u. a. in den seit 2017 gesetzlich vorgeschriebenen jährlich zu verfassenden Corporate Responsibility Reports bzw. in der Umweltberichterstattung der Unternehmen wieder [28].

<sup>7</sup> Lindeijer, E., 1998. Kapitaalgoederen in LCA data van bedrijven. IVAM-ER, Amsterdam

Im Rahmen einer ökologischen Betrachtung nach den Vorgaben des GHG-Protocol gilt es neben den Emissionen nach Scope 1 und 2 auch den kompletten Lebenszyklus der Produkte/Dienstleistungen des Unternehmens zu erfassen. Dieser umfasst u. a. auch die Upstream- (z. B. Bereitstellung und Transport von Rohstoffen oder Vorstufen) und Downstream-Aktivitäten (z. B. Transport von Produkten, Abfallbehandlung, Nutzungsphase) sowie Dienstreisen der Mitarbeiter. In diesem Zusammenhang gibt der Standard vor, dass Anlagegüter zu erfassen sind. Diese sollen im Jahr der Anschaffung vollständig ökologisch abgeschrieben werden.

### ILCD-Handbuch

Das ILCD-Handbuch stellt eine Reihe von technischen Dokumenten zur *Guten Praxis* für Ökobilanzen in Behörden und Unternehmen bereit. Diese Leitlinie zielt, aufgrund der Vielzahl an Möglichkeiten, auf die Sicherstellung von Konsistenz und Qualität bei der Erstellung sowie Berichterstattung für eine LCA-Bewertung nach den internationalen Standards DIN EN ISO 14040 und 14044. Die Entwicklung des Handbuchs erfolgte auf Initiative der Europäischen Kommission. [29]

Bezüglich eines einzelnen Produktionsprozesses werden konkrete Angaben zu den zu erfassenden Inputs und Outputs gegeben, die u. a. auch die Anlagegüter umfassen. Im Hinblick auf die Anlagen bzw. Maschinen und Equipment sind die Aktivitäten *Vorbereitung*, wie z. B. Inertisieren, *Durchführen Prozess*, *Stand-by Zeiten* und *Nachbereitung*, wie z. B. Reinigung, aufgeführt. Um die Produktionsanlage selbst in den Betrachtungen mit zu berücksichtigen, werden bei fehlenden Daten zur Herstellung eine Abschätzung der verbauten Materialien und deren Masse sowie deren jeweilige Ausführung (z. B. Rohre, Folie, Profil oder Fertigteil) empfohlen. Die ermittelten ökologischen Aufwendungen sind auf die erwartete Produktionsdauer in der Anlage verteilt. [30] In Verbindung mit einem einzelnen Apparat gelten verursachte Aufwendungen, wie Wartung und Reparatur, als zusätzlich zu erfassende Prozesse, die dem einzelnen Equipment zuzuordnen sind.

Die Berücksichtigung von Anlagegütern wird als ein Beispiel genannt, welches aufgrund fehlender Vorgaben sowohl in Bezug auf die Abbildung und das Einbeziehen in ökologische Betrachtungen bzw. Analysen durch die verschiedenen Anwender auf unterschiedlichste Weise erfolgt. Häufig werden diese weggelassen, obwohl Betrachtungen gezeigt haben, dass Produktion und Wartung der Anlagegüter stellenweise den Großteil der ökologischen Aufwendungen im Lebenszyklus verursachen können (genanntes Beispiel: Windkraftanlagen).

### PEF-Leitfaden

Von der durch den europäischen Rat beauftragten europäischen Kommission wurde am 09. April 2013 eine Empfehlung „für die Anwendung gemeinsamer Methoden zur Messung und Offenlegung der Umweltleistung von Produkten und Organisationen“ veröffentlicht. Der Leitfaden zielt darauf ab, wie bereits geschrieben, einen einheitlichen Standard einzuführen. Die Inhalte des Leitfadens stützen sich auf die im Vorfeld aufgeführten Ansätze, mit Ausnahme des GHG-Protocol.

Der Leitfaden liefert eine Methode zur Ermittlung der Umweltauswirkungen über den Lebensweg eines Produktes. Dies umfasst die Modellierung unter Berücksichtigung von Stoff- und Energieflüssen, Emissionen und Abfallströmen. Die Vorgaben in der Leitlinie sehen bei der Erstellung von *Product Environmental Footprints* (PEF) vor, dass die Aufwendungen, die durch Investitionsgüter verursacht werden, bei den Betrachtungen mit zu berücksichtigen sind. Zu den Investitionsgütern gehören demnach die in Produktionsprozessen eingesetzten Maschinen, die Gebäude, die Büroausstattung, eingesetzte Transportfahrzeuge und die Verkehrsinfrastruktur. Diese sind linear abzuschreiben, wobei die erwartete Lebensdauer der Investitionsgüter zu berücksichtigen ist und nicht der ökonomische Buchwert von 0. Das Abschneiden von Inputs oder Outputs wird explizit ausgeschlossen. [5]



Die Tab. 2.1 fasst im Überblick die in den Standards, Leitlinien, Handbüchern und Normen zu findenden Vorgaben und Ansätze in Bezug auf die Berücksichtigung und Erfassung der ökologischen Aufwendungen, die durch die Produktionsanlage und ihre Infrastruktur verursacht werden, zusammen.

Tab. 2.1: Übersicht bzgl. Vorgaben zur Berücksichtigung von Produktionsanlagen und deren Infrastruktur in den Standards, Leitlinien, Handbücher und Normen

	Produktionsprozess		Produktionsanlage und Infrastruktur				Abschneidekriterien	Bemerkungen
	Berücksichtigung	Vorgaben Input/Output	Berücksichtigung	Ansätze zur Abschätzung	Instandhaltung	Lebensdauer		
<b>Ecological Standard 2009 [20]</b>	x	- <sup>1</sup>	-	-	-	-	k.A.	<sup>1</sup> Verweis auf Datenbanken bzw. den Vorgaben in DIN EN ISO 14040/44
<b>DIN EN ISO 14040/44 [14]</b>	x	x	x	x <sup>2</sup>	-	-	x	<sup>2</sup> Prozessmodul "Herstellung, Wartung und Außerbetriebsetzung Produktionsanlage"
<b>Handbuch der Ökobilanzierung [23]</b>	x	x <sup>3</sup>	x	x <sup>4</sup>	-	x <sup>5</sup>	x <sup>6</sup>	<sup>3</sup> Verweis auf die Datenkategorien in der DIN EN ISO 14041 <sup>4</sup> Abschätzung auf Basis Gebäude (ohne Maschinenpark): Gebäudevolumen, Produktionsvolumen, abgeschätzten Massen von Maschinen u. Equipment, Bodenbelag Anlage, Energiebedarf <sup>5</sup> Bezugsgröße: Gebäude <sup>6</sup> Ansätze zur Reduzierung vorgeschlagen
<b>GHG – Protocol [27]</b>	x	-	x	-	-	x <sup>7</sup>	k.A.	<sup>7</sup> Abschreibung im Jahr der Anschaffung
<b>ILCD-Handbook [30]</b>	x	x <sup>8</sup>	x	x <sup>9</sup>	-	x	x <sup>10</sup>	<sup>8</sup> einbeziehen von: Rüsten, Prozess, Stand-by Betrieb (Basisbetrieb), Nachbereitung <sup>9</sup> Abschätzung auf Basis verbauter Materialien und deren Masse sowie deren Ausführung <sup>10</sup> orientiert an den Angaben in der DIN EN ISO 14044
<b>PEF-Leitfaden [5]</b>	x	x	x	-	-	x	-	

Die verschiedenen Vorgaben weisen sowohl den Produktionsprozess als auch die Produktionsanlage teilweise mit konkreten Angaben bzgl. der zu erfassenden Inputs und Outputs bzw. Betrachtungszeiträume für die Berücksichtigung der Lebensdauer aus.

In allen hier aufgeführten Quellen wird die Erfassung von Produktionsprozessen im Zuge von Lebenszyklusbetrachtungen gefordert. Allerdings finden sich lediglich in den internationalen Normen 14040/44, dem ILCD-Handbook und dem PEF-Leitfaden konkrete Angaben zu den zu erfassenden Inputs und Outputs. Hervorzuheben ist an dieser Stelle die Forderung, auch die Produktionsstätten bei ökologischen Betrachtungen zu berücksichtigen. Vorschläge bzw. mögliche Ansätze, wie dies realisiert werden könnte, geben hier das Handbuch zur Ökobilanzierung, das auf verschiedenen in der Fachliteratur publizierten methodischem Vorgehen verweist, sowie die Norm und das ILCD-Handbook. Die Berücksichtigung der Lebensdauer von Anlage und Peripherie wird in vier der sechs Dokumente aufgeführt, wobei unterschiedliche Ansätze bzgl. Abschreibungszeitraum und Bezugsgrößen, wie Gebäude oder Anlage, angenommen werden. Die „Langlebigkeit“ von Anlagegütern bzw. einzelнем Equipment wird allerdings lediglich in drei der aufgeführten Quellen berücksichtigt. Das GHG-Protokoll sieht eine vollständige Abschreibung direkt bei Anschaffung vor. Bei Anwendung dieses Ansatzes auf Produktionsprozesse würde dies für das Betrachtungsjahr zu einer Verzerrung der zugeordneten Umweltwirkungen führen. Daraus resultiert eine willkürlich anmutende Belastung. Die Ergebnisse der Bewertung weisen im Folgejahr eine verbesserte ökologische Performance auf, ohne dass reale Änderungen am Produktionsprozess erfolgt sind. Eine Erfassung von Aufwendungen über die Lebensdauer, wie z. B. die Instandhaltung, wird in keinem der Ansätze konkret vorgegeben.

Zur ökologischen Bewertung von Produktionsprozessen in der stoffwandelnden Industrie werden weiterführend in Kapitel 2.3 Beispiele für die Umsetzung und Anwendung gezeigt sowie der entwickelte Ansatz zur Datenerfassung vorgestellt, der in dieser Arbeit als Basis dient. Außerdem wird der Einflussfaktor Produktionsanlage genauer betrachtet und die mit dem Lebensweg von Anlagenequipment verbundenen materiellen Aufwendungen, die in der Literatur belegt sind, auszugsweise aufgezeigt.

### 2.3 Prozessökobilanz

Die Erfassung von Umweltwirkungen verursacht durch Produktionsprozesse der stoffwandelnden Industrie, begleitet Unternehmen seit einigen Jahren – vorrangig geprägt durch staatliche Forderungen, wie z. B. dem Emissionshandelsgesetz [31] oder dem Gesetz zur (...) Berichterstattung der Unternehmen (...) [28]. Für die Unternehmen ist die Wahrnehmung in der Öffentlichkeit außerdem eine immer wichtiger werdende Einflussgröße auf ihr Handeln und strategische Ausrichtung, als auch bei der Gewinnung von Fach- und Nachwuchskräften. Die Offenlegung von Umweltwirkungen sowohl gegenüber dem eigenen Kunden als auch indirekt gegenüber den Endverbrauchern kann einen klaren Wettbewerbsvorteil in dem B2B geprägten Markt darstellen. Auch für Investoren, wie z. B. die Venture Capital Firma Earlybird, Berlin, oder der globale Vermögensverwalter BlackRock<sup>8</sup> hat die Nachhaltigkeit in den Unternehmen einen immer größeren Stellenwert ein. Neben den finanziellen Erträgen wird auch eine Übernahme von Verantwortung für Umwelt und Gesellschaft von den Firmen erwartet. Diese Forderungen bedürfen nur bedingt eine detaillierte Betrachtung der einzelnen Produktionen, sondern sehen diese eher als Black-Box, d. h. die Erfassung der Inputs und Outputs erfolgt ohne konkrete Kenntnis der eigentlichen Prozessabläufe wie z. B. betriebene Grundoperationen oder Apparate. Für interne Betrachtungen ist allerdings eine fundierte Datenglage elementar, um einen Mehrwert zu generieren, wie z. B. zur Identifizierung von Ansatzpunkten

---

<sup>8</sup> <https://www.blackrock.com/de/privatanleger/themen/nachhaltig-investieren>, „Der Nachhaltigkeitsansatz von BlackRock [...] sehen uns in der Verantwortung, die Unternehmen, in die wir investieren, zu überwachen, und auf konstruktive und vertrauliche Weise mit ihnen zusammenzuarbeiten, [...]“

zur Verbesserung der ökologischen Performance einzelner Prozesse oder Betriebe, siehe u. a. Tangsubkul et al. [32], Scipioni et al. [33] oder Jacquemin et al. [7]. Dazu finden sich in der Literatur sowohl Untersuchungen im Rahmen der Forschung und Entwicklung als auch für bestehende Produktionen. Im Bereich der stoffwandelnden Industrie haben sich ökologische Bewertungen von Lebenszyklen oder einzelnen Abschnitten, vor allem im universitären Forschungsumfeld, als Tool zur Berücksichtigung von Umweltauswirkungen verbreitet. Sowohl das Re-Design als auch die Identifizierung von Hotspots bzw. Verbesserungsansätzen stehen dabei im Mittelpunkt, wie nachfolgend aufgezeigt wird.

### 2.3.1 Anwendung in der Industrie und Forschung

Bereits in den 90iger Jahren des letzten Jahrhunderts wurden Umwelteinflüsse im Prozessdesign berücksichtigt. Mittels Ansätze, wie z. B. Design for Environment (DFE) oder dessen Gegenpart Life Cycle Assessment (LCA) [34], wird darauf abgezielt, Umweltwirkungen bereits während der Designphase im Blick zu behalten, um nachträgliche Reduzierungsmaßnahmen vorzubeugen [35]. Allen und Shonnard [36] diskutieren zu Anfang der 2000er Jahre die Verbindung von Produkt- und Prozesslebenszyklus anhand von Untersuchungen an zwei verschiedenen Synthesewegen zur Herstellung von Methacrylsäuremethylester und zeigen, dass eine frühzeitige Integration von ökologischen Aspekten in der Entwicklung der Produktionsprozesse zur Herstellung eben jener Produkte notwendig ist [36].

Verschiedene Autoren haben in den darauffolgenden Jahren den Einsatz von ökologischen Analysen nach dem LCA-Ansatz als Basis für Entscheidungsunterstützungen im Rahmen von Prozessentwicklung und -design publiziert. So untersuchen z. B. die Autoren Kralisch und Kreisel [37, 38] die Überführung eines absatzweisen, makroskaligen Betriebes für eine zweistufige chemische Synthese in eine kontinuierliche Verfahrensweise unter Nutzung von mikrostrukturierten Reaktoren. Die Umstellung des Verfahrens bedeutet in Bezug auf die Umweltwirkungen eine deutliche Verbesserung, die zurückzuführen ist auf einen verringerten Energiebedarf, den reduzierten Lösemittel- und Eduktbedarf sowie den daraus resultierenden geringeren Entsorgungsaufwand der anfallenden Reststoffe. Die Bereitstellung von einer Vielzahl von Lösemitteln in Kombination mit verschiedenen Entsorgungswegen und die damit verbundenen ökologischen Aufwendungen haben u. a. auch die Autoren Amelio et al. [39] und Hellweg et al. [40] zusammengetragen. Basierend auf solchen Daten kann in frühen Phasen der Prozessentwicklung die Auswahl von ökologisch vorteilhaften Lösemitteln unterstützt werden. Ebenfalls die Überführung einer absatzweisen Produktion in eine kontinuierliche Betriebsweise im Sektor Spezialchemie untersuchen Grundemann und Scholl [41] für die Produktion von Fasermalertinte und Paschetag et al. [42] sowie Peschel et al. [43] für die Herstellung von Dispersions-Wandfarben. Dabei stehen neben der ökonomischen [41, 43] auch die ökologische [41, 42] Vorteilhaftigkeit im Vordergrund. Die forschungsbegleitende ökologische Betrachtung unterstützt in diesen Arbeiten die Identifizierung von umweltfreundlicheren Stoffen und Prozessführung. Dies zeigt sich ebenso in der Arbeit von Gericke et al. [44], die eine katalytisch unterstützte Reaktion am Beispiel der Hydrierung von Glukose zu Sorbitol im absatzweisen als auch kontinuierlichen Betrieb umfasst. Anhand der Ergebnisse erfolgt die Ableitung von Handlungsempfehlungen, um die ökologischen Aufwendungen einer Produktion zu senken.

Den Einfluss der Betriebsführung auf die ökologische Performance eines Prozesses zeigen ebenfalls Kuschnerow et al. [45, 46]. In ihren Arbeiten beschäftigen diese sich mit einer homogen katalysierten Umesterung. Es werden experimentelle Untersuchungen zu alternativen, recycelbaren Katalysatoren und deren Anwendung im Prozess durchgeführt, mit dem Ziel, eine ökologisch vorteilhafte Prozessführung und -design mit Schwerpunkt auf der Aufbereitung der als Katalysatoren eingesetzten Ionischen Flüssigkeiten zu erreichen. In diesem Zusammenhang wird mittels ökologischer Bewertung gezeigt, wie hoch die Anzahl der Recyclingzyklen des Katalysators sein muss, um mit dem neu entwickelten Prozess eine bes-

sere ökologische Performance gegenüber dem herkömmlichen Verfahren zu erreichen. Zu ähnlichen Ergebnissen führen die Untersuchungen anderer Autoren, z. B. [47, 48], die in ihren Betrachtungen zu Produktionsprozessen mit ILs als Katalysatoren ebenfalls ökologische Aspekte integrieren.

Einen Großteil der Daten zu den betrachteten Inputs und Outputs, die in der Forschung und Entwicklung genutzt werden, basieren i. d. R. auf Messungen in Labor-, Technikums- oder Pilotanlagen sowie Annahmen, ersten Abschätzungen oder generischen Datensätzen. Stellenweise werden auf Grund der Datenverfügbarkeit und Aussagekraft nur einzelne Schwerpunkte in die Bewertung integriert oder versucht, mittels Scale-up Faktoren die spätere Realität in der etablierten Produktion abzuschätzen (siehe dazu z. B. Piccinno et al. [49] oder Gavankar et al. [50]). Bei der Bewertung von bestehenden Produktionen kann meistens auf eine deutlich bessere Datenbasis zurückgegriffen werden bzw. Daten mit höherer Genauigkeit generiert werden, da eine Verifizierung mit in den Anlagen bzw. Produktionsstätten erfassten Daten möglich ist. Dies zeigen u. a. die Untersuchungen von Capello et al. [51] zu Destillationsprozessen. Die Erfassung zielt auf die Generierung von Sachbilanzdatensätzen für ökologische Bewertungen dieses in der stoffwandelnden Industrie sehr häufig vorkommenden Stofftrennungsvorgangs. Anhand des Recyclings von Lösemittelabfällen werden Daten bzgl. des Bedarfs an Elektrizität, Dampf, Kühlwasser und Inertgas berücksichtigt. Ebenfalls mit erfasst sind die eingesetzten Hilfsstoffe (u. a. für Reinigung und pH-Wert Regulierung), das rückgewonnene Lösemittel, Abfälle, Abwasser und Abluft. Sowohl die aufgenommenen als auch rechnerisch auf Basis verfahrenstechnischer Grundlagen und zentralen Verbrauchsdaten der Anlagen ermittelten Daten werden mittels statistischer Analysen untersucht und Schwankungsbreiten aufgezeigt, die u.a. auf unterschiedliche, apparative Ausführungen des Equipments zurückzuführen sind. [51]

Die Autoren Ott et al. [52] bewerten eine API<sup>9</sup>-Produktion der Fa. Sanofi, Schweiz, mit dem Ziel, Bottlenecks zu identifizieren und Verbesserungspotentiale durch Ansätze zur Prozessintensivierung, wie die Umstellung von einer absatzweisen auf eine kontinuierliche Produktion und alternative Katalysatorsysteme, abzuleiten. Dazu werden cradle-to-gate Betrachtungen auf Basis von Massenbilanzen durchgeführt, wobei die Schließung von Datenlücken nach dem Ansatz von Hirschier et al. [53] erfolgt. Um Ansatzpunkte zur Reduzierung der ökologischen Aufwendungen zu identifizieren, werden Multiparametervariationen zum Screening eingesetzt, in denen die verschiedenen Prozessvarianten durch Black-Boxen repräsentiert werden. Ebenfalls im Kontext der API-Produktion leiten Parvatkar et al. [54] Zusammenhänge zwischen der Anzahl der Synthesestufen, dem Molekulargewicht, dem Molekülkomplexität und den mit der Produktion verbundenen Umweltauswirkungen ab. Dies erfolgt auch in diesem Fall mittels cradle-to-gate Betrachtungen, durchgeführt auf Basis von Massen- und Energiebilanzen verschiedener Syntheserouten. Die genutzten Daten stammen aus Patenten, Forschungsaufsätzen sowie Industrieangaben. Ebenfalls ökologische Bewertungen für pharmazeutische Wirkstoffsynthesen erstellen Jiménez-González et al. [55] mit dem Ziel, Hotspots in den Produktionsprozessen zu identifizieren. Die Analyse und Bewertung erfolgt mittels eines Ansatzes zur Auswahl von Lösemitteln in der pharmazeutischen Produktion der in Zusammenarbeit mit GlaxoSmithKline, USA, entwickelt und um Lebenszyklusinformationen erweitert wurde [56]. In der Bewertung sind sowohl die eingesetzten Rohstoffe (Edukte, Lösemittel, Dampf, Wasser, etc.) als auch Energiebedarfe, Abfallbehandlung und Transporte berücksichtigt. Die Daten von Jiménez-González et al. [55] werden von Wernet et al. [57] zur Einordnung der Ergebnisse einer ökologischen Bewertung im Bereich der Feinchemikalienherstellung genutzt, die auf die Erweiterung der Datenbasis und Aussagen zur Produktion von APIs abzielt. Dazu analysieren die Autoren die Synthese eines API (ohne Aufreinigung und Formulierung), die bei Hoffmann-LaRoche in Basel, Schweiz, betrieben wird. Besonderes Augenmerk der Betrachtung liegt auf den energieabhängigen Einflussfaktoren sowohl direkt als auch indirekt gebunden in Substanzen. Basierend auf der Evaluierung erfolgt die Schlussfolgerung, dass die Ergebnisse stark abhängig von der Komplexität der Wirkstoffmole-

---

<sup>9</sup>Active pharmaceutical ingredient (API)

küle sind. Die Produktionsprozesse weisen außerdem, aufgrund der Komplexität und den im Vergleich zu anderen Bereichen der chemischen Industrie (z. B. Bulkchemie oder Erdölraffination) kurzen Entwicklungszeiten, ein großes Verbesserungspotential auf. Van der Vorst et al. [58] bewerten API-Synthesen im Mehrweckanlagen-Umfeld basierend auf Massen- und Energiebilanzen nach dem Ansatz von Van der Vorst et al. [59], kombiniert mit Exergiedaten nach dem Ansatz von Dewulf et al. [60] in verschiedenen Systemgrenzen, u. a. cradle-to-gate. Ebenfalls einen Schwerpunkt auf die Bewertung von Produktionsprozessen der Spezialchemie im Mehrweckanlagenumfeld zeigen Wesche et al. [61]. In diesem Zusammenhang wird der Einfluss der für Mehrweckanlagen typischen absatzweisen Betriebsführung auf die Umweltperformance einer Grundoperation quantifiziert.

Eine cradle-to-gate Betrachtung führen ebenso Gasafí et al. [35] durch, mit dem Ziel Hotspots im Lebenszyklus einer Produktionstechnologie zu identifizieren. Im Fokus steht die überkritische Wasservergasung zur Behandlung von organischen Rohstoffen mit hohem Feuchtigkeitsgehalt. In den Untersuchungen wird mittels Dominanzanalyse auf Basis der Inputs und Outputs eine Bewertung des Prozesses vorgenommen. Um Verbesserungsansätze abzuleiten, verweisen die Autoren auf die Notwendigkeit einer detaillierten Betrachtung und Abbildung der einzelnen Prozessabschnitte. Eine ähnliche Aussage treffen Van Kalker et al. [62]. Sie verweisen auf die Notwendigkeit sämtliche Inputs und Outputs und nicht nur die Synthese des Produktmoleküls betreffend, sondern auch der Up- und Downstream gelagerten Prozessabschnitte, zu berücksichtigen. Ihre Untersuchungen zeigen, dass scheinbare positive Effekte in der Synthese aufgrund von Anforderungen und Randbedingungen, wie zusätzliche Inputs oder geringere Lösemittelkonzentrationen, im Up- und Downstream aufgehoben werden oder ins Negative umschlagen können.

Die hier aufgeführten Beispiele aus der Literatur zeigen für die verschiedenen Zweige der stoffwandelnden Industrie, dass der Einsatz der ökologischen Bewertung die Entwicklung und das Design bzw. Re-Design von Produktionsprozessen mit einer verbesserten Umweltpformance unterstützt. In einem Review von Jacquemin et al. [7] zur Anwendung der Ökobilanzierung in der Prozessindustrie wird die Analyse von Produktionsprozessen als neuer Ansatz zur Entwicklung umweltfreundlicher Produktionen präsentiert. Die Verknüpfung von Lebenszyklusbetrachtungen und Verfahrenstechnik stellt die Basis dar, um den Einfluss von Prozessbedingungen auf die ökologischen Aufwendungen der Produktion analysieren zu können. [7] Bei Analysen in der Forschung und Entwicklung treten häufig große Datenlücken auf, sodass die Bewertungen erst durch die Ergänzung von abgeschätzten oder rechnerisch ermittelten Daten möglich werden. In diesem Umfeld stehen eher richtungweisende Aussagen im Vordergrund, wie z. B. Art des Lösemittels oder Katalysatoren. Die bei bestehenden Produktionen deutlich umfangreichere Datenbasis bietet auch retrospektiv die Möglichkeit, die Umweltperformance zu verbessern. Wobei anhand einzelner Analysen deutlich wird, dass für eine verlässliche Aussage die einzelnen Prozessabschnitte detailliert betrachtet werden sollten. Außerdem ist neben der Synthese, die bei vielen Untersuchungen im Mittelpunkt steht, auch eine Beachtung der vor- und nachgelagerten Prozessschritte notwendig. Dies gilt sowohl für die Analysen im Rahmen von Forschung und Entwicklung als auch bestehender Prozesse.

### 2.3.2 Inputs und Outputs eines Prozesses als Basis für die ökologische Bewertung

Wie in Kapitel 2.2 anhand verschiedener Literaturquellen aufgezeigt, werden Prozessökobilanzen häufig mit unterschiedlichen Schwerpunkten, wie einem Screening nach Verbesserungsansätzen, der Darstellung von Zusammenhängen, der Identifikation von Hotspots sowie der Schaffung einer fundierten Datenbasis, erstellt. In diesem Zusammenhang ist eine übersichtliche, strukturierte Methodik zur Datenerfassung zwingend erforderlich und ermöglicht nicht nur eine transparente Ermittlung ökologischer Aufwendungen, sondern auch eine gezielte Analyse hinsichtlich verfahrenstechnischer Verbesserungsansätze. Für das einzelne Unternehmen besteht so auch die Chance, Prozesszusammenhänge zu erkennen und -analy-

sen zu generieren, aus denen Verbesserungsansätze abgeleitet und Einsparpotentiale in Bezug auf den Energie- und Ressourceneinsatz aufgezeigt werden können. [61]

Die Autoren Wesche et al. [61] schlagen in diesem Zusammenhang eine Klassifizierung der eintretenden und austretenden Materialien und Energien vor, die in dieser Arbeit angewandt wird. In Abb. 2.3 sind die Inputs und Outputs eines Produktionsprozesses im Überblick zusammengestellt, welche im Einzelnen nachfolgend beschrieben sind.

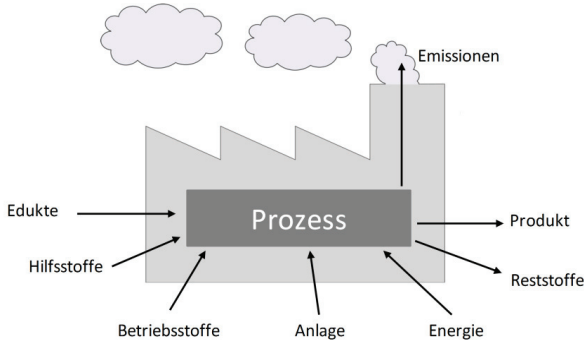


Abb. 2.3: Überblick über die verschiedenen Inputs und Outputs eines Produktionsprozesses [61]

Die Unterteilung der eintretenden Stoffe und Energien erfolgt inputseitig in *Edukte* (Ed), *Hilfsstoffe* (HS), *Betriebsstoffe* (BS) und *Energie* (E) sowie die *Anlage* (A), in der der Prozess betrieben wird. Outputseitig wird unterschieden in *Reststoffe* (RS), *Emissionen* (Em) und dem *Produkt* (Pr). Die Klassifizierung orientiert sich an den verschiedenen Vorgaben in den Standardwerken [30], Normen [26] und dem PEF-Leitfaden [5]. Allerdings wird für die hier gezeigte Anwendung inputseitig eine Unterscheidung in Betriebsstoffe, Hilfsstoffe und Edukte vorgenommen. Dies geschieht vor dem Hintergrund, dass bei der Analyse und Bewertung von bestehenden Produktionsprozessen i. d. R. die Identifizierung von Verbesserungsansätzen im Fokus steht, die ohne grundlegende Änderung der eigentlichen Synthese, dem Startpunkt der Prozessentwicklung, und damit der eingesetzten Edukte und Hilfsstoffe realisiert werden können. Diese Änderungen sind bei bestehender Produktion aufgrund der damit einhergehenden hohen Kosten [63] in den meisten Fällen keine Option.

Als Edukte werden die Rohstoffe oder Zwischenstufen bezeichnet, aus denen das Produkt hergestellt wird. Dieses Produkt beschreibt i. d. R. das aufgereinigte Zielmolekül oder eine Zwischenstufe. Sämtliche Stoffe, die zur Realisierung einer Grundoperation<sup>10</sup> (GO) benötigt werden, fallen in die Klasse der Hilfsstoffe. Dazu zählen z. B. Katalysatoren oder Lösemittel, die zur Durchführung der Verfahrensaufgabe notwendig sind, aber nicht in das Produkt übergehen. Als Betriebsstoffe werden Inputs bezeichnet, die zum Betreiben der Anlage notwendig sind (z. B. Schmierstoffe, Regelluft, Reinigungsmittel, etc.) bzw. indirekt zur Durchführung einer GO (z. B. Inertgase, Wärmeträgermedien, etc.) benötigt werden. Die Klassifizierung Energie umfasst hier den Verbrauch an elektrischem Strom. Für die ökologische Bewertung sind außerdem die Aufwendungen, die mit der Bereitstellung und Entsorgung der Produktionsanlage sowie der Instandhaltung über deren Lebensdauer einhergehen, zu erfassen. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass die hier vorgeschlagene Klassifizierung nicht alle Investitionsgüter nach den Definitio-

<sup>10</sup> Grundoperationen beschreiben in diesem Zusammenhang physikalische Vorgänge, die den Zustand eines Stoffes oder Stoffgemisches ändern (z. B. Trennen oder Mischen, stellenweise mit der Änderung des Aggregatzustandes verbunden). Typische GO sind u.a. Extraktion, Destillation, Trocknung oder Kristallisation. Chemische Reaktionen werden in dieser Betrachtung ebenfalls als Grundoperation bezeichnet, auch wenn dabei eine Veränderung an der chemischen Struktur auftritt.

nen in den Handbüchern [23, 30] und der PEF-Leitlinie [5] sowie deren Verbräuche umfasst. Unter anderem sind Gebäude, Büroausstattung, Transportfahrzeuge und Verkehrsinfrastruktur und deren Betrieb bzw. Nutzung nicht betrachtet. Dies ist begründet durch den Fokus auf einen einzelnen Produktionsprozess und dessen Performance, die bezogen auf die Produktionsanlage unmittelbar beeinflusst werden von Apparaten und Equipment sowie deren Ausführung (Material und Bauform).

Die unter dem Output Reststoffe zusammengenommenen Stoffe können sowohl Nebenprodukte als auch Abfälle darstellen. Die Berücksichtigung von Nebenprodukten erfolgt i. d. R. über Allokationsansätze, da ein Teil der ökologischen Auswirkungen diesen zugeordnet werden bzw. für diese Nebenprodukte Gutschriften erfolgen. Empfehlungen zum Vorgehen bei Allokationssituationen sind z. B. in der DIN EN ISO 14044 [26] oder in der PEF-Leitlinie [5] gegeben. Die Erfassung der Abfälle erfolgt entsprechend der zur Verfügung stehenden Entsorgungswege, wie z. B. thermische Verwertung, Recycling (in der stoffwandelfnden Industrie häufig die Rückgewinnung von Lösemitteln) oder Abwasserbehandlung. Zu der Outputklasse Emissionen werden die direkten Prozessemissionen gezählt, wie z. B. die CO<sub>2</sub>-Bildung bei chemischen Reaktionen und Verbrennungen oder flüchtige Lösemittel.

Zu den einzelnen Input- und Outputmengen werden zum Teil generische Datensätze aus Datenbanken, wie z. B. ecoinvent, GaBi oder ELCD, für die Ermittlung der Sachbilanz genutzt. Diese Datensätze stellen die entsprechenden Elementarflüsse bereit, die die Erstellung der Sachbilanz bzw. des Ressourcennutzungs- und Emissionsprofils ermöglichen. Diese werden mit Charakterisierungsfaktoren, die abhängig sind von den für die betrachteten Wirkungskategorien gewählten Charakterisierungsmodellen, multipliziert. Anschließend erfolgt in den Wirkungskategorien die Aggregation zum Wirkungsindikatorwert, der die Umweltwirkungen quantitativ repräsentiert. [61]

Wie von Wesche et al. [61] beschrieben, ist „*der durch einen Produktionsprozess verursachte Gesamtaufwand (...) die Summe der ökologischen Aufwendungen (environmental expenditures, EE) der Input- und Outputmengen bezogen auf eine Wirkungskategorie WK, wie z. B. Klimaänderung oder Ökotoxizitäten (vgl. Gl. 2.1).*

$$EE_{WK,Prozess} = EE_{WK,Ed} + EE_{WK,HS} + EE_{WK,BS} + EE_{WK,E} + EE_{WK,Em} + EE_{WK,RS} + EE_{WK,A} \quad (2.1)$$

*Die ökologischen Aufwendungen in Bezug auf Edukte, Hilfsstoffe, Emissionen und Energie ergeben sich somit jeweils aus der Summe der Wirkungsindikatorwerte WIW der einzelnen Stoffe bzw. Energien. Gl. 2.2 zeigt dies beispielhaft für die Hilfsstoffe.*

$$EE_{WK,HS} = \sum_{j=1}^m WIW_j \quad (2.2)$$

*Zur Ermittlung der ökologischen Aufwendungen, die durch den Bedarf an Betriebsstoffen entstehen, ist zwischen Betriebsstoffen, die im Kreislauf geführt werden, und direkten Verbrauchsstoffen V zu unterscheiden. So wird z. B. das zum Inertisieren genutzte Gas im Allgemeinen der Abluftverwertung zugeführt. Betriebsstoffe, die dagegen Wärmequellen und -senken für den Prozess bereitstellen, werden i. d. R. im Kreislauf geführt und entsprechend wiederaufbereitet. Für die ökologische Bewertung sind der Ressourcen- und Energiebedarf sowie die anfallenden Emissionen relevant, die mit der Wiederaufbereitung AUF anfallen. Somit errechnen sich die ökologischen Aufwendungen für die Betriebsstoffe nach Gl. 2.3.*

$$EE_{WK,BS} = \left( \sum_{j=1}^k WIW_j \right)_V + \left( \sum_{j=1}^l WIW_j \right)_{Auf} \quad (2.3)$$

*Um die durch die anfallenden Reststoffe verursachten ökologischen Aufwendungen zu ermitteln, muss zunächst eine Unterteilung in zu entsorgenden Abfällen AB und weiternutzbaren Stoffen ST<sub>NUTZ</sub> erfolgen. Zu letzteren zählen z. B. Adsorbentien wie Kieselgel, die in anderen Produktionen (u. a. Farbherstellung)*

## 2 Ökologische Bewertung von Produktionsprozessen

Verwendung finden können. In solchen Fällen wird unter Berücksichtigung von Allokationskriterien dem Prozess eine ökologische Gutschrift (vgl. Gl. 2.4) hinzugerechnet.

$$EE_{WK,RS} = -\left(\sum_{j=1}^l WIW_j\right)_{ST_{Nutz}} + \left(\sum_{j=1}^k WIW_j\right)_{AB} \quad (2.4)$$

Die durch die Produktionsanlage verursachten Aufwendungen setzen sich zusammen aus den in den einzelnen Apparaten verbauten Mengen an Materialien  $MAT_{APP}$  und den im Rahmen von Instandhaltungsmaßnahmen verbrauchten Materialien  $MAT_{INST}$  und Betriebsstoffen  $BS_{INST}$  (vgl. Gl.2.5).“ [61]

$$EE_{WK,A} = \sum_{i=1}^n \left( \left(\sum_{j=1}^k WIW_j\right)_{Mat_{App}} + \left(\sum_{j=1}^l WIW_j\right)_{Mat_{Inst}} + \left(\sum_{j=1}^m WIW_j\right)_{BS_{Inst}} \right)_i \quad (2.5)$$

Die Berücksichtigung des einzelnen Apparates bzw. Equipments erfolgt an dieser Stelle basierend auf den verbauten Materialarten und deren Masse, wie im ILCD-Handbook [30] vorgeschlagen, und stellt daher lediglich eine Abschätzung dar. Dies ist darin begründet, dass zu einem einzelnen Apparat bzw. Equipment oder einer Produktionsanlage keine, den kompletten Lebenszyklus betreffenden Daten vorliegen und entsprechende Datensätze in Datenbanken nicht verfügbar sind. Eine detailliertere Beschreibung zu einem typischen Lebenszyklus einer Produktionsanlage und dem mit den einzelnen Phasen einhergehender Energie-, Material- und Ressourceneinsatz folgt in Kapitel 2.5.

„Die gezeigte Klassifizierung der Inputs und Outputs (...) ermöglicht Schwerpunktanalysen, die der Identifikation von Einflussgrößen im Produktionsprozess dienen. Für Monoproduktanlagen lassen sich nach diesem Prinzip die ökologischen Aufwendungen eines Prozesses, bei entsprechend vorliegenden Verbrauchsdaten zur Anlage, eindeutig ermitteln. Deutlich schwieriger gestaltet sich die Datenerfassung für Produktionsprozesse in Mehrproduktanlagen.

Bei der Betrachtung von Prozessen in einer Mehrproduktanlage sind gegenüber Monoproduktanlagen zusätzliche Aspekte zu berücksichtigen. Der Verbrauch an Betriebsstoffen eines einzelnen Prozesses in einer Mehrproduktanlage ist u. a. abhängig von den belegten Teilanlagen<sup>11</sup> (TAn). Das bedeutet, dass individuell für jeden Produktionsprozess die belegten Apparatetypen einschließlich ihrer Ausstattung bei der Zuordnung bzw. Ermittlung der Verbräuche aus den Betriebsstoffschienen berücksichtigt werden müssen. Hinzu kommt der anteilige Verbrauch der zentralen Anlagenbestandteile (z. B. Verdichter oder Pumpen der zentralen Betriebsstoffkreisläufe). Dieselben Aspekte sind für den Bedarf an elektrischer Energie bzw. auftretende Emissionen eines Produktionsprozesses zu berücksichtigen. Aufgrund der Anlagenstruktur werden i. d. R. mehrere Prozesse gleichzeitig betrieben, sodass keine eindeutige Zuordnung zu einzelnen Prozessen möglich ist. Für ökologische Aufwendungen, verursacht durch die zentralen Anlagenbestandteile, sind somit Allokationsansätze notwendig. Die Summanden  $EE_{WK,E}$ ,  $EE_{WK,Em}$  und  $EE_{WK,BS}$  müssen bei Prozessen in Mehrproduktanlagen um einen Term, der anteilig den Verbrauch bzw. die verursachten Emissionen der zentralen Anlagenbestandteile  $X$  berücksichtigt, erweitert werden. Beispielhaft ist dies für Betriebsstoffe in Gl. 2.6 dargestellt. Die eingesetzten Edukte und Hilfsstoffe sowie deren Mengen sind durch die Rezepturen bzw. Herstellvorschriften i. d. R. genau vorgegeben.

$$EE_{WK,BS} = \left[ \left(\sum_{j=1}^k WIW_j\right)_V + \left(\sum_{j=1}^l WIW_j\right)_{Auf} \right]_{Prozess} + X \left[ \left(\sum_{j=1}^m WIW_j\right)_V + \left(\sum_{j=1}^n WIW_j\right)_{Auf} \right]_{A, zentral} \quad (2.6)$$

Die ökologischen Aufwendungen für Bereitstellung, Instandhaltung und Entsorgung der Mehrproduktanlage sind den verschiedenen Prozessen zuzuordnen. Dabei gilt es zu berücksichtigen, dass jeder Prozess nur einen kleinen Teil der in der gesamten Anlage zur Verfügung stehenden TAn belegt und die Lebens-

<sup>11</sup>Eine Teilanlage umfasst neben dem Hauptapparat sämtliches Equipment, welches diesem zugeordnet ist, z. B. ein Rührwerksapparat mit Kondensator, Vakuumpumpe, Wärmeträgermodule, Vorlage- und Auffangbehälter, Filter, etc. (siehe Abb. 4.4 zeigt beispielhaft den Aufbau einer solchen TAn).



dauer der Apparate die Laufzeit einzelner Prozesse in der Anlage oft übersteigt. Hinzu kommt, dass zum einen die Produktionsmengen einzelner Prozesse über die Lebensdauer der Mehrproduktanlage im Vorhinein nicht bekannt sind, da nach Marktanforderungen produziert wird. Zum anderen wechselt das Produktportfolio.“ [61] Die hier beschriebene Vorgehensweise gilt ebenso für Mehrzweckanlagen, entsprechend der Definition in Kapitel 4. Um die mit der Produktionsanlage einhergehenden ökologischen Aufwendungen auf die einzelnen Produktionsprozesse transparent und gerecht zu verteilen, ist daher ein geeigneter Allokationsansatz notwendig. In Kapitel 4.2.3 werden die dazu durchgeführten Untersuchungen vorgestellt und verschiedenen Ansätze diskutiert.

## 2.4 Verbrauchsdaten von Produktionsprozessen in Mehrzweckanlagen

Die Basis der ökologischen Bewertung stellt die Sachbilanz dar. Deren Erstellung bedeutet für die Betrachtung von Produktionsprozessen, dass Daten bzgl. der Inputs und Outputs i. d. R. in Form einer Massen- und Energiebilanz bereitgestellt werden müssen. In der Literatur finden sich nur wenige Beispiele bzgl. Analysen zu Produktionsprozessen aus dem Bereich der Spezialchemie, die in Mehrzweckanlagen betrieben werden. Dies ist vor allem begründet in den zum Teil komplexen, meist absatzweise ausgeführten Verfahren und dem Anlagentyp sowie den i. d. R. nicht öffentlich verfügbaren Rezepturen oder der Tatsache, dass einzelne Verfahrensstufen extern vergeben werden und somit keine Daten zur Verfügung stehen. Die Herausforderungen hinsichtlich der Erfassung von Verbrauchsdaten sind der Struktur und dem Betrieb der Produktionsanlagen geschuldet, die in Kapitel 4 ausführlich diskutiert werden. Bezugnehmend auf die in Kapitel 2.3 beschriebene Klassifizierung sind die Betriebsstoffe, vorrangig die Temperiermedien, sowie die elektrische Energie diejenigen Verbrauchsdaten, die entweder im Betrieb gemessen, abgeschätzt oder rechnerisch zu ermitteln sind. Außer der Anlage sind alle anderen Inputs und Outputs zumeist in der Rezeptur auch quantitativ aufgeführt.

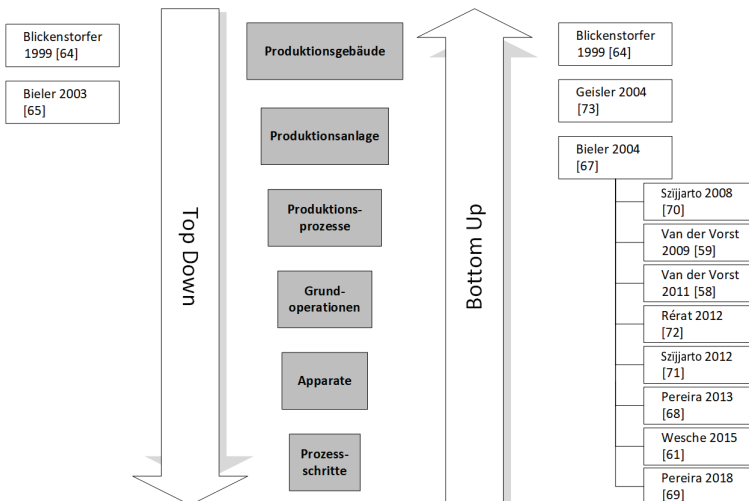


Abb. 2.4: Mögliche Bezugslevel zur Bereitstellung von Verbrauchsdaten und mögliche Vorgehensweisen zur Erfassung dieser Daten, ergänzt um einen Überblick zu verschiedenen Ansätzen in der Literatur zur Ermittlung von Verbrauchsdaten absatzweise betriebener Produktionsprozesse in der Prozessindustrie

Die Datenerfassung kann grundlegend nach zwei verschiedenen Mustern erfolgen – entweder nach einem Top-Down oder einem Bottom-Up Ansatz. Der Top-Down Ansatz beschreibt ein Vorgehen, bei dem aus grob aufgelösten Daten auf kleine Einheiten rückgeschlossen wird, also z. B. vom Dampfverbrauch einer Produktionsanlage auf den Verbrauch eines einzelnen Apparates. Gegenläufiges betrachtet der Bottom-Up Ansatz, bei dem von den Verbräuchen kleinerer Einheiten auf übergeordnete Verbräuche geschlossen wird, z. B. aus der Summe der Verbräuche der einzelnen Apparate auf den Gesamtverbrauch der Produktionsanlage. Die Abb. 2.4. zeigt, bezogen auf die Betrachtung eines Produktionsprozesses, beispielhaft verschiedene Bezugslevel zur Bereitstellung von Verbrauchsdaten.

Als größter Detaillierungsgrad der hier gezeigten Level ist das Gebäude aufgeführt, welches i. d. R. eine oder mehrere Produktionsanlagen beherbergt. Die in einem Gebäude verursachten Verbräuche stammen sowohl aus der Produktion als auch aus der Gebäudeinfrastruktur mit Büros, Belüftungs- und Heizungsanlagen, Beheizung etc. Die Produktionsanlage selbst stellt das nächst höher aufgelöste Level dar und bezieht allein die Verbräuche der Produktionsanlage, für den Basisbetrieb (also ohne Produktion) und die direkte Produktion mit ein. Letztgenannte stellt den Kern des Levels „Prozess“ dar. Der Prozess umfasst dabei sämtliche Vorgänge, die zum Betrieb notwendig sind – also auch Reinigung der Anlagen und produktionsvorbereitende Schritte, wie z. B. Inertisieren. Der nachfolgende Level GO/Apparat bezieht die gleichen Verbräuche wie in dem vorangegangenen Level mit ein, allerdings im lokal reduzierten Umfang. Als höchst aufgelöster Level ist in der Darstellung der Prozessschritt, wie z. B. Heizen oder eine chemische Reaktion, aufgeführt. Die Verbrauchsdaten beziehen sich allein auf die Durchführung. Die beiden Ansätze Top-Down und Bottom-Up beziehen sich dabei auf die Betrachtungsrichtung, bedeuten allerdings nicht, dass immer alle Level im Detail erfasst werden.

In diesem Kapitel werden verschiedene Ansätze und Analysen aus der Literatur aufgezeigt, um Verbrauchsdaten in Bezug auf Betriebsstoffe und elektrische Energie von absatzweise betriebenen Produktionsprozessen vorrangig betrieben in Mehrprodukt- bzw. Mehrzweckanlagen zu ermitteln. In den aufgeführten Quellen wird sowohl der Begriff Mehrproduktanlage als auch Multipurpose-Anlage verwendet. Eine genaue Definition welcher Anlagentyp gemeint ist, wird meistens nicht gegeben. In der Zusammenstellung findet die Benennung Mehrproduktanlage Anwendung, wenn keine konkrete Beschreibung der Anlage erfolgt. Anderenfalls wird versucht anhand der Darstellung und des beschriebenen Modellansatzes sowie der Auswertung auf die Anlagenform rückzuschließen und diese entsprechend den Definitionen in Kapitel 4 zu benennen.

Untersuchungen bzgl. der Anwendung des Top-Down Ansatzes auf Batchprozesse finden sich z. B. in den Arbeiten von Blickenstorfer [64] und Bieler et al. [65]. Blickenstorfer [ebd.] analysiert in diesem Zusammenhang den jährlichen Energiebedarf einer Mehrproduktanlage, in der Reaktivfarbstoffe produziert werden. Die Produktion erfolgt sequentiell, wobei mehrere Produkte mit ähnlicher Rezeptur nacheinander betrieben werden. Die in der Mehrproduktanlage zur Verfügung stehenden Teilanlagen (TAn) besitzen eine festgesetzte Funktion. In Summe umfasst das Produktionsspektrum ca. 160 chemische Verbindungen, die über mehrere Verfahrensstufen hergestellt werden. Die Analysen berücksichtigen die Verbräuche von elektrischer Energie, Dampf und Eis auf Gebäudeebene, wobei in diesem Zusammenhang der indirekte Energiebedarf u. a. für die Bereitstellung des Dampfes oder der Wassererzeugung als Basis für die Eisherstellung sowie zugekaufte „Energien und Hilfsmaterialien“, wie z. B. zur pH-Wert-Regulierung oder eingesetzte Filtermedien, nicht berücksichtigt werden. Die Korrelation der Daten auf der Gebäudeebene weist eine große Streuung auf und eine konkrete Zuordnung zu einzelnen Produkten bzw. Prozessen ist nicht möglich. Allerdings kann eine differenzierte Darstellung der Verbräuche für den produktionsunabhängigen Betrieb und der Produktion sowie die Zuordnung zu den einzelnen Abschnitten erreicht werden. Diese Abschnitte umfassen sowohl die absatzweise und kontinuierliche Produktion als auch den Basisverbrauch, der die Produktionsinfrastruktur wie zentrale Vakuumpumpen, oder Betriebsstoffkreisläufe repräsentiert und als nicht vernachlässigbar eingestuft wird. Der Autor generiert empirisch

sche Gleichungen, um den Verbrauch der drei Betriebsstoffe abschätzen zu können. Diese Abschätzungen sind nur unter der Voraussetzung gültig, dass die Produktzusammensetzung nahezu konstant gehalten wird. Ein Rückschluss auf einzelne Prozesse ist daher nur eingeschränkt möglich, wobei das Erstellen von empirischen Gleichungen nach diesem Vorgehen individuell für jede Mehrproduktanlage erfolgen muss.

Ähnliche Ergebnisse zeigen die Untersuchungen von den Autoren Bieler et al. [65], die einen Ansatz zur Zuordnung der Energiebedarfe von Mehrprodukt- und Mehrzweckanlagen zu einzelnen Produkten bzw. Prozessen untersuchen. Die Analysen umfassen auf Gebäudeebene sechs Batchanlagen, die im Umfang und Betriebsbereich (hier: Prozesstemperaturen) stark variieren, wobei drei als Mehrzweck-, zwei als Mehrprodukt- und eine als Monoproduktanlagen ausgeführt sind. Die Untersuchungen hinsichtlich der Energiebedarfe der Trägermedien Dampf und Sole sowie elektrischen Strom zeigen, dass der Top-Down-Ansatz in diesem Zusammenhang für Produkte, die durch sehr ähnliche Prozesse bzw. bei einem konstanten Produktportfolio hergestellt werden, eine akzeptable Beschreibung der Zuordnung ermöglicht. Bei Produktionsanlagen mit wechselnden Produktionen und Produkten wird der Ansatz als ungeeignet eingestuft und der Hinweis auf eine detailliertere Modellierung gegeben. Anhand der erfassten Daten weisen auch diese Autoren auf einen durch den Basisverbrauch verursachten hohen Energiebedarf der Gebäudeinfrastruktur hin, der bedingt ist durch die individuelle Gebäudespezifikation. Der Basisverbrauch beschreibt in diesem Zusammenhang, die Verbräuche eines „warmen“, produktionsbereiten Gebäudes, in dem allerdings kein Produktionsprozess betrieben wird. Die Ergebnisse der Analyse einer Schweizer Pharmaproduktion von Müller et al. [66] belegen dies ebenfalls.

Aufgrund der Einschränkungen bei der Zuordnung der Verbrauchsdaten bei der Verwendung des Top-Down-Ansatzes untersuchen die Autoren Bieler et al. [67] ebenso ein Bottom-Up-Vorgehen. Betrachtet werden in diesem Fall die gleichen drei Energieträger. Die Untersuchungen beschränken sich allerdings auf eine Mehrzweckanlage, die ebenfalls Bestandteil der Analysen der Autoren zum Top-Down-Ansatz [65] ist. Diese umfasst 29 Hauptapparate und ist gekennzeichnet durch eine hohe Produktvariabilität in der Produktion. Die Basis des Bottom-Up-Ansatzes bilden Berechnungsgrundlagen, die der Standardliteratur entnommen sind. Mittels dieser werden die Verbräuche eines Energieträgers des einzelnen Prozessschrittes berechnet und anschließend über das Equipment aufsummiert. Verluste verursacht z. B. durch das Erwärmen der Apparatematerialien und Gutschriften z. B. durch den Energieeintrag eines Rührers werden dabei berücksichtigt. Aus der Addition aller Equipmentverbräuche wird der produktionsabhängige Energiebedarf des Gebäudes abgeschätzt. Zusätzlich werden separat die produktionsunabhängigen Verbräuche der Gebäudeinfrastruktur erfasst, die anschließend zusammen mit den produktionsabhängigen den Gesamtverbrauch des Gebäudes ergeben. In den Arbeiten von Bieler et al. [67] stehen sowohl die Analyse ganzer Produktionsgebäude im Vordergrund, die Rückschlüsse auf die Verbräuche einzelner Apparatetypen, wie z. B. Nutschen, Rührwerksapparate oder Trockner erlauben, als auch die Zuordnung der Verbräuche zu den einzelnen Produkten. Einzelne Prozesse werden hier nach der Anzahl ihrer Syntheseschritte unterschieden. Der Ansatz könnte ebenfalls, wenn auch nicht explizit aufgeführt, für die Abschätzung der Verbräuche eines vollständigen Produktionsprozesses, der neben der Synthese auch die Aufreinigung des Zielproduktes umfasst, übertragen werden. Eine Korrelation zwischen Anzahl der Syntheseschritte und den Verbräuchen kann allerdings nicht belegt werden. Die Anwendung eines Top-Down-Ansatzes in diesem Zusammenhang von den Autoren als nicht sinnvoll eingeschätzt. Wie in Abb. 2.4 dargestellt, wird dieser Bottom-Up-Ansatz von verschiedenen Autoren aufgegriffen und entsprechend für die verschiedensten Anwendungen, meist bezogen auf den einzelnen Produktionsprozess, adaptiert als auch erweitert, wie im Folgenden kurz dargestellt ist.

Ebenfalls auf den Dampfverbrauch konzentrierten sich die Untersuchungen von Pereira et al. [68], die einen Ansatz aufzeigen, der rechnerisch den Verbrauch von Produktionsprozessen ermittelt. Die Modellierung adaptiert den Ansatz von Bieler et al. [67] und greift auf Informationen aus Rezepturen zurück. Dazu müssen keine Verbrauchsdaten mittels Messungen erfasst werden – Datenlücken, z. B. bei Stoffda-

ten, sind mittels hinterlegter, gemittelter Daten schließbar. Die Anwendung wird am Beispiel einer Mehrzweckanlage mit 38 Apparaten und ca. 50 verschiedenen Produkten im Jahr, einer Mehrproduktanlage für drei verschiedene Produkte und einer Monoproduktanlage gezeigt und dient vorrangig als Screeningtool. Darauf aufbauende Untersuchungen zu den Dampfverbräuchen in verschiedenen Batchanlagen [69] binden statistische Modelle ein. Für die Berechnung des Dampfverbrauches wird davon ausgegangen, dass dieser hauptsächlich vom Produktionsprozess selbst abhängt und weniger von eingesetzten Reaktanden, Hilfsstoffen und Produkten. Für die Modellierung müssen sowohl die Syntheseroute und der Reaktionsmechanismus als auch die Dauer und das Vorhandensein von energieaufwändigen Prozessschritten (hier: Destillation mit/ohne Rückfluss) bekannt sein, von der mittels Entscheidungsbaum auf die Verbräuche von Reaktionsschritten sowie Aufarbeitung rückgeschlossen wird und eine Zuordnung zu den Klassen niedrig, mittel und hoch erfolgt. Spezifische Aufreinigungen sowie die Trocknung werden dabei nicht berücksichtigt.

Eine Erweiterung des Ansatzes von Bieler et al. [67] wird z. B. durch die Autoren Szijjarto et al. [70] vorgenommen, mit dem Ziel, die Dampfverbräuche einer Mehrzweckanlage aus dem Bereich Spezialchemie zu ermitteln. Für den hier genutzten Modellierungsansatz wird das Modell von Bieler et al. [ebd.] um Verlustterme zur Berücksichtigung von Füllstandshöhen und Ineffizienzen im Heiz-/Kühlsystem sowie einer dynamischen Modellierung erweitert, die real gemessenen Verbrauchsdaten an dem einzelnen Reaktor (direkte Beheizung) zur Ermittlung zeitabhängiger Verbräuche ermöglicht. Um den Dampfverbrauch zu erfassen, der zur Beheizung eines sekundären Heiz-/Kühlsystems direkt am Apparat (indirekte Beheizung) erhoben wird, erfolgt eine Zuordnung des Gesamtdampfverbrauches der Anlage mittels Massenbilanz. In weiterführenden Arbeiten zu einer Mehrzweckanlage für Spezialchemikalien der BASF integrieren die Autoren Szijjarto et al. [71] zusätzliche Kennzahlen zur Bewertung der Effizienz bzgl. des Dampfverbrauches. Dies geschieht mittels einer Kopplung von Produkt und Equipment, wobei zu jedem Pärchen sowohl die theoretischen (Modellansatz Bieler et al. [67]) als auch die dynamisch ermittelten, realen Verbräuche (Modellansatz Szijjarto et al. [70]) unter Berücksichtigung der Gesamtverbräuche der Anlage ermittelt werden. Mittels der daraus abgeleiteten Effizienz kann die Divergenz zwischen den einzelnen Batch-Ansätzen abgebildet werden. Die Kennzahlen zielen auf die Identifizierung möglicher Potentiale und einem Priorisieren derselben. Durch die Definition von fünf verschiedenen Aggregationslevel (Zeitintervall, Prozessschritte, belegtes Equipment, Anzahl an Batches und Anzahl an Produkten) ist es möglich, z. B. Daten zu den Verbräuchen bei Betrieb eines einzelnen Equipments für verschiedene Produkte zu generieren.

Die Ansätze von Bieler et al. [67] und Szijjarto et al. [70] greifen Rérat et al. [72] auf für die Analyse einer Singlebatchanlage und einer Mehrproduktanlage, in der vier verschiedene Produkte hergestellt werden. Neben Dampf sind mit Sole und Kühlwasser zwei weitere Betriebsstoffe in dem Modell berücksichtigt, deren Verbräuche über die Ventilstellungen und den damit verbundenen Durchflussraten sowie den theoretisch ermittelten Verbrauch aufgetragen sind, um daraus empirische Gleichungen abzuleiten. Diese Gleichungen dienen als Basis für die Verbrauchsdatenermittlung der Analysen. Als Erweiterung zu den Betrachtungen von Szijjarto et al. [70] werden neben weiteren Betriebsstoffen zusätzlich weiteres Equipment wie Trockner, Kondensatoren und ein Wärmeerübertrager betrachtet.

Den Modellansatz von Bieler et al. [67] nutzen ebenso Van der Vorst et al. [59], die eine Erfassung von Energie- und Ressourcenverbräuche einer API-Produktion im Mehrzweckanlagenumfeld im Modell abbilden. Dabei werden nicht nur verschiedene Betriebsstoffe erfasst, sondern auch weitere Material- und Energieflüsse der Produktion, wie z. B. die Reststoffe. Eine Bottom-Up-Bilanzierung wird an dieser Stelle am Beispiel der Reinigung eines 4 m<sup>3</sup> Kessels gezeigt – wobei die Verbräuche der Gebäudeinfrastruktur nicht berücksichtigt sind. Ebenfalls einen Schwerpunkt auf die Erfassung des Energie- und Ressourcenverbrauchs von Produktionsprozessen in Mehrzweckanlagen setzen Wesche et al. [61]. In Bezug auf die Verbräuche einzelner Prozessschritte werden die Verbrauchsdaten ebenfalls orientiert an dem Ansatz

von Bieler et al. [67] ermittelt. Dieser Modellvorschlag wird erweitert um den Einfluss von Produktionsrestriktionen (Betrieb, Apparat, Prozess), Energieverlusten z. B. durch Füllstandshöhen in Behältern, und Verbräuche zentraler Anlagenteile sowie des Basisbetriebes der in einer Mehrzweckanlage verbauten TAn. Verbräuche der Gebäudeinfrastruktur (Büros, etc.) werden auch hier nicht berücksichtigt. Die Anwendung des Modellierungsansatzes erfolgt am Beispiel einer verfahrenstechnischen Grundoperation. Ebenso wie bei Van der Vorst et al. [59] erfolgt auch hier der Hinweis, dass die Aufbereitung der Betriebsstoffe und die Verwertung der Reststoffe individuell von der Produktionsstätte abhängen.

Weiterführende Betrachtungen von Van der Vorst et al. [58] erweitern den Ansatz von Bieler et al. [67] um die thermodynamische Größe Exergie, zur Erfassung der Verluste für die elektrische Energie sowie den Heiz- und Kühlmedien. Angewandt wird der Modellierungsansatz am Beispiel einer fünfstufigen pharmazeutischen Reaktion im Bereich der API-Produktion im Mehrzweckanlagenumfeld. Die beispielhafte Analyse weist auf hohe Exergieverluste in den Betriebsnetzen hin – der eigentlichen Produktionsanlage im Betrieb werden lediglich 1/3 der Verluste zugeordnet.

Als eigenständige Ansätze nach dem Bottom-Up-Ansatz sind u. a. auch die Arbeiten von Blickenstorfer [64] und Geisler et al. [73] anzusehen. Der Fokus der Untersuchungen von Blickenstorfer [ebd.] liegt, wie bereits bei der Beschreibung seines angewandten Top-Down-Ansatzes, auf einer Mehrproduktanlage zur Herstellung von Reaktivfarbstoffen. Für den Bottom-Up-Ansatz werden die Produktionsprozesse von vier Farbstoffen im Detail analysiert. In dem erarbeiteten Modell sind die Reaktionszeit, die Temperatur und die Massen berücksichtigt, um der Individualität der chemischen Reaktionen Rechnung zu tragen. Die Basis bilden auch an dieser Stelle empirische Gleichungen. Anhand der Ergebnisse zu den Verbräuchen an Strom, Eis und Dampf der einzelnen Prozesse zeigt der Autor auf, dass der Bedarf an Strom und Eis je Prozessstufe, abhängig vom jeweiligen Produkt, stark variieren kann. Eine Prozessstufe repräsentiert hier verschiedene chemische Reaktionen, die u. a. sowohl das Erwärmen bzw. Abkühlen als auch Reaktionen und das Neutralisieren umfassen. Die Daten der Untersuchungen in Summe zeigen, dass die Verbräuche der Produktionsinfrastruktur in der Mehrproduktanlage nicht vernachlässigbar sind, da die rechnerisch und messtechnisch erfassten Verbräuche des einzelnen Equipments deutlich abweichen von dem Gesamtverbrauch der Anlage. Die Autoren Geisler et al. [73] nutzen eine Input-Output-Bilanzierung, um die Verbrauchsdaten eines einzelnen Reaktionsschrittes zu ermitteln. Sämtliche Mengenangaben bezogen auf die Reaktanten sind dabei stöchiometrisch berechnet. Die Menge an Hilfsstoffen wird in dem Ansatz abgeleitet aus den Verlusten der Recyclingströme und den daraus resultierenden Mengen, die nachgespeist werden müssen. Um die Verbrauchsdaten in Bezug auf die Energieträger in Form von Betriebsstoffen zu generieren, werden in dem Modell Daten aus Literaturquellen verwendet sowie Daten aus verschiedenen Produktionen am Standort. Aus den Gesamtverbräuchen der Anlage und den in der Anlage produzierten Produktmengen wird jeweils der Verbrauch an Betriebsstoff je Produktmenge rechnerisch ermittelt und anschließend über alle Produktionsanlagen gemittelt. Anhand dieser Datenbasis werden die Verbrauchsdaten basierend auf den Inputs und Outputs abgeschätzt.

In der Literatur finden sich wie dargestellt verschiedene Ansätze bzw. Erweiterungen, um die Verbrauchsdaten von Batchanlagen, vorrangig Mehrprodukt- bzw. Mehrzweckanlagen bezogen auf den Einsatz von Betriebsstoffen abzuschätzen bzw. möglichst realitätsnah zu ermitteln. Zum großen Teil werden diese basierend auf Anlagendaten individuell zu den einzelnen Anlagen generiert, sodass am Ende häufig empirische Gleichungen zur Verfügung stehen [64, 70, 71, 72], mit denen zu den einzelnen Produktionsanlagen Analysen durchgeführt werden. Die aufgeführten Arbeiten beschäftigen sich vorrangig mit der Analyse des Betriebes einer Produktionsanlage, bezogen auf einzelne oder mehrere Wärmeträgermedien. Dabei zielen die Analysen häufig auf die Identifizierung von Optimierungspotentialen [70] und der Erstellung von Verbrauchskennzahlen, wie der Energieverlustindex [69] oder Energieeinsparpotentialindex [71]. Nicht bei allen rechnerischen Ansätzen werden dabei auftretende Verluste berücksichtigt. Einige Untersuchungen [70, 58, 72] zeigen jedoch, dass diese nicht unwesentlich zu den Betriebsstoffver-

bräuchen beitragen. Dem wird von einzelnen Autoren durch die Messung von Verbräuchen direkt an den einzelnen Apparaten Rechnung getragen, siehe [70].

Gezielt einzelne Produktionsprozesse stehen bei Van der Vorst et al. [59] und Wesche et al. [61] im Fokus. Die gewählten Ansätze der Autoren berücksichtigen allerdings den gesamten Energie- und Ressourcenverbrauch der einzelnen Prozesse und zielen auf die Erstellung einer Datenbasis zur ökologischen Bewertung sowie der Identifizierung von Verbesserungsansätzen innerhalb der einzelnen Prozesse. Der Ansatz von Wesche et al. [61] berücksichtigt in diesem Zusammenhang auch anteilig die Basisverbräuche der Produktionsinfrastruktur. Die Basisverbräuche von Mehrprodukt- und Mehrzweckanlagen, bezogen auf die Produktions- und Gebäudeinfrastruktur, werden von verschiedenen Autoren [64, 65, 67] basierend auf den Ergebnissen als nicht vernachlässigbar eingestuft. Im Rahmen von ökologischen Bewertungen eines Produktionsprozesses müssen diese daher ebenfalls dem einzelnen Prozess oder genutztem Equipment (Apparate oder TAn) zugeordnet werden. Dazu sind in der Regel Allokationen notwendig oder eine Erweiterung der Systemgrenzen (siehe dazu z. B. Klöpffer und Grahl [74]).

### 2.5 Produktionsanlagen in der ökologischen Bewertung

Die Anlage stellt einen zentralen Bestandteil der Produktion dar und ist daher, wie in Kapitel 2.2 und 2.3 gezeigt, in der ökologischen Bewertung von Produktionsprozessen als Einflussgröße zu erfassen [14, 23, 27, 30]. Für alle Produktionsanlagen der stoffwandelnden Industrie, unabhängig von deren Umfang und Komplexität, Art der Produktionsprozesse (Feststoffe oder Fluide), Anlagenausführung (z. B. Monoprodukt-, Mehrprodukt- oder Mehrzweckanlage), Betriebsführung (kontinuierlicher, absatzweiser oder Kampagnenbetrieb) und Produktionsmenge (wenigen 100 kg im Bereich Pharma- und Spezialchemie bis zu mehreren 10.000 t in der Bulkchemie), gilt im Rahmen einer ökologischen Bewertung der gleiche Ansatz: Die Aufwendungen, die durch die Produktionsanlage in die ökologische Bewertung eines Produktionsprozesses eingehen, umfassen die potentiellen Umweltwirkungen über deren gesamten Lebenszyklus, siehe Abb. 2.5. Nachfolgend werden die einzelnen Abschnitte kurz vorgestellt sowie die im Hinblick auf Energie-, Material- und Ressourceneinsatz besonders aufwendigen Lebenszyklusphasen hervorgehoben.

Den Ausgangspunkt im Lebenszyklus stellt die *Ressourcengewinnung* dar. Diese Lebenszyklusphase beschreibt die Gewinnung der Erze, des Naturkautschuks, des Kohlenstoffs, etc. sowie die Gewinnung von fossilen und regenerativen Energieträgern als auch deren Umformung.

In der darauffolgenden Lebenszyklusphase *Materialveredelung* werden die Rohstoffe bearbeitet, Materialien produziert und verarbeitet. So erfolgen in diesem Schritt z. B. die Aufbereitung der Erze, die Roheisengewinnung, die Stahlerstellung und das Vergießen sowie das Umformen. Die Materialveredelung ist gekennzeichnet durch einen hohen Energiebedarf und damit verbundenem direkten CO<sub>2</sub>-Ausstoß. Im Jahr 2015 wurden in Deutschland 42,7 Mio. t Rohstahl erzeugt, davon 70,4 % im Sauerstoffblasverfahren und 29,6 % im Elektrostahlverfahren. Die daraus gewonnenen Stahlerzeugnisse (z. B. Rohre oder Warm- und Kaltband) betragen 40,4 Mio. t. Das Elektrostahlverfahren ist gekennzeichnet durch Temperaturen von 3.500 °C (vgl. Sauerstoffblasverfahren ca. 1.700 °C) und wird vorrangig in Lichtbogenöfen durchgeführt [75]. Das Elektrostahlverfahren wird primär genutzt, um Stahlschrott einzuschmelzen, wohingegen das Sauerstoffblasverfahren i. d. R. dem Hochofen direkt nachgeschaltet ist. Mit dem Elektrostahlverfahren wurden 2015 13,4 Mio. t Schrott eingeschmolzen, die Schrottmenge die bei der Erzeugung von Stahl durch das Sauerstoffblasverfahren dem Roheisen zugegeben wurde, betrug 5,1 Mio. t. Dabei betrug der spezifische Energiebedarf 17,9 GJ/t und die direkten CO<sub>2</sub>-Emissionen 1,35 t CO<sub>2</sub>/t. [76] Zur weiteren Steigerung der Stahlqualität kann im Nachgang eine sekundärmetallurgische Behandlung, wie z. B. Entschwefelungen, Entgasungen oder Legierungen, erfolgen.

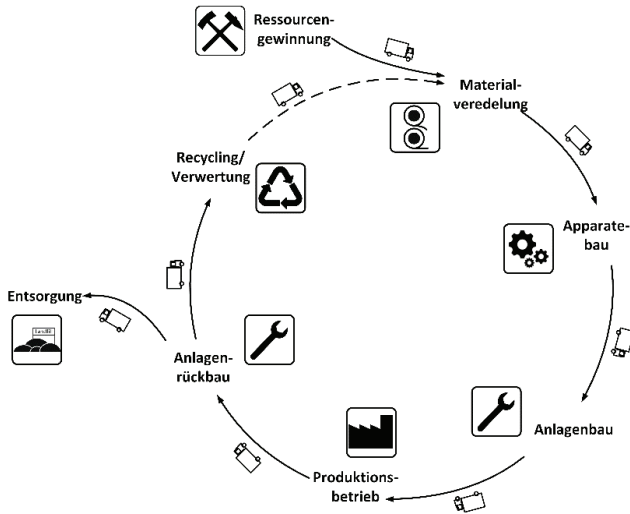


Abb. 2.5: Lebenszyklus einer Produktionsanlage mit den Abschnitten Ressourcengewinnung, Materialveredelung, Apparatebau, Anlagenbau, Produktionsbetrieb, Anlagenrückbau sowie Entsorgung bzw. Recycling/Verwertung

Sowohl beim Vergießen als auch beim Umformen des Stahls im Anschluss an die Stahlherstellung existieren verschiedene Verfahren, die abhängig von den Stahlsorten und den -mengen zum Einsatz kommen [77]. Im Rahmen einer Lebenszyklusbetrachtung von Produktionsanlagen sind die Art der Stahlherzeugung sowie die verbauten Stahlsorten aufgrund der unterschiedlichen Anforderungen an einzelne Bauteile relevant. Bei Rohren können z. B. warmfeste Stähle eingesetzt werden [78], wohingegen Rührwerksbehälter abhängig von den Betriebsfenstern und Einsatzstoffen im Prozess aus z. B. hochkorrosionsbeständigen Ni-Mo-Legierungen gefertigt werden. Die spezifischen Anforderungen spiegeln sich ebenfalls in der Umformung wider, da abhängig von den Anforderungen gezielt verschiedene mechanisch-technische Eigenschaften eingestellt werden können [76].

Im Lebenszyklusabschnitt *Apparatebau* werden die Stahlerzeugnisse durch verschiedene Fertigungsverfahren, wie z. B. Umformen, Fügen, Trennen oder Urformen, verarbeitet zu Apparaten, Rohren, Maschinen, etc. Zu den Fertigungsverfahren zählen ebenfalls das Beschichten, wie z. B. Galvanisieren, und das Ändern von Stoffeigenschaften, wie z. B. Sintern [79]. Die verschiedenen Fertigungsverfahren weisen ebenfalls einen hohen Energieaufwand auf, wie in Abb. 2.6 dargestellt. Die in König [80] veröffentlichten Ergebnisse einer Verfahrensanalyse zeigen, dass dieser abhängig vom Fertigungsverfahren unterschiedlich hoch sind, wobei die Abweichungen bei einem Mittelwert von 45 MJ/kg in einem Korridor von -36 ... + 63 % liegen und damit sehr stark voneinander abweichen. Angegeben sind die Verbräuche bezogen auf ein Kilogramm des Fertigteils inklusive des Aufwandes für die Stahlerzeugung und der Werkstoffausnutzung (siehe weiße Balken), die abhängig vom Verfahren zwischen 40 und 95 % liegt. Der Energieaufwand je Fertigungsteil ohne Berücksichtigung des Energieanteils, der den Werkstoffresten zugerechnet ist, liegt zwischen 26...34 MJ/t und weist so weniger als  $\pm 15$  % des entsprechenden Mittelwertes auf. Diese Art der Darstellung greift auf das Prinzip der Materialflusskostenrechnung [81] zurück, indem den verschiedenen Stoffströmen anteilig die Aufwendungen zugeordnet werden und nicht nur dem eigentlichen Produkt. Basierend darauf lässt sich rückschließen, dass die Energieaufwendungen der verschiedenen Fertigungsverfahren in einer ähnlichen Größenordnung liegen.

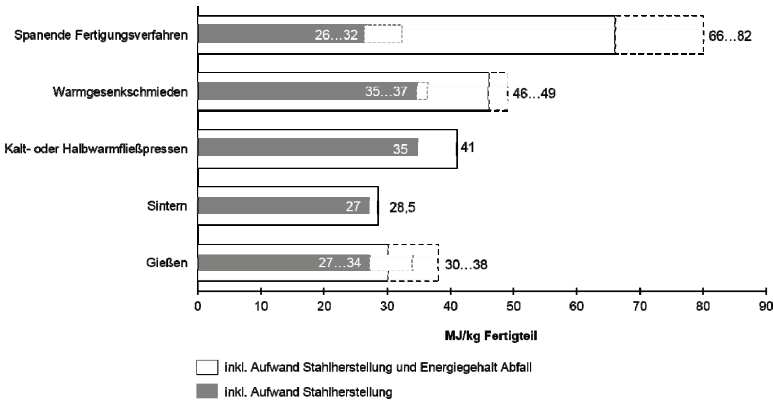


Abb. 2.6: Energieaufwand pro kg Fertigteil, Durchschnittswerte für verschiedenen Industriezweig, erweiterter Auszug nach [80]; durchgezogene Linien repräsentieren den unteren Wert und gestrichelte Linien den oberen Wert der Schwankungsbreiten der Daten

In der stoffwandelnden Industrie sind die Apparate und das Equipment i. d. R. für einen bestimmten Temperatur- und Druckbereich ausgelegt. Entsprechend der Anforderung im Betrieb wird das Apparatedesign vorgenommen und die MSR-Technik gewählt. Das Apparatedesign wird in drei Prozessschritten unterteilt: Apparatauswahl, -gestaltung und -dimensionierung [82]. Neben gestalterischen Elementen, wie z. B. bei Wärmeübertragern die Rohr- oder Plattengeometrie, und Stoffeigenschaften, z. B. Wärmekapazitäten oder Dichte von Medien, sind vorrangig die Wahl der Materialien und Beschichtungen im Hinblick auf Korrosionsbeständigkeit entscheidend. Der Lebenszyklusabschnitt Apparatebau ist vor allem in der Chemischen Industrie<sup>12</sup> ein Abschnitt, der gekennzeichnet ist durch einen hohen Energie- und Rohstoffeinsatz, da die Produktion sehr anlagenintensiv ist und die Anlagen sich nur schwer auf andere Erzeugnisse umstellen lassen [83]. Wird das Produkt nicht mehr nachgefragt bzw. hergestellt, bedeutet dies für Monoproduktionsanlagen den Rückbau. In Bezug auf Mehrprodukt-/Mehrzweckanlagen trifft dies allerdings nicht zu, da diese auf kurze Produktlebenszyklen ausgerichtet sind und für ein wechselndes Produktportfolio ausgelegt werden. Die Lebenszyklusabschnitte *Anlagenbau* und *-rückbau* umfassen alle Schritte, die vom ersten Spatenstich bis zur Inbetriebnahme der Produktionsanlage anfallen bzw. von der Stilllegung bis zur Bodensanierung. Die Aufwendungen variieren z. B. abhängig davon, ob eine Anlage ein neues Produktionsgebäude benötigt oder in eine bestehende Produktionsstätte integriert werden kann. Der Bau und die Montage einer neuen Produktionsanlage beginnen mit den Erd- und Gründungsarbeiten zur Erschließung des Bodens, auf dem die Anlage stehen wird. Dem folgt die Fundamenterstellung verbunden mit Betonarbeiten u. a. für unterirdische Leitungsschächte und Kanäle. Anschließend werden die Stahlgerüste, Rohrleitungsbrücken und sonstige tragende Konstruktionen gebaut, gefolgt von der Schwermontage der u. a. großen Behälter, wie z. B. Tanklager oder Havariebehälter, Maschinen und Apparate. Dem folgen die Rohrleitungs-, Elektro- und Leichtmontage sowie der Einbau der MSR-Technik und die Montage von Brandschutz- und Feuerlöschtechnik. Abhängig vom Anlagentyp schließen sich diesem der Einbau von Labortechnik sowie Gebäudetechnik, u.a. Sanitär- und Klimatechnik, an. Gegen Ende des Anlagenbaus erfolgt die Montage von Isolierung, Beschichtungen oder Schallschutzmaßnahmen. [84]

<sup>12</sup> Die Chemische Industrie umfasst Produktionen für chemische, petrochemische und pharmazeutischen Produkte.



Der Aufwand des Anlagenbaus (ohne Gebäude) spiegelt sich in den dafür kalkulierten Bau- und Montagekosten wider. Diese liegen für die chemische Industrie nach den Aussagen verschiedener Autoren in einer Größenordnung von 20..40 % der direkten Anlagenkosten<sup>13</sup> bzw. in der Größenordnung der Kosten für Maschinen und Apparate nach der Strukturmethode für Einzelfaktoren [85] oder nach dem Kostenindex für Anlagen der chemischen Industrie (CEPCI, Chemical engineering plant cost index) bei ca. 29 % [86]. Nach Beendigung der Bauphase folgt die Inbetriebnahme, bei der sowohl Reinigung, als auch Spülvorgänge vorgenommen werden. Ebenfalls Bestandteil sind Simulationsbetriebe mit Wasser, Luft, Inertgasen, o. ä. zum Überprüfen von Funktionen und Testen der Sicherheitseinrichtungen sowie mit Hilfsstoffen und Heizvorgängen. Anschließend erfolgt die Inbetriebnahme zunächst bei Teillast und anschließend bei Nennlast. [84]

Der Lebenszyklusabschnitt *Produktionsbetrieb* beschreibt die Nutzungsdauer der Anlage. In diesem Zeitraum werden Aufwendungen vorrangig durch die Instandhaltung verursacht, wobei diese über die fortschreitende Lebensdauer zunehmen [87]. Die Instandhaltung unterteilt sich in Wartungsarbeiten, Inspektionen, Instandsetzungsmaßnahmen und Verbesserungen. Inspektionen zielen auf die Erfassung des IST-Zustandes der Produktionsanlage bzw. Apparate und Equipment ab und unterstützen bei Schäden oder Abnutzungsprozessen die Ursachenbestimmung und das Ableiten von Verhinderungsstrategien. Die Wartungsarbeiten dienen vorrangig dem Erhalt der Leistungsfähigkeit. Sie sind, wie auch die Instandsetzungsmaßnahmen zur Wiederherstellung der Leistungsfähigkeit und Verbesserungsmaßnahmen zur Steigerung der Zuverlässigkeit bzw. Instandhaltbarkeit einzelner Apparate oder Equipment, mit Material (z. B. Dichtungsmasse oder Beschichtungen) und Energieaufwendungen (z. B. durch Schweißen o. ä.) verbunden. [88] Zusätzliche Energie- und Materialaufwendungen, die durch den Betrieb der Anlage verursacht werden, sind unmittelbar beeinflusst durch die in den Produktionsanlagen betriebenen Produktionsprozesse, als auch dem produktionsunabhängigen Basisbetrieb.

Der *Rückbau* einer Produktionsanlage in der stoffwandelnden Industrie wird von Aufwand und Komplexität vergleichbar mit dem Neubau einer Anlage gesehen [89]. Nachdem die Anlage außer Betrieb genommen ist, muss diese zunächst entleert und gereinigt werden, bevor die eigentliche Demontage und der Rückbau sowie die Bodensanierung erfolgen kann. Der Demontage der einzelnen Apparate schließen sich abhängig von der Produktion noch zusätzliche Reinigungs- bzw. Dekontaminationsschritte an, um Verschleppungen von Chemikalien o. ä. zu verhindern. [90]

Dem Anlagenrückbau sind die Lebenszyklusabschnitte *Recycling* oder *Entsorgung* nachgeschaltet. Vor allem in der chemischen Industrie sind, wie oben zum Lebenszyklusabschnitt Materialveredelung aufgeführt, viele Apparate bzw. Equipment aus hochwertigen Stählen verbaut, die einen hohen Schrottwert besitzen [89]. Ein Teil der in den Produktionsanlagen verbauten Materialien kann somit als Sekundärrohstoff der Materialveredelung wieder zugeführt werden. Alle nicht recycelbaren Materialien, wie z. B. Industrieabfälle, Chemikalien und sonstige Gefahrenstoffe oder der Bodenaushub, werden entsorgt. Abhängig von der Abfallart existieren verschiedene Entsorgungswege, wie z. B. die thermische Verwertung oder Beseitigung.

In die Lebenszyklusbetrachtung gehören außerdem die ökologischen Aufwendungen, die durch die *Transporte* der Rohstoffe, erzeugten Energien und Materialien verursacht werden. Diese sind in Abb. 2.5 symbolisch durch einen Lkw dargestellt und erfolgen abhängig vom Standort der jeweiligen Produktionsstätten über Land, auf dem Wasser oder in der Luft.

<sup>13</sup> Direkte Anlagenkosten enthalten nach [85] keine Ingenieurkosten. Zu den direkten Anlagenkosten gehören die sog. Hauptpositionen (Maschinen und Apparate), sowie die Nebenpositionen, u. a. Bau, Baunebenarbeiten, Rohrleitungsmaterial, elektrotechnisches Material, mess- und regeltechnisches Material und Montage.

Die Darstellung zeigt, dass der Lebenszyklus einer Produktionsanlage u.a. mit einer erheblichen Naturraumbeanspruchung, Material- und Ressourceneinsatz, Emissionsausstoß sowie Entsorgungsaufwand verbunden ist. Aufgrund der Materialvielfalt in einer Produktionsanlage und dem benötigten Detaillierungsgrad zur Erfassung der Aufwendungen, die z. B. mit einzelnen Fertigungsschritten wie der Herstellung eines Apparates einhergehen, ist die Datenerhebung sehr aufwendig – vor allem, da auch standort-spezifische Aspekte eine Rolle spielen. Nicht selten werden die Apparate und anderes Equipment von unterschiedlichen Herstellern bezogen, sodass Fertigungsstätten auf fast allen Kontinenten denkbar sind.

Die zu erfassenden Daten im Lebenszyklus einer Produktionsanlage sind, wie bereits oben angeführt, für alle Arten von Produktionsanlagen identisch. Der Datenumfang kann allerdings deutlich variieren. So sind sowohl Umfang als auch Komplexität einer Produktionsstätte dabei abhängig von der Art der zu betreibenden Produktionsprozesse und der Anlagenausführung. *Monoproduktanlagen*, die häufig in der Bulkchemieherstellung zum Einsatz kommen, werden i. d. R. kontinuierlich über eine geplante Lebensdauer betrieben und sind prozessorientiert ausgelegt. Die Anlage ist ausgestattet mit auf einen einzelnen Prozess ausgelegten Apparaten und dem für den Betrieb benötigten Equipment, welches stellenweise redundant zur Verfügung steht. Bei *Mehrprodukt- bzw. Mehrzweckanlagen* steht eine ausrüstungsorientierte Auslegung im Vordergrund, um möglichst flexibel auf verschiedene Prozessanforderungen reagieren bzw. ein entsprechend großes Prozessfenster abdecken zu können. Daher sind diese Anlagen i. d. R. gekennzeichnet durch eine höhere apparative Ausstattung sowie Equipment und die Produktionsprozesse werden meistens absatzweise betrieben.

Im Hinblick auf die ökologische Bewertung eines einzelnen Prozesses spielt die Art der Produktionsanlage ebenfalls eine Rolle, da die Aufwendungen der Produktionsanlage über die Lebensdauer zu erfassen und die mit dem Lebenszyklus einhergehende potentiellen Umweltwirkungen dem Prozess zugeordnet werden muss. Bei Monoproduktanlagen können dem Prozess die ökologischen Aufwendungen der Produktionsanlagen mittels Abschreibung unter Berücksichtigung der geplanten Produktionsdauer sowie die Aufwendungen der Instandhaltung zugeordnet werden. In Mehrprodukt- und Mehrzweckanlagen ist der Produktionszeitraum eines Produktes, da meist marktorientiert produziert wird, deutlich kürzer als die Lebensdauer der Produktionsanlage. Im Hinblick auf die ökologische Bewertung ist vor allem der Zeitan-teil des einzelnen Prozesses an der Gesamtproduktionsdauer der Anlage zum Zeitpunkt der Bewertung unklar. Hinzu kommt bei der Betrachtung von Mehrprodukt- und Mehrzweckanlagen, dass auch die Belegung der verschiedenen Anlagenabschnitte oder TAn individuell berücksichtigt werden müssen, ein Sachverhalt, der in Kapitel 4 näher betrachtet wird.

Im Hinblick auf die Produktionsmengen spielen vor allem die eingesetzten Materialmengen abhängig von dem Nennvolumen der Apparate oder die Größe des eingesetzten Equipments und die damit verbundenen Materialaufwendungen eine Rolle. Die Art des Produktionsprozesses hat vor allem im Hinblick auf die Eigenschaften der Produkte sowie Roh- und Einsatzstoffe, wie z. B. Korrosivität und Abrasivität einzelner Medien, als entscheidende Faktoren in Bezug auf die Instandhaltung und Lebensdauer (Lebenszyklusabschnitt Produktionsbetrieb), Einfluss auf die ökologische Bewertung. Ebenso spielen betriebliche Faktoren eine entscheidende Rolle, wie die Anlagenauslastung, die Temperatur- und Druckbelastung als Prozessparameter und die bei Batchprozessen sehr häufig anfallenden Lastwechsel, da z. B. Aufheiz- und Abkühlvorgänge Apparate stark belasten [91]. Es ist daher davon auszugehen, dass in der spezialchemischen Produktion der Aufwand für Instandhaltung keine untergeordnete Rolle spielt.

Die in Kapitel 2.2, Tab. 2.1, vorgestellten Vorgaben, Normen, Handbücher, Leitlinie etc. verweisen auf die Notwendigkeit der Erfassung einer Produktionsanlage für die Bewertung eines Produktionsprozesses. Allerdings berücksichtigt keine der dort vorgeschlagenen Ansätze die Verschiedenartigkeit von Produktionsanlagen hinsichtlich ihres Aufbaus und ihrer Nutzung. Produktionsanlagen und Infrastruktur werden bei der ökologischen Bewertung häufig mit dem Verweis auf Abschneideregeln von Betrachtungen aus-

geschlossen. Dieses Vorgehen wird auch von Klöpffer und Grahl [74] beschrieben, die auf die Regel verweisen, dass geringfügige Inputs in einem betrachteten Produktsystem nicht berücksichtigt werden. Dabei handelt es sich zumeist um Infrastruktur und Investitionsgüter, die im Rahmen von Abschneidekriterien, wie sie in der DIN EN ISO 14044 [26] angegeben sind, angewandt werden. Dies wird allerdings nach dem aktuellsten Handbuch [30] und der u.a. daraus entstandenen PEF-Leitlinie [5] konsequent ausgeschlossen. Der Aspekt der Instandhaltung wird allerdings in den meisten Vorgaben nicht berücksichtigt, obwohl dieser von der europäischen Kommission [5] als relevant eingestuft wird.

Die Instandhaltung gilt es bei der ökologischen Bewertung über die gesamte Nutzungsphase im Produktionsbetrieb zu betrachten und entsprechend dem einzelnen Prozess (Monoproduktanlage) bzw. den Prozessen (Mehrprodukt- bzw. Mehrzweckanlage) zuzuordnen. In den Handbüchern und Leitfäden wird auf die Produktionsdauer bzw. die reale Lebensdauer des einzelnen Equipments, siehe PEF-Leitfäden [5] bzw. ILCD-Handbook [30], oder wie im Handbuch der Ökobilanzierung [23] auf die Nutzungsdauer des Gebäudes verwiesen. Die Anwendung der sogenannten ökologischen Abschreibung nach der leistungsbezogenen, linearen Abschreibung unter Berücksichtigung der erwarteten Lebensdauer der Anlage ist, bei der Betrachtung von Prozessen die in Mehrprodukt-/Mehrzweckanlagen betrieben werden, i. d. R. nicht möglich. Die Lebensdauer der einzelnen Anlagegüter in Mehrprodukt-/Mehrzweckanlagen kann aufgrund der oben beschriebenen prozesslichen und betrieblichen Einflussgrößen stark variieren, Schwankungen zwischen wenigen Monaten und zwanzig Jahren sind keine Seltenheit [92]. Auch der im GHG-Protokoll vorgeschlagene Ansatz, die Anlagegüter im Jahr der Anschaffung vollständig abzuschreiben [27], kann aufgrund der vielen verschiedenen Prozesse über die Jahre, in denen die Anlage betrieben wird, nicht angewandt werden. Gleiches gilt für den Vorschlag des ILCD-Handbuches, die ökologischen Aufwendungen auf die erwartete Produktionsdauer in der Anlage umzulegen [30].

Im ILCD-Handbuch wird die Erfassung der Produktionsanlage mittels Abschätzung basierend auf Material, dessen verbauter Masse sowie der Ausführung empfohlen. Die Lebenszyklusabschnitte Apparateherstellung, Anlagenbau, Produktion (hier Lebensdauer und damit verbundene Instandhaltung) und Anlagenrückbau werden vernachlässigt. Dabei handelt es sich allerdings, wie oben dargestellt, um Abschnitte mit hohen Energiebedarfen. Daher ist davon auszugehen, dass die ökologischen Aufwendungen ebenfalls hoch sind und auf das Gesamtergebnis einen relevanten Einfluss haben. Fehlende Untersuchungen und Fallbeispiele, die die Relevanz dieser Lebenszyklusabschnitten belegen bzw. widerlegen oder zumindest einen Ansatz liefern, wie diese abgeschätzt werden können, lassen allerdings keine konkreten Aussagen zu.

In der Literatur finden sich nur wenige Beispiele, in denen die Produktionsanlage im Rahmen einer ökologischen Bewertung von Produktionsprozessen in der stoffwandelnden Industrie berücksichtigt wurde. Der Einfluss der Produktionsanlage auf die ökologische Bewertung von Produktionsprozessen wird u. a. von den Autoren Hischier et al. [53] als gering eingestuft. Diese empfehlen bei geringer Datenverfügbarkeit die Nutzung allgemeingültiger Infrastrukturdatensätze aus Datenbanken, wie z. B. ecoinvent [93]. Die Autoren verweisen auf den Datensatz „chemical plant, organics“, der pro kg produzierter Chemikalie einen Anteil von  $4 \cdot 10^{-10}$  Einheiten Produktionsanlage berücksichtigt. Die Daten beziehen sich auf eine Produktionskapazität von 50.000 t/a und eine Anlagenlebensdauer von 50 Jahren. Dargestellt ist konkret der Einfluss der Infrastruktur für die Produktion von Propylenglykol mit ca. 1,5 % und für Methanol mit 0,2 % in Bezug auf die gesamten ökologischen Aufwendungen bei Bewertung mittels dem Charakterisierungsmodell der Eco-Indicator '99-Methodik. [53] Bei beiden Chemikalien handelt es sich um Basischemikalien.

Die Abb. 2.7 zeigt auszugsweise die Zusammensetzung einzelner ecoinvent Datensätze am Beispiel des eben genannten Datensatzes „chemical plant, organics“, der die Infrastruktur für die Produktion von Chemikalien repräsentiert. Dieser Datensatz setzt sich zusammen aus sechs weiteren Datensätzen, die alle

## 2 Ökologische Bewertung von Produktionsprozessen

wesentlichen Bestandteile einer Produktionsstätte aus dem Sektor „Chemische Industrie“ abdecken sollen: die Produktionsanlage („facilities, chemical production (RER<sup>14</sup>)“), ein mehrstöckiges Gebäude („building, multistory (RER)“) und die Stahlkonstruktion der Produktionshalle („building, hall, steel construction (RER)“ sowie der Rückbau der Produktionsanlage als Entsorgungsprozess („dismantling, facilities, chemical production (RER)“) und die Naturraumbeanspruchung bzw. Landnutzung bei der Umgestaltung der Landschaft zum Industriegebiet („transformation, to industrial area“) und dessen Nutzung („occupation, industrial area“). Jeder dieser Datensätze wiederum setzt sich selbst aus Datensätzen zusammen, die u. a. den Ressourcen- und Energieeinsatz sowie Umwelteinflüsse durch Bereitstellung, Nutzung und Rückbau von genutzten Flächen berücksichtigen, in Abb. 2.7 beispielhaft für den Datensatz „facilities, chemical production (RER)“ dargestellt. Diese Verzweigung setzt sich fort, zurück bis zu den einzelnen Elementarflüssen, welche die Basis zur Erstellung der Sachbilanz darstellen.

Die in den Datenbanken verfügbaren Datensätze dienen lediglich als Orientierung und erste grobe Abschätzung. Der hier beispielhaft aufgeführte Datensatz basiert auf Daten des Chemieparkes Gendorf und des BASF Standortes Ludwigshafen. In beiden deutschen Industrieparks werden vorrangig Produktionsprozesse zur Herstellung von organischen Bulk- bzw. Basischemikalien betrieben. In der Beschreibung der Datensätze wird ausdrücklich darauf hingewiesen, dass aufgrund der Variabilität von Produktionen die Daten als erste Annahme dienen und nur eingesetzt werden sollen, wenn keine anderen Daten zur Verfügung stehen. [93]

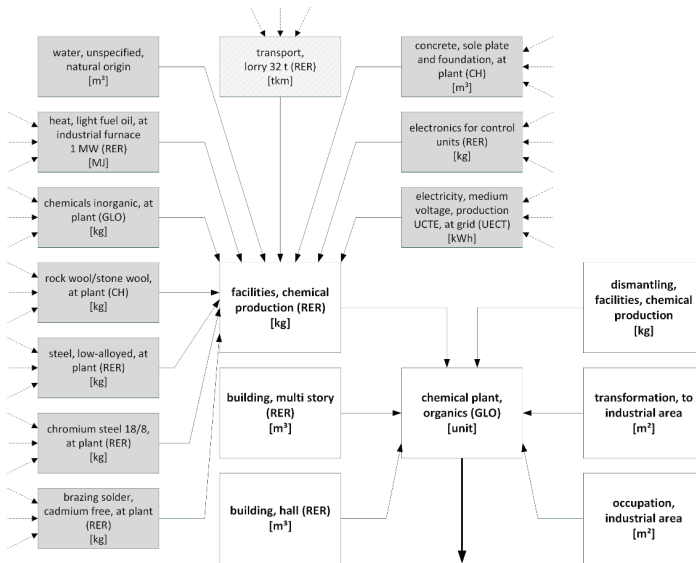


Abb. 2.7: Aufwendungen, die im ecoinvent Datensatz „chemical plant, organic“ mit einbezogen werden (nach [93]), erweitert um die Input Ressourcen (Technosphäre) des Datensatzes „facilities, chemical production“ (v2.2) bzw. „chemical factory construction“ (v3.3) (jeweils grau hinterlegt, Transportvorgang in v3.3 nicht enthalten)

In Mehrzweckanlagen werden i. d. R. pharmazeutische Produkte sowie Spezialchemikalien hergestellt. Diese Produktionsprozesse unterscheiden sich grundlegend von denen zur Herstellung von Basischemika-

<sup>14</sup> Die Abkürzung in den Klammern hinter den Datensätzen dient als Kennzeichen des Standortes auf den sich die Datensätze beziehen und folgt den international anerkannten Abkürzungen. „RER“ steht für Europa.



lien und sind nicht vergleichbar. Die ökologischen Aufwendungen liegen ein- bis zweimal höher über denen der Basischemikalien [57]. Die Synthesen der komplexen Moleküle sind deutlich umfangreicher und die einzelnen Reaktionsschritte gekennzeichnet durch veränderte Anforderungen in Bezug auf benötigte Reaktionsbedingungen und der nachgeschalteten Aufreinigung. Hinzu kommt, dass diese Produktionen vorrangig absatzweise betrieben werden, bei nur wenigen Tonnen oder einigen hundert Kilogramm pro Jahr. Untersuchungen haben gezeigt, dass die energetischen Verbräuche aufgrund der Instationarität der Prozesse deutlich über denen in der Produktion der Basischemikalien liegen. Ökologische Bewertungen, die Synthesen (Wirkstoffe und Spezialchemikalien) mit Edukten, Hilfsstoffen, Energieaufwendungen (Wärme und Elektrizität), Transportprozesse, Reststoffe und Emissionen berücksichtigen, zeigen, dass energetische Aspekte einen Anteil von 65...97 % zu den ökologischen Aufwendungen<sup>15</sup> beitragen. [57] Diese liegen somit höher als der Anteil, der durch die Produktion der Basischemikalien verursacht wird. Die Autoren Wernet et al. [94] geben diesen Anteil für die gleichen Methoden mit 39...83 % (Organische Chemie, Industriedaten) bzw. 27...81 % (Organische Chemie, ecoinvent) an. Die Betrachtungen von Hischer et al. [53] zeigen für die Basischemikalie Propylenlykcol ca. 5 % (Eco-Indicator'99). Auch ergeben diese Untersuchungen, dass die Produktionen in dem Pharma- und Spezialchemiesektor nicht vergleichbar sind mit der Bulkchemikalienherstellung. Dies lässt darauf schließen, dass dies auch für die Produktionsstätten im Rahmen der ökologischen Bewertung zutrifft. Es wird davon ausgegangen, dass die Anlageninfrastruktur, wie Peripherie und Apparate, im industriellen Maßstab aufgrund der damit verbundenen Komplexität und den bereits genannten gesonderten Anforderungen berücksichtigt werden muss.

Ein Großteil der Veröffentlichungen befasst sich mit ökologischen Bewertungen im Rahmen von Forschung und Entwicklung mit dem Ziel, Ansätze zu finden, die eine Einbindung von Umweltaspekten in frühe Phasen der Prozessentwicklung und des -designs ermöglichen. Zu diesem Zeitpunkt liegen i. d. R. noch keine Daten zur Produktionsanlage vor und es wird auf grobe Abschätzungen, basierend auf Laboranlagen, oder eben Standarddatensätzen aus Datenbanken wie in Abb. 2.7 gezeigt, zurückgegriffen. Im Bereich Spezialchemie haben sich z. B. Kralisch und Kreisel [38] mit den ökologischen Aspekten bei der Umstellung eines Batchverfahrens auf eine kontinuierliche Fahrweise unter Verwendung eines Reaktors im Mikromaßstab beschäftigt. Dabei wird auch der Einfluss der Peripherie und Hauptapparate (10 l Batchansatz bzw. CYTOS<sup>®</sup> Lab System [95]) betrachtet und mittels Sensitivitätsanalysen der Einfluss der Lebensdauer der Mikroreaktoren (eine Woche, drei Monate, drei und 30 Jahre) auf die Ergebnisse der ökologischen Bewertung untersucht. Die Ergebnisse zeigen im Hinblick auf den Einfluss der Peripherie, bezogen auf 30 Jahre, dass diese in einzelnen Wirkungskategorien nur eine untergeordnete Rolle spielt, die Apparate vor allem in den Toxizitäts-Wirkungskategorien bei höherem Materialaufwand (Lebensdauer der Mikrostruktur von einer Woche) einen hohen Anteil haben und, dass diese sich mit einem Anteil von ca. 11 % auch im KEA (Kumulierte Energieaufwand) wiederfinden. Kralisch und Kreisel [37] untersuchten außerdem den Industriemaßstab (400 l Batch, CYTOS<sup>®</sup> Pilot System mit zehn Mikroreaktoren) mit der Vereinfachung, dass nicht die Peripherie, sondern lediglich die Mikrokomponenten in die Bewertung mit einfließen, da die Peripherie auf Basis vorhergehender Studien (angenommenen Lebensdauer: 30 Jahre) als nicht relevant auf die ökologischen Auswirkungen des Gesamtsystems eingestuft wird.

Ebenfalls eine Abschätzung der Aufwendungen, verursacht durch die Produktionsanlage auf Basis von Labordaten, erfolgt bei den Untersuchungen von Griffiths et al. [96], die verschiedenen eisen- und palladiumbasierten Katalysatoren im Nanopartikelformat zur Gewinnung von Kohlenwasserstoffen aus gering konzentriertem Kohlendioxid betrachten. Basierend auf den Massen der in den Hauptapparaten verbauten Materialien erfolgt die Ermittlung der ökologischen Aufwendungen für die Bereitstellung der verschiedenen Stoffe. Unter Berücksichtigung der erwarteten Lebensdauer (10...25 Jahre) werden die einzelnen ermittelten Wirkungsindikatorwerte mittels Allokation über die je Ansatz hergestellten Kataly-

<sup>15</sup> Betrachtet wurden der Kumulierte Energieaufwand (KED), EcoIndicator99, IPCC 2007 und ES2006 (Methode der ökologischen Knappheit).

satornengen zugeordnet. In der Bewertung fließt lediglich die Bereitstellung der Materialien ein – andere Lebenszyklusabschnitte werden nicht berücksichtigt. Die Ergebnisse zeigen, dass die erfasste Infrastruktur im Vergleich mit anderen Inputs und Outputs einen geringeren Einfluss auf die ökologische Performance ausübt, ähnlich wie eingesetzte Lösemittel oder Kieselsäure als Katalysatorsubstrat. Aufgrund der eingesetzten Metalle als Katalysator und der benötigten Energie für die Hochtemperaturabschnitte, die mit elektrischer Energie beheizt werden, spielen die anderen genutzten Stoffe in der Laborsynthese eine eher untergeordnete Rolle.

Ott et al. [52] bewerten Produktionsprozesse in der Wirkstoffherstellung mit Schwerpunkt auf die Synthesen von API. In Bezug auf die ökologischen Auswirkungen, die durch die Apparate bzw. die Anlage verursacht werden, verweisen die Autoren auf den Ansatz von Hirschier et al. [53], der nachfolgend dargestellt wird, und damit die Nutzung von Standarddatensätzen aus der Datenbank ecoinvent [93]. Es wird mit Verweis auf eigene nicht aufgeführte Analysen und auf Kralisch und Kreisel [38] davon ausgegangen, dass der Einfluss der gesamten Anlageninfrastruktur weniger als 1 % beträgt und damit nur eine untergeordnete Rolle spielt.

Eine vergleichende Bewertung der Umweltauswirkung bei der Überführung einer absatzweisen Produktion in eine kontinuierliche Prozessführung erfolgt ebenfalls durch Paschetag et al. [42]. Die Ergebnisse zeigen allerdings in einzelnen Wirkungskategorien einen deutlichen Einfluss der Produktionsanlage, die für die Herstellung von Bindemitteln auf natürlicher Rohstoffbasis betrieben wird. In die Betrachtungen sind die verbauten Materialien und deren Mengen berücksichtigt, wobei neben den Apparaten auch das Equipment sowie die Mess- und Regeltechnik einfließen. In den Untersuchungen von Grundemann [97] werden ebenfalls die ökologischen Aufwendungen, die mit der Bereitstellung der Materialien der mikrostrukturierten kampagnenbetriebenen Mehrproduktanlage in der Fasermalertintenherstellung und deren Entsorgung auf Basis der verbauten Massen erfasst und mit einem absatzweisen Betrieb verglichen. Die Ergebnisse zeigen, dass der Anteil der Produktionsanlage bei kontinuierlicher Fertigung auf das Gesamtergebnis der ökologischen Bewertung bei einer linearen Abschreibung über eine Lebensdauer von 20 Jahren den zweitgrößten Einflussfaktor in der Wirkungskategorie Klimaänderung, in der Wirkungskategorie Flächenbedarf sogar den größten Part darstellt. Ebenfalls einen erkennbaren Einfluss der ökologischen Aufwendungen der Produktionsanlage auf die ökologische Performance einer verfahrenstechnischen Grundoperation zeigen Wesche et al. [98]. Der Fokus der Untersuchungen liegt dabei in der apparativen Ausführung und dem damit einhergehenden Energie- und Ressourcenverbrauch im Betrieb. Sowohl der Apparat als auch das für den Betrieb der Grundoperation benötigte Equipment fließen dabei in der Bewertung ein. Neben Materialart und -masse nach [30] werden auch die Instandhaltung über die Lebensdauer unter Berücksichtigung der Produktionszeit und Auslastung nach [61] erfasst. In der aufgezeigten Wirkungskategorie Humantoxizität liegt der Anteil an der Umweltpformance bei ca. 9...22 %.

Eine Berücksichtigung von Instandhaltungsmaßnahmen über die Lebensdauer der Produktionsanlage, wie in Wesche et al. [61] gezeigt, erfolgt nahezu in keiner der ökologischen Prozessbewertungen. Der Sachverhalt wird zwar von einzelnen Autoren genannt, allerdings meistens als vernachlässigbar eingestuft. In den Untersuchungen von Piccinno et al. [49] wird z. B. das Scale-up von chemischen Prozessen im Hinblick auf die ökologische Bewertung fokussiert, die Produktionsanlage allerdings mittels der Standard-Datensätze aus der ecoinvent Datenbank abgebildet. Ebenfalls mit dem Scale-up im Zusammenhang mit der ökologischen Bewertung von Produktionsprozessen beschäftigen sich Gavankar et al. [50], die sowohl die Aufwendungen, die mit der Produktionsanlage einhergehen als auch die Instandhaltung als zu geringfügig bezeichnen. Die von ihnen genutzten Datensätze zur Anlage selbst stammen aus der Datenbank CEDA [99] (Comprehensive Environmental Data Archive).

Die Produktionsanlage sowie die im Verlauf des Lebenszykluses verursachten Aufwendungen werden ebenfalls in einem Großteil der in der Literatur existierenden Ansätze zur Generierung von Sachbilanzdaten

für Chemikalien, Fein- und Spezialchemikalien oder pharmazeutische Wirkstoffe nicht erfasst. I. d. R. handelt es sich dabei um methodische Ansätze, deren Entwicklung auf Basis einer Vielzahl von Produktionsdaten aus der Industrie erfolgt und oftmals in ein Tool, wie z. B. ecosolvent [100, 101] oder FineChem [102], überführt sind. So entwerfen Geisler et al. [73] ein Vorgehen zur Abschätzung von Sachbilanzdaten von Fein- und Spezialchemikalien, die typischerweise in Mehrprodukt- bzw. Mehrzweckanlagen produziert werden. Auch in diesem Zusammenhang werden weder die Produktionsanlage noch die Infrastruktur oder Instandhaltung erfasst, die nach Aussage der Autoren bei anderen Betrachtungen in Bezug auf die Chemikalienproduktion im Allgemeinen vernachlässigt werden. Der von Jiménez-González et al. [55] entwickelte Ansatz zur Ermittlung von Sachbilanzdaten für die Herstellung eines API berücksichtigt diese ebenfalls nicht. Ebenso nicht der Ansatz von Capello et al. [51], der die Ermittlung von Aufwendungen bei der destillativen Rückgewinnung von Lösemitteln aus Abfällen betrachtet.

Da die in der Literatur verfügbaren Ansätze zur Ermittlung von Sachbilanzdaten die Produktionsanlagen und -infrastruktur sowie Instandhaltung nicht berücksichtigen, ist der Anwender darauf angewiesen, seine Datenlücken mittels Datensätzen aus Datenbanken oder durch zusätzliche Abschätzungen zu vervollständigen. Häufig wird der Aspekt der Produktionsstätte in den ökologischen Bewertungen allerdings gar nicht erfasst. Wie bereits oben beschrieben, stehen als Datensätze meist nur Standarddatensätze für die Basischemikalienproduktion zur Verfügung. Für die ökologische Bewertung von Fein- und Spezialchemikalien bzw. deren Produktionsprozessen sind diese vor allem im Hinblick auf den Betrieb von Mehrprodukt- bzw. Mehrzweckanlagen nicht geeignet. Die Anwendung der Datensätze führt i. d. R. zu der Annahme, dass die Produktionsanlage und ihre -infrastruktur in der Bewertung keinen bzw. kaum einen Einfluss haben und damit aus den Betrachtungen ausgeschlossen werden. Die Untersuchungen für Produktionsprozesse der Spezialchemie einzelner Autoren [97, 42, 98] haben allerdings gezeigt, dass die Produktionsanlage bei der Prozessbewertung einen wesentlichen Anteil an den ökologischen Gesamtaufwendungen haben kann.

Der Überblick zu den einzelnen Lebenszyklusabschnitten in diesem Kapitel zeigt, mit welchem Datenumfang die Erfassung der Produktionsanlage im Rahmen der ökologischen Bewertung eines Produktionsprozesses verbunden ist. Um den Arbeitsaufwand handhabbar zu gestalten, sind Ansätze notwendig, um die Datenerfassung zu vereinfachen. In der Arbeit der Autoren Wesche et al. [61] wird ein Ansatz vorgestellt, der die Integration der ökologischen Aufwendungen, die durch die Produktionsanlage verursacht werden, anstrebt. Der Schwerpunkt der Untersuchungen liegt auf der Erfassung einer Mehrproduktanlage, basierend auf verbauten Materialarten und -mengen, wie im ILCD-Handbuch vorgeschlagen und der Integration der Lebensdauer sowie der mit dem Produktionsbetrieb verbundenen Instandhaltung. Außerdem wird eine Allokation dieser Aufwendungen auf den einzelnen Prozess angestrebt. In der hier präsentierten Arbeit werden diese Überlegungen, bezogen auf eine Mehrzweckanlage, ausführlicher dargestellt. Im Vordergrund steht die Integration von Lebenszyklusdaten in die Bewertung von in Mehrzweckanlagen betriebenen Produktionsprozessen. In Kapitel 4.2 werden dazu Untersuchungen präsentiert, die einen Überblick über den Umfang und die Komplexität geben sowie ein methodisches Vorgehen aufzeigen, wie die Aufwendungen, resultierend aus der Anlage, berücksichtigt werden können.

## 2.6 Einordnung der eigenen Arbeit

In dieser Arbeit liegt der Schwerpunkt auf der ökologischen Bewertung von Produktionsprozessen, die in Mehrzweckanlagen betrieben werden. Die Ermittlung der Verbrauchsdaten, hier nach der in Abb. 2.3 gezeigten Klassifizierung, bezogen auf die Inputs elektrische Energie und Betriebsstoffe zur Wärmebereitstellung, erfolgt orientiert nach den Ansätzen von Bieler et al. [67] und Szijjarto et al. [70]. Dies umfasst die Berechnung der Verbräuche nach Vorgaben in der Standardliteratur, wie dem VDI-

Wärmeatlas [103], unter Berücksichtigung von Verlusten. Die Ansätze werden in dieser Arbeit erweitert um apparative Aspekte sowie die Integration der damit verbundenen Restriktionen, wie maximale Temperaturdifferenzen zwischen Betriebsstoff- und Produktseite. Ebenfalls berücksichtigt werden prozessbezogene Restriktionen, bedingt z. B. durch die in den Rezepturen vorgegebenen Stoffe. Dazu zählen u. a. Temperaturrampen, die ein hitzeempfindliches Produkt vor einer Strukturschädigung bewahren. So werden den Verlusten und Mehraufwendungen, resultierend aus der Tatsache, dass der Produktionsprozess in einer Anlage betrieben wird, Rechnung getragen. Die Besonderheiten einer Mehrzweckanlage hinsichtlich der ausrüstungsorientierten Auslegung, die gekennzeichnet ist durch eine Zusammenstellung von Apparaten und Maschinen für bestimmte Grundoperationen sowie dem damit verbundenen Bereitstellen von möglichst großen Betriebsfenstern, spiegeln sich damit auch in den rechnerisch ermittelten Verbrauchsdaten wider. So können diese berücksichtigt werden, auch wenn keine Realdaten durch Messung direkt am Apparat zur Verfügung stehen.

Zur Identifizierung von Hotspots und Verbesserungsansätzen in den einzelnen Prozessen dient ein geeigneter Modellansatz, der verschiedene Detaillierungsgrade abbilden kann. Als Erweiterung zu dem Ansatz von Van der Vorst et al. [59] wird neben den Grundoperationen (GO) und den Betriebsnetzen als zusätzlicher Betrachtungsrahmen der Produktionsprozesse eingeführt. Die Abbildung erfolgt in einem Stoffstromnetzmodellierungstool, welches in eine verschiedene Werkzeuge umfassende Modellierungsumgebung eingebunden ist. Dies ermöglicht sowohl die Abbildung von verfahrenstechnischen Sachverhalten als auch die Quantifizierung der ökologischen Performance.

In die Betrachtungen dieser Arbeit wird die Inputklasse Anlage integriert, die zwar in Handbüchern, Leitlinien und Normen gefordert, in der Literatur bezogen auf die ökologische Bewertung von Produktionsprozessen, für Mehrzweckanlagen allerdings nicht präsent ist. Auch an dieser Stelle wird der Besonderheit dieses Anlagentyps Rechnung getragen und eine Systematik zur Erfassung und Integration in die ökologische Bewertung vorgeschlagen. Letztendlich wird in dieser Arbeit die Anwendung der Modellierung und der Einflussgröße „Anlage“ auf die konkrete Analyse und Bewertung eines einzelnen Produktionsprozesses in einer Mehrzweckanlage vollumfänglich präsentiert. Außerdem soll das durch die Anwendung der Methode generierte Potential verdeutlicht werden. Dies geschieht durch das Aufzeigen von abgeleiteten Handlungsempfehlungen zur Verbesserung der ökologischen Performance des einzelnen Prozesses bzw. der Produktion.



## 3 Modellierungsansatz für Produktionsprozesse

In diesem Kapitel steht die Abbildung von Produktionsprozessen der stoffwandelnden Industrie in einem Modell zur Ermittlung von Daten hinsichtlich deren Energie- und Ressourceneinsatz im Fokus. Dazu dient der nachfolgend dargestellte Modellierungsansatz, der in einer Modellierungsumgebung eingebettet, die Basis für ökologische Bewertungen und Analysen hinsichtlich der Umweltperformance eines Prozesses bildet. Den Einfluss verschiedener verfahrenstechnischer Aspekte in der Produktion auf die Berechnung der Verbrauchsdaten wird als ein Bestandteil der Modellierung anhand eines konkreten Beispiels untersucht.

Im Folgenden werden die Begrifflichkeiten Prozess, Prozessabschnitt, Prozessoperation und Prozessschritt entsprechend der Definitionen in der DIN EN 61512-1 [104] verwendet. Allerdings wird die Bezeichnung Prozessoperation durch den Begriff Grundoperation (GO) ersetzt, da dieser im verfahrenstechnischen Umfeld geläufiger ist.

### 3.1 Das 3-Ebenen-Modell zur Abbildung von Produktionsprozessen

Die Entwicklung des Modellierungsansatzes erfolgt orientiert an der absatzweisen Produktion, betrieben in einer Mehrzweckanlage aus dem Bereich der Spezialchemie. Dazu wird ein Modellansatz gewählt, der sowohl Analysen als auch Bewertungen von Produktionsprozessen in Mehrzweckanlagen in unterschiedlichen Detaillierungsgraden ermöglicht. Ziel ist es, sowohl eine möglichst übersichtliche, plakative Darstellung im Modell selbst zu erreichen als auch die Erstellung von Massen- und Energiebilanzen als Basis für verschiedene Bewertungsansätze aus ökologischer Perspektive zu unterstützen. Die so zur Verfügung stehende Datenbasis soll außerdem die Identifizierung von Verbesserungsansätzen sowie eine vergleichende Betrachtung möglicher verfahrenstechnischer Alternativen ermöglichen.

Verfahrenstechnische Produktionsprozesse können modular strukturiert als eine Abfolge von GO abgebildet werden, wobei die Anzahl an verfügbaren GO im Bereich der chemischen Verfahrenstechnik begrenzt ist [105]. Diese GO finden sich i. d. R. variabel in Art, Anzahl und Abfolge in den verschiedenen Produktionsprozessen der Prozessindustrie wieder. Der einzelne Produktionsprozess, sowohl kontinuierlich als auch chargenweise oder in Kampagnenform betrieben, ist durch die individuelle Verknüpfung verschiedener GO darstellbar. Basierend auf diesem Sachverhalt wird der Modellierungsansatz gestaltet.

An die Grundstruktur des Modells sind die nachfolgenden Anforderungen gestellt:

- Abbildung eines einzelnen oder mehrerer Produktionsprozesse (z. B. für Vergleiche untereinander) in verschiedenen Detaillierungsgraden,
- Ermöglichen von Schwerpunktanalysen und Sensitivitätsstudien zur Untersuchung einzelner GO oder einzelner Prozessabschnitte und deren apparativer Realisierung,
- Erfassung der mit dem Produktionsprozess verbundenen Inputs und Outputs als Basis für die Erstellung von Massen- und Energiebilanzen<sup>16</sup>,

---

<sup>16</sup> Energie umfasst hier vorrangig die mit der Wärmezufuhr und -abfuhr verbundenen Verbräuche und elektrischem Strom sowie die Abwärme als Emission.

- Ermittlung der Verbrauchsdaten zur Aufbereitung der eingesetzten Betriebsstoffe sowohl aus der zentralen als auch dezentralen Versorgung und deren Zuordnung zu den einzelnen GO – gleiches für die Behandlungswege der Reststoffe,
- Berücksichtigung der Anlagenart, in der die Produktionsprozesse betrieben werden, z. B. Mono- oder Mehrzweckanlagen.

Diese Anforderungen bedient das in Abb. 3.1 gezeigte 3-Ebenen-Modell. Es ermöglicht die Darstellung eines oder mehrerer Produktionsprozesse, eingebettet in das betriebliche Umfeld, und unterstützt somit Untersuchungen nach dem Cradle-to-Gate-Ansatz. Wie in der Arbeit von Wesche et al. [61] beschrieben, wird in der Ebene 3 die betriebliche Infrastruktur abgebildet. Dazu gehören neben der Produktionsanlage und deren apparativer Ausstattung, die Betriebsnetze zur Versorgung mit verschiedenen Betriebsstoffen (Wärmeträger, Inertgase, etc.), vorhandene Tanklager zur Bereitstellung von Lösungsmitteln sowie die verschiedenen internen und externen Entsorgungswege. Die Ebene 2 des Modells repräsentiert die Produktionsprozesse, strukturiert nach ihren verfahrenstechnischen GO. In der Ebene 1 des Modells sind die einzelnen GO im Detail definiert, d. h. in Prozessschritten gegliedert unter Berücksichtigung der apparativen Gestaltung.

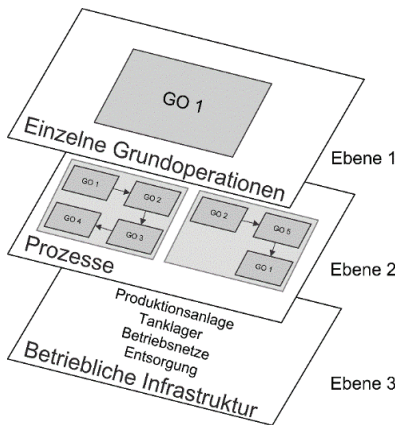


Abb. 3.1: 3-Ebenen-Modell zur Abbildung von Produktionsprozessen [61]

Diese Art der Struktur zur Erfassung der Verbrauchsdaten von Produktionsprozessen ist angelehnt an den Ansatz von Van der Vorst et al. [59], in dem für die ökologische Bewertung von Produktionsprozessen und zur Ermittlung von Energie- sowie Ressourcenbedarfe drei verschiedene Systemgrenzen definiert werden. Als kleinste Einheit sind in diesem Fall die Grundoperationen angeführt ( $\alpha$ -Systemgrenze). Dieser Betrachtungsrahmen wird erweitert auf die Standortinfrastruktur ( $\beta$ -Systemgrenze) und den direkten Austausch mit der Umwelt in Form von z. B. Elementarflüssen ( $\gamma$ -Systemgrenze), als am weitesten gefasster Betrachtungsrahmen. Mit dem hier vorgestellten 3-Ebenen-Modell wird der vollständige Produktionsprozess als zusätzlicher Schwerpunkt in die Betrachtung integriert. Dies hat den Vorteil, dass bei Auswertungen der Blick „auf das Ganze“ nicht vernachlässigt wird, da sowohl Material- als auch Energieströme im Produktionsprozess sowohl kumuliert als auch individuell je GO darstellbar sind. Ein Aspekt, der vor allem im Hinblick auf Aussagen bzgl. möglicher Verbesserungspotentiale nicht vernachlässigt werden darf, ist der Aufwand einzelner GO stellenweise bedingt wird durch die verfahrenstechnische Realisierung einer vor- oder nachgelagerten GO. Ebenfalls Bestandteil im 3-Ebenen-Modell ist die Produktionsanlage selbst, die der betrieblichen Infrastruktur zugeordnet ist. Wie bereits in Kapitel 2.2 be-

geschrieben, ist diese und die damit verbundenen Aufwendungen bei der ökologischen Bewertung zu berücksichtigen. Die Einbettung in die Ökosphäre ( $\gamma$ -Systemgrenze) wird in dem hier gewählten Ansatz als nachrangig eingestuft, da vordergründig auf die Datenerfassung zum Produktionsprozess als Zusammenspiel einzelner Verfahrensstufen und dessen Analyse abgezielt wird.

Die **Betriebsebene (Ebene 3)** umfasst die betriebliche Infrastruktur, in der der Produktionsprozess eingebettet ist. Dies beinhaltet das Tanklager, in dem die eingesetzten Lösemittel bevorratet sind. Die elektrischen Verbräuche der Tanklagerpumpen sind Aufwendungen, die den einzelnen Produktionsprozessen in Abhängigkeit von der eingesetzten Lösemittelmenge zugeordnet werden. Benötigte Kleinmengen an Lösemitteln oder festen Chemikalien werden im Batchbetrieb i. d. R. händisch bzw. Feststoffe mittels Feststoffeintrag (z. B. mittels Powder Transfer System) zugegeben. Die damit einhergehenden energetischen Aufwendungen werden in den Detailmodellen der einzelnen GO erfasst, da diese spezifisch und nur vereinzelt zum Einsatz kommen. Des Weiteren werden in der 3. Modellebene die Betriebsnetze zur Versorgung der Produktionsanlage beschrieben – sowohl zentral aus den Betriebsnetzen als auch dezentral, erzeugt direkt an der Anlage. Dies umfasst z. B. Wärme, Inertgas oder VE-Wasser. Relevant für die ökologische Bewertung sind dabei, wie in Kapitel 2.3.2 dargelegt, die Aufwendungen in Form von Material- und Energieeinsatz, die mit der Bereitstellung bzw. Aufbereitung in den i. d. R. vorliegenden Kreislaufsystemen zusammenhängen. Dies kann, wenn vorhanden, in Form von Betriebsdaten oder durch Berechnungsmodelle, basierend auf thermodynamischen Grundlagen, erfolgen. Die Aufbereitung der Betriebsstoffe bzw. deren Bereitstellung sowie die Abfallbehandlung sind unternehmensabhängig und müssen individuell erstellt werden [59, 64, 61]. Die Integration von Betriebsdaten kann durch die Einbindung empirischer Gleichungen erfolgen, wie z. B. von Blickenstorfer [64], Szijjarto et al. [70] oder Rérat et al. [72] gezeigt. Für den hier vorgestellten Modellierungsansatz sind diese allerdings als Funktionen von Mengen, Volumenströmen o.ä. abzubilden, um eine verbrauchsabhängige Zuordnung zu den einzelnen Produktionsprozessen zu gewährleisten. Abhängig von der Art der Produktionsanlage kann die Allokation von Aufwendungen auch nach einem Top-Down-Ansatz erfolgen. Dies ist aber für Produktionsanlagen, in denen verschiedenste Prozesse mit unterschiedlichen Chargengrößen betrieben werden, i. d. R. nicht möglich, wie Bieler et al. 2003 [65] in ihren Untersuchungen zeigten.

Die internen als auch externen Entsorgungswege für anfallende Reststoffe werden in dem Modell in Abhängigkeit von den anfallenden Reststoffmengen je Produktionsprozess erfasst. Diese sind ebenfalls in Abhängigkeit von der Entsorgungsart mit Aufwendungen zur Aufbereitung verbunden, z. B. in Form von Chemikalien. In diesem Zusammenhang wird außerdem erfasst, welche Reststoffmengen Weiterverwertungs- oder Recyclingwegen zugeführt werden. Diese Daten sind vor allem im Hinblick auf die ökologische Bewertung relevant, da durch die Reststoffaufbereitung neben den Aufwendungen auch aus einer Verwertung resultierende Kompensationen von Umweltwirkungen zu erfassen sind.

Für die vollständige ökologische Bewertung eines Produktionsprozesses sind in der Ebene 3 außerdem die in der Anlage verbauten Apparate (wie Rührwerksapparate, Nutschen etc.), das Equipment (wie Pumpen, Filter, etc.) und die Peripherie (wie Verrohrung, MSR-Technik, etc.) hinterlegt sowie eine Möglichkeit der Zuordnung zu den einzelnen GO, die in der Modellebene 2 abgebildet sind. Zu den Anlagenbestandteilen werden neben den verbauten Materialarten und -massen auch die Apparatelebensdauern hinterlegt. Die Lebensdauer bildet nach dem in Kapitel 4.2 vorgestelltem Ansatz zur Berücksichtigung von Produktionsstätten im Mehrzweck- bzw. Mehrproduktanlagenumfeld in der ökologischen Bewertung die Basis für die Allokation der Anlagenaufwendungen. Außerdem dient diese der Ermittlung von Aufwendungen, die durch die Instandhaltung verursacht werden. Die Herstellung der einzelnen Anlagenkomponenten ist, wie auch in Wesche et al. [61] angeführt, aufgrund mangelnder Daten und dem mit der Datenerhebung verbundenen Aufwand bisher nicht abbildbar. Für die ökologische Bewertung kann in diesem Zusammenhang auch nicht auf generische Datensätze aus Datenbanken zurückgegriffen werden, da diese (noch) nicht existieren. Die Zuordnung der Anlage zu einem Produktionsprozess ist unmittelbar abhängig

von der Art der Produktionsstätte. Für Monoproduktanlagen sollte nach Vorschlag der Europäischen Kommission [5] die Zuordnung z. B. mittels geplanter Produktionsmenge oder Batchanzahl über die geplante Lebensdauer der Anlage erfolgen. Bei Produktionsprozessen, die in Mehrprodukt- oder Mehrzweckanlagen betrieben werden, ist dies so nicht möglich, wie in Kapitel 2 beschrieben.

In der **Prozessebene (Ebene 2)** ist der Produktionsprozess abgebildet. In dieser Ebene erfolgt die Bilanzierung der Inputs und Outputs aggregiert aus den Bilanzen der einzelnen GO, wobei die Stoffe und Energien entsprechend ihrer Klassifizierung erfasst werden, vgl. Kapitel 2.3.2. Mittels graphischer Aufbereitung, wie z. B. eines Sankey-Diagrammes, kann so ein erster Überblick bzgl. des Energie- und Materialeinsatzes und der anfallenden Reststoffe erzeugt werden. In dieser Ebene besteht außerdem die Möglichkeit, Bilanzierungen um einzelne GO in Form von Black-Box-Betrachtungen durchzuführen. Dies ermöglicht z. B. erste Schwerpunktanalysen, sodass GO mit hohem Energie- und Ressourceneinsatz oder ökologischem Aufwand im Produktionsprozess identifiziert werden können. In dieser Ebene wird somit ein erster detaillierter Überblick zur Verteilung der Aufwendungen des einzelnen Produktionsprozesses auf seine verfahrenstechnischen Grundoperationen gegeben.

Die einzelnen GO können in der **Grundoperationsebene (Ebene 1)** im Detail analysiert werden. Diese umfasst die Darstellung der Apparate, wie Rührwerksapparate (RWA), Wärmeübertrager (WÜ) oder Destillationskolonnen und des Equipments, wie Vorlagebehälter, Pumpen oder Filter – in Summe die TAN, in der die GO betrieben wird. Zur Darstellung der verfahrenstechnischen Aufgabe, die die GO erfüllt, wird diese in ihre Prozessschritte, u.a. Kühlen, Verdampfen, Rühren, etc., als kleinste Prozesseinheit zerlegt. In Abb. 3.3 ist dies beispielhaft für eine Destillation als typische GO gezeigt. Die einzelnen Prozessschritte sind u.a. bedingt durch die Prozessführung und die apparative Ausführung des für den Betrieb eingesetzten Equipments. Für die Modellierung, die den Anspruch erhebt, Produktionsprozesse im Detail analysieren zu können, bedeutet dies, dass sowohl Prozess- als auch Anlagen- und Betriebsparameter berücksichtigt werden müssen. Beispiele für diese Parameter werden in der folgenden Beschreibung zum Modellansatz, siehe Kapitel 3.2, aufgezeigt. Die Modelle der GO umfassen neben der eigentlichen Verfahrensaufgabe optional das Rüsten und Reinigen sowie ebenfalls optional den Basisbetrieb der TAN, in der die GO betrieben wird. Die optionalen Bestandteile stellen sicher, dass bei Produktionsprozessen im Batchbetrieb Aufwendungen erfasst sind, die unmittelbar durch die Art der Betriebsführung verursacht werden. Die Reinigung von Apparaten und Equipment, als eine Kombination von verschiedenen Prozessschritten, ist in Art und Umfang i. d. R. sowohl von den eingesetzten Stoffen als auch der Ausführung der Apparate begründet und daher unmittelbar den GO zugeordnet. Abhängig vom Produktionsumfeld wird in dieser Ebene auch der Basisbetrieb des von der GO belegten Anlagenabschnitts erfasst. Dies ist vor allem bei Prozessen relevant, die in Anlagen betrieben werden, in denen trotz Batchproduktion ein fortlaufender Betrieb aufrechterhalten wird, wie z. B. Mehrprodukt- oder Mehrzweckanlagen.

Um eine möglichst transparente Auflösung der Inputs und Outputs im Produktionsprozess zu erhalten, können Stoffstromnetzmodellierungstools (SSNM-Tools) für die Abbildung von Produktionsprozessen verwendet werden. Diese unterstützen zum einen die graphische Darstellung und können zum anderen der Verwaltung von Prozessdaten dienen. Für diese Forschungsarbeit wurde das Tool *umberto*<sup>®</sup> (Version 5.6) verwendet [106]. Ein weiterer Vorteil dieser Tools ist ihre Anbindung an Datenbanken, wie z. B. GaBi oder ecoinvent, die sowohl Sachbilanzdatensätze als auch Charakterisierungsmodelle mit entsprechenden –faktoren zur Ermittlung der Wirkungsindikatorwerte verschiedener Umweltproblemfelder für die ökologische Bewertung beinhalten. Die Software *umberto*<sup>®</sup> 5.6 wurde von der ifu Hamburg GmbH und dem ifeu Heidelberg GmbH entwickelt [107] und basiert auf dem Prinzip der Petri-Netze, ein von Carl Adam Petri entwickeltes Konzept [108] zur Beschreibung von u. a. diskreten Ereignissen. Zur Modellierung

stehen mit Stellen (Kreise), Transitionen (Quadrate) und Kanten (Pfeile) drei Elemente<sup>17</sup> zur Verfügung, um passive und aktive Vorgänge abzubilden sowie diese durch Verbindung miteinander in Beziehung zu setzen. umberto<sup>®</sup> 5.6 ermöglicht einen gewissen Grad an Datenverwaltung, stellt eine graphische Benutzeroberfläche zur Verfügung und erlaubt eine quantitative Bestimmung sowie eine rechnerische Verknüpfung ein- und austretender Stoff- und Energieflüsse [106]. Die Modellierung kann hierarchisch erfolgen, d. h. einzelne Modellnetze können als Subnetze in Form von Subnetz-Transitionen definiert und in zusätzlichen Ebenen abgebildet werden. So besteht die Möglichkeit komplexe Sachverhalte überschaubar darzustellen. Die ökologische Bewertung ist nach der Massen- und Energiebilanzierung des abgebildeten Produktionsprozesses und der Verknüpfung der Inputs und Outputs mit generischen Sachbilanzdatensätzen aus den implementierten Datenbanken mittels der hinterlegten Charakterisierungsmodelle einzelner Bewertungsmethoden, wie z. B. Eco-Indicator99 [109], CML-IA [110] oder ReCiPe 2008 [111], möglich.

Das Tool umberto<sup>®</sup> ermöglicht durch die Definition von Subnetzen eine Modellierung auf verschiedenen Ebenen, sodass durch die Festlegung verschiedener Betrachtungsrahmen detaillierte Analysen unterstützt und vorhandene Hotspots identifiziert werden können. Schwerpunktanalysen ermöglichen in diesem Zusammenhang die Identifizierung von Potentialen und die Ableitung von Vorschlägen hinsichtlich Verbesserungsansätzen als Basis für die Arbeiten in der Forschung und Entwicklung. In Verbindung mit dem 3-Ebenen-Modell sind außerdem Sensitivitätsstudien möglich, sowohl bezogen auf die Prozessführung als auch auf apparativen Änderungen.

Für die detaillierte Abbildung von Produktionsprozessen sind eine Vielzahl von Daten notwendig, die, zur Gewährung der Übersichtlichkeit und Verwaltung, den Einsatz von verschiedenen Tools, wie z. B. Datenbanken oder Tabellenkalkulationsprogrammen wie Excel, erfordern [71]. Daraus resultiert für diese Arbeit eine Modellierungsumgebung, die verschiedene Werkzeuge einbindet, siehe Abb. 3.2.

Kernelement der Modellierungsumgebung stellt die SSNM dar, in der Produktionsprozesse nach dem 3-Ebenen-Modell abgebildet werden. Für die Modellierung stehen Bausteine von Apparaten, Equipment und Prozessschritten zur Verfügung, die als Grundgerüst parameterabhängige Berechnungsvorschriften in Bezug auf Prozess, Betrieb und Apparate enthalten, siehe Kapitel 3.2. So sind beispielsweise für Rührwerksapparate (RWA) sämtliche Abmessungen der Behälter, als auch des Rührwerks und der Beheizungsrichtungen, entsprechend den Vorgaben in DIN-Normen und Literatur angelegt. Zusätzlich sind Betriebsdaten zu den Verbräuchen hinterlegt. Abhängig von den abzubildenden Produktionsprozessen müssen außerdem die prozessbezogenen Daten, wie eingesetzte Hilfsstoffe oder Temperaturrampen und Betriebsbedingungen, hinzugefügt werden. Die einzelnen Bausteine greifen auf in Excel hinterlegte Datenbanken zu Stoffdaten und Berechnungsvorschriften zurück, die nach Standardwerken der Verfahrenstechnik, wie z. B. dem VDI-Wärmeatlas [103], konzipiert sind. Aus der Modellierung werden die Parameter der Bausteine in die entsprechenden Datenbanken bzw. Makros übergeben, in diesen die Berechnungen durchgeführt und die so ermittelte Größen zurück in die Modellierung geschrieben. Die Bausteine überführen diese in Energie- und Ressourcenverbräuche. Die erhaltenen Inputs und Outputs zu den einzelnen Prozessschritten werden über die Ebenen bilanziert und anschließend für die ökologische Bewertung genutzt.

Die Struktur des 3-Ebenen-Modell und dessen Übertragung in die Stoffstromnetzmodellierung gestattet eine Abbildung von Produktionsprozessen zur Analyse und Bewertung in unterschiedlichen Detaillierungsgraden. Diese Struktur ermöglicht prospektiv die Einbindung von Daten aus Labor- und Technikumsversuchen [98, 61]. Diese Daten werden in die vorhandene Infrastruktur eingebunden und erleichtern somit den direkten Vergleich mit dem bestehenden Produktionsprozess bzw. dessen einzelnen GO. Vorteilhaft ist in diesem Zusammenhang, dass in dem Modell auch apparative Alternativen integriert

<sup>17</sup> Eine Übersicht über die einzelnen Elemente mit ihren Funktionen, die in der Software zur Verfügung stehen, ist im Anhang Tab. A1.1 dargestellt.

werden können, die bei der Entwicklung eines neuen Prozessdesigns Potentiale vermuten lassen. Die Einbeziehung der apparativen und betrieblichen Größen stellt sicher, dass ein Vergleich die Auswirkungen sowohl hinsichtlich Energie- und Ressourceneinsatz innerhalb der GO als auch über den gesamten Prozess und damit im Kontext der Betriebsnetze erfasst.

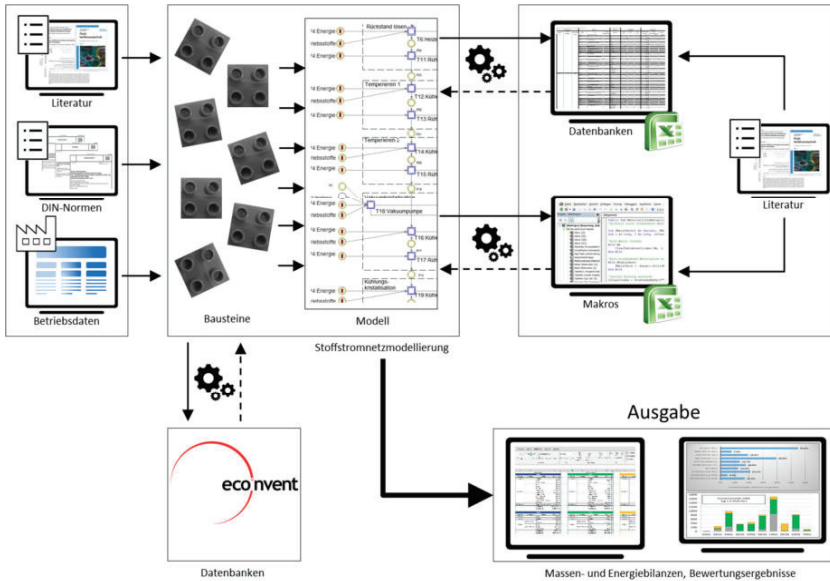


Abb. 3.2: Modellierungsumgebung bestehend aus Stoffstromnetzmodellierungssoftware (hier: umberto<sup>®</sup>), Datenbanken zu Charakterisierungsfaktoren als Basis zur ökologischen Bewertung (hier: ecoinvent) und zu Stoffeigenschaften sowie Makros zur Berechnung von Verbrauchsdaten (hier: excelbasiert); dünne, durchgezogene Pfeile symbolisieren die Eingabe von Informationen; dünne, gestrichelte Pfeile die Rückführung von Informationen in das Modell

Nachfolgend wird detaillierter auf die Ebene 1 eingegangen und die Abbildung der Grundoperationen näher beschrieben. Die Anwendung des 3-Ebenen-Modells hinsichtlich der Abbildung und Bewertung eines in einer Mehrzweckanlage betriebenen Produktionsprozesses wird in Kapitel 5 gezeigt.

### 3.2 Abbildung von Grundoperationen absatzweise betriebener Prozesse in Mehrzweckanlagen (MZA)

In der Modellebene 1 des in Kapitel 3.1 vorgestellten 3-Ebenen-Modells erfolgt die detaillierte Abbildung der einzelnen GO. Um diese im Hinblick des Energie- und Ressourcenbedarfs bis auf einzelne Apparate oder Prozessschritte aufgeschlüsselt analysieren zu können, ist eine hohe Auflösung in der Modellierung notwendig. Nur so kann sichergestellt werden, dass eine präzise Zuordnung zu einzelnen Prozessschritten oder Apparaten erfolgen kann.

Wie in Blickenstorfer [64] beschrieben, kann eine absatzweise Produktion sowohl aus einer technischen Sichtweise, die die Anlagenstruktur und apparative Ausstattung fokussiert, als auch prozessbezogener

Sichtweise, die die chemischen und physikalischen Vorgänge in den Mittelpunkt rückt, betrachtet werden. Beide Sichtweisen sind eng miteinander verwoben und werden im Betrieb über die Rezeptur miteinander verknüpft. [64] Diese Rezeptur dient in der Produktion als Arbeitsprotokoll zur Herstellung eines Produktes und wird für die chargenweise Produktion individuell für jedes Produkt erstellt. Die aufzuführenden Informationen sind in der DIN 61512-1 [104] geregelt. Auf Basis dieser Rezepturen können grundlegenden Prozessschritte, aus denen sich eine GO zusammensetzt, ermittelt werden [68]. Prozessschritte stellen die kleinste Einheit innerhalb einer GO dar und hängen u. a. von der Prozessführung und der apparativen Ausführung ab.

Dieser Zusammenhang ist in Wesche et al. [61] am Beispiel einer Destillation beschrieben, die in einer TAN mit einem Rührwerksapparat als Hauptapparat betrieben wird, siehe Abb. 3.3. Die apparative Ausführung der TAN umfasst einen mit flüssigem Wärmeträgermedium mantelbeheizten Rührkessel (B1), eine Pumpe (P1), ein Rührwerk mit Antrieb und Gleitringdichtungen (R1), einen Kondensator (WÜ1) und eine Vakuumpumpe (P1) sowie einen Destillatsammelbehälter (B2). In der einfachsten Ausführung kann die GO Destillation durch die Prozessschritte Befüllen, Rühren, Heizen, Verdampfen, Kondensieren, Kühlen und Evakuieren beschrieben werden. Zu diesen Prozessschritten sind die Inputs und Outputs zu erfassen. Nach der vorgeschlagenen Klassifizierung in Kapitel 2.3.2 könnten die Inputs hier beispielsweise Hilfsstoffe, elektrische Energie und Betriebsstoffe umfassen. Hilfsstoffe wären z. B. bei einer Schleppdestillation in Form eines oder mehrerer Lösemittel notwendig. Die elektrische Energie resultiert aus dem Betrieb des Rührers, des Verdichters sowie der Pumpen zur Beförderung der Wärmeträgermedien. Mögliche Betriebsstoffe sind z. B. das Wärmeträgermedium, Regelluft, Schutzgas zur Vermeidung von explosiven Atmosphären sowie Sperr- und Spülgas zum Betrieb der Gleitringdichtungen. Als Outputs sind neben der Abwärme und der Abluft auch die anfallenden Reststoffe, z. B. in Form des Destillats, und das Produktgemisch zu bilanzieren. [61]

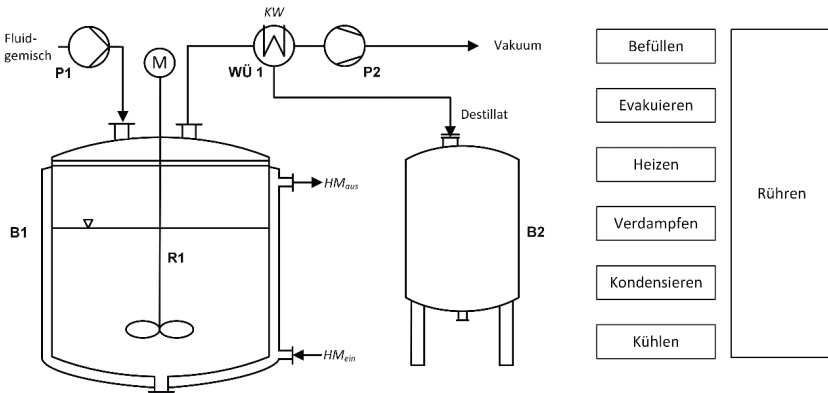


Abb. 3.3: Verfahrensfließbild einer Teilanlage mit einem Rührwerksbehälter als Hauptapparat nach [61], erweitert um Prozessschritte einer Batch-Destillation

Sind die eingesetzten Hilfsstoffmengen sowie daraus resultierende anfallende Reststoffmengen durch die Rezepturen und die Betriebsstoffmengen in Form von Lösemitteln für Reinigungsvorgänge oftmals durch die entsprechenden Protokolle vorgegeben, müssen hingegen die Verbräuche aus den Betriebsstoffschichten zur Wärmezufuhr und -abfuhr sowie an elektrischer Energie ermittelt werden. Dies kann sowohl durch die Aufnahme der Verbräuche direkt an den einzelnen Apparaten und Maschinen sowie daraus abgeleiteten Ansätzen [65, 70, 71] oder über empirische Gleichungen [64, 72] bzw. Berechnungsmodel-

len [67, 61, 68] erfolgen. Andererseits können die zentral erfassten Verbrauchsdaten für die Anlage aus dem Prozessleitsystem auf die Produktionsmenge, einzelnen Produkte oder Produktionsprozesse allokiert werden. Dieses Vorgehen, auch als Top-Down-Ansatz bezeichnet, eignet sich allerdings nicht für alle Anlagentypen, wie in Kapitel 2.4 ausgeführt. Daher ist der von Bieler et al. [67] für die Darstellung von Energiebedarfen postulierte Bottom-Up Ansatz notwendig, um Prozesse in dieser für die Spezialchemie und pharmazeutische Produktion typischen Anlagenform abzubilden. Sowohl Bieler et al. [67] als auch die darauf aufbauenden Ansätze wie [69, 68, 70, 59 oder 61] modellieren einzelne Prozessschritte, wobei typische Parameter aus den Rezepturen als Basis herangezogen werden. Die Ermittlung von theoretischen Energiebedarfen erfolgt basierend auf Energiebilanzen einzelner Prozessschritte mittels Berechnung der benötigten Wärmemengen unter Berücksichtigung der vorliegenden Wärmeträgermedien und Apparatmaterialien. Wesche et al. [61] schlagen vor, dass bei Produktionsprozessen in Mehrproduktanlagen bei solchen Betrachtungen die Verbräuche und Aufwendungen in Form von elektrischer Energie, Betriebsstoffen und Emissionen, die von zentralen Anlagenbestandteilen verursacht werden, rechnerisch ermittelt und den einzelnen Produktionsprozessen anteilig zuzuschlagen sind. Dies wird später ausführlicher aufgezeigt.

Ein Bottom-Up Ansatz basierend auf Prozessschritten zur Abbildung von GO kann, wie in Wesche et al. [61] gezeigt, in die SSNM übertragen werden. In Anbetracht des zeitlichen Aufwandes zur Modellierung einzelner GO können Modellbausteine zu den einzelnen Prozessschritten [59, 61] und TAn [61] deren Abbildung unterstützen. In den Bausteinen sind Grundgerüste für die einzelnen Prozessschritte und TAn hinterlegt, die durch die Eingabe von Parametern individuell auf die einzelnen Produktionsprozesse angepasst werden können. Eine mögliche Alternative stellt die Nutzung von Realdaten direkt aus der Produktion dar. Allerdings bedeutet dies für Produktionsprozesse in Mehrprodukt- oder Mehrzweckanlagen, in denen Produktionen parallel in verschiedensten Apparaten betrieben werden, eine sehr dichte Datenerfassung direkt an den einzelnen Hauptapparaten [72]. Dies ist i. d. R. nur durch Nachrüsten von Messtechnik möglich und mit finanziellem Aufwand sowie Eingriffen in der Produktion verbunden. Daher ist diese Möglichkeit meist nur bei der Planung neuer Produktionsstätten bzw. Umbauten bestehender Produktionen gegeben.

In dieser Arbeit wird das Bausteinprinzip im SSNM-Tool umberto<sup>®</sup> [107] realisiert. Für die Modellierung stehen verschiedene Bausteintypen zur Verfügung. Dazu zählen zum einen Bausteine für die typischen Prozessschritte in Batchprozessen, u. a. Feststoffeintragung, Heizen, Kühlen, Rühren, Vakuumherzeugung, Spülen, Pumpen, Verdampfen, Kondensieren, Trocknen, Inertisieren und Reinigen. Diese dienen der Ermittlung der Verbrauchsdaten, bezogen auf den Produktionsprozess. Die Bausteine sind jeweils durch kleinere Stoffstromnetzmodelle abgebildet, die mittels Parametereingaben an verschiedene Grundoperationen unterschiedlicher Prozesse angepasst werden. Die Parameterangaben umfassen dabei sowohl Informationen zum Prozess als auch apparative und betriebliche Aspekte. In der Tab. 3.1 sind auszugsweise Parameter für den Prozessschritt Kühlen bei der Trocknung im Überblick zusammengestellt. Die Integration von prozesslichen, betrieblichen und apparativen Parametern in dem Baustein stellt die Erfassung und Berücksichtigung verschiedener Einflussfaktoren auf die Verbräuche sicher, siehe dazu Kapitel 3.3.

Die hinterlegten Berechnungs- oder Zuordnungsvorschriften müssen ergänzt werden durch i. d. R. bekannte Parameter. So werden beispielsweise auf Basis des Nennvolumens (apparatebezogener Parameter) in dem Baustein verschiedene für die Ermittlung von Verbrauchsdaten benötigte Größen berechnet bzw. festgelegt:

- Die Wandstärken des Apparates (hier Trockner) basierend auf Angaben aus Dokumentationsunterlagen
- Die Wandstärken der Halbrohrschlangen (HRS) basierend auf der DIN 28128 [112] sowie unternehmensinterne Ausführungen zur Technical Good Practise (TPG)
- Der Außendurchmesser der HRS nach DIN 28128

Dieses Werk ist copyrightgeschützt und darf in keiner Form vervielfältigt werden noch an Dritte weitergegeben werden.



### 3.2 Abbildung von Grundoperationen absatzweise betriebener Prozesse in Mehrzweckanlagen (MZA)

- Der Innendurchmesser des Apparats mittels Regression, basierend auf Herstellerangaben
- Die Höhe des Apparats mittels Regression basierend auf Herstellerangaben
- Die Masse des Apparats aus den ermittelten Angaben (Tiefe, Innendurchmesser, Wandstärke, Dichte)
- Die Masse der HRS mittels Regressionen, basierend auf Angaben aus DIN 28128 und TPG, intern
- Das Volumen an Wärmeträgermedium im Heiz-/Kühlkreislauf des Apparates mittels Berechnungen, basierend auf Abmessungen.

Tab. 3.1: Auszug von Parametern, die in dem Baustein Kühlen (Trocknen) hinterlegt sind.

Prozessschritt Kühlen (Trocknen)				
	zu hinterlegende Parameter	Einheit	im Baustein ermittelte Parameter	Einheit
Prozessbezogen	Anzahl Komponenten (bei Gemischen)	[-]	Dauer Temperierung	[min]
	Dauer Temperierung	[min]	Füllstandhöhe Start Trocknungsvorgang	[m]
	Füllstand nach Beladung	[%]	Dichte Stoff(e)	[kg/m <sup>3</sup> ]
	Menge Stoff(e)	[kg]	Spezifische Wärmekapazität Stoff(e)	[J/kgK]
	Stoff(e)	[-]	Gesamtmenge Stoffe	[kg]
	Temperaturdifferenz BS und Produkt, max.	[K]		
	Temperaturen Stoff(e) (Start und Ende)	[K]		
	Temperaturgradient	[K/min]		
Wärmeübergangskoeffizienten Produkt	[W/m <sup>2</sup> K]			
Apparatebezogen	Behältermaterial	[-]	Außendurchmesser HRS	[m]
	Dichten Material / Beschichtung	[kg/m <sup>3</sup> ]	Benetzte Oberfläche Start und Ende	[m <sup>2</sup> ]
	Förderleistungen Pumpe Wärmeträgerkreislauf (sek), max	[m <sup>3</sup> /h]	Bogenlänge Start	[m]
	Nennvolumen Behälter	[m <sup>3</sup> ]	Innendurchmesser	[m]
	Spezifische Wärmekapazitäten Material/ Beschichtung	[J/kgK]	Masse Apparat	[kg]
	Stärke der Dämmung	[m]	Menge Wärmeträgermedium im Heizkreislauf am Apparat	[kg]
	Wärmeleitfähigkeiten Material/ Beschichtung	[W/mK]	Mittelpunktwinkel Start	[RAD]
			Höhe Apparat (Standard DIN Apparat)	[m]
			Wandstärke Apparat	[m]
			Wandstärke HRS	[m]
Betriebsbezogen	Art Betriebsstoff	[-]	Dichten Wärmeträgermedien	[kg/m <sup>3</sup> ]
	Temperaturen Wärmeträgerschienen	[K]	Menge Wärmeträgermedien aus verschiedenen Temperaturniveaus	[kg]
	Umschalttemperaturen zwischen Temperaturschienen	[K]	Spezifische Wärmekapazität Wärmeträgermedien	[J/kgK]
	Wärmeübergangskoeffizienten BS, Luft Umgebung	[W/m <sup>2</sup> K]	Wärmemengen aus verschiedenen Temperaturschienen	[kJ]

Die zu hinterlegenden *prozessbezogenen* Parameter für den Baustein Kühlen (Trocknen) sind zum größten Teil Angaben, die den Rezepturen entnommen werden können. Die Dauer des Kühlvorgangs kann in diesem Zusammenhang individuell angegeben werden (um z. B. Haltezeiten zu erfassen) oder ermittelt sich aus der Start- und Endtemperatur sowie der angegebenen Temperaturrampe. Die Füllstandhöhe ist in diesem Baustein einzugeben, um die Benetzungsfläche des Trockners bei Start des Bausteins Kühlen zu ermitteln. In dem Baustein ist eine Verdoppelung des Füllstands am Ende des Kühlens angenommen – ein Wert, der auf Abschätzungen von Experten aus dem Produktionsbetrieb resultiert. Durch die Nutzung eines SSNM-Tools werden die Informationen zu den Stoffen innerhalb des Modells weitergeleitet, sodass die Bausteine diese Information direkt aus diesen Angaben erfassen können; gleiches gilt für die Anzahl

der Stoffe bei Stoffgemischen. Da die Bausteine für verschiedenste Prozesse zur Verfügung stehen, erfassen diese lediglich Menge und Namen der Stoffe. Sämtliche benötigten physikalischen Stoffeigenschaften werden extern, wie in Abb. 3.2 dargestellt, aus Datenbanken entnommen bzw. aus in Excel-Makros hinterlegten Berechnungsvorschriften ermittelt.

Zu den hinterlegten *apparatebezogenen* Parametern in diesem Baustein zählen vorrangig Angaben zu Materialeigenschaften für eine begrenzte Anzahl an Materialien. Die Materialarten sind orientiert an typischen Werkstoffen wie z. B. Blasstahl, welcher i. d. R. beschichtet u. a. mit Emaille eingesetzt wird, Edelstahl als Standardmaterial oder C22 (Hastelloy®) als Beispiel für einen Sonderwerkstoff. Neben den Materialeigenschaften ist das Nennvolumen des Apparates, in dem der Prozessschritt betrieben wird, anzugeben. Wie oben gezeigt, werden auf Basis dieser Angabe eine Vielzahl von Abmessungen und Gewichtangaben berechnet bzw. festgelegt, die sowohl zur Ermittlung von Energieaufwendungen als auch Verlusten und somit der Verbrauchsdaten nach dem Bottom-Up Ansatz notwendig sind. Ebenfalls als apparatebezogener Parameter wird die Förderleistung der Pumpe erfasst, die das Wärmeträgermedium in dem am Trockner befindlichen Heiz-/Kühlkreislauf umwälzt.

Die *betriebsbezogenen* Parameter repräsentieren vorrangig die Temperaturschienen sowie das Strömungsverhalten der Temperiermedien in den Heiz-/Kühlkreisläufen der Apparate und Maschinen. In der Regel befinden sich in den Anlagen Wärmeträgermedien auf verschiedenen Temperaturniveaus, wie z. B. Dampf, Sole, Thermalöl oder Wasser. Zur Ermittlung der Verbrauchsdaten sind in diesem Zusammenhang vor allem die physikalischen Eigenschaften relevant, wie z. B. spezifische Wärmeleitfähigkeit und Dichte. Die Apparate können sowohl direkt als auch indirekt beheizt sein. In vielen Anlagen erfolgt die indirekte Beheizung nicht unmittelbar aus den Wärmeträgerschienen (primär), sondern durch Kreislaufsysteme direkt an den Apparaten (sekundär), die aus den primären Schienen gespeist bzw. aufbereitet werden. Im Hinblick auf die Verbrauchsdaten bedeutet dies, dass nicht nur die übertragenden Wärmemengen für einen Prozessschritt wie Heizen, Verdampfen, Kondensieren oder Kühlen berücksichtigt werden müssen, sondern auch die Aufwendungen in Form von elektrischer Energie, die mit dem Umwälzen der Wärmeträgermedien verbunden sind sowie der Aufwendungen zu deren Aufbereitung einhergehen. Die in dieser Arbeit entwickelten Bausteine sind orientiert an einer typischen Mehrzweckanlage im Batchbetrieb, in der das Heiz-/Kühlsystem mit Thermalöl betrieben wird. Der einzelne Verbraucher ist mit einem Sekundärkreislaufsystem ausgestattet, welches über die Primärkreislaufsysteme gespeist wird. So können die einzelnen Verbraucher in einem vorgegebenen Temperaturfenster individuell mit den erforderlichen Temperaturen beheizt bzw. gekühlt werden. In diesem Zusammenhang spielt der Parameter Umschalttemperatur zwischen Temperaturschienen eine nicht zu vernachlässigende Rolle, da dieser angibt, ab welcher Vorlauftemperatur am Apparat eine bestimmte Temperaturschiene zur Temperierung eingesetzt wird. Um diese Betriebsführung zu berücksichtigen, sind die Berechnungsvorschriften in den Bausteinen als Funktionen von Stellgrößen beschrieben.

Die Eingabe der Temperaturregung (prozessbezogener Parameter) dient in dem hier gezeigten Baustein „Kühlen“ als Hauptstellgröße für den Verlauf in der Temperaturregelung. In den Bausteinen ist eine Regelungsstrategie aus der Produktion der betrachteten Anlage hinterlegt, um die Temperierbedingungen möglichst real abzubilden. In diesem Zusammenhang sind dies:

- der prozessbezogene Parameter *Temperaturdifferenz BS und Produkt, max*, der die maximale Temperaturdifferenz zwischen Produkt- und Betriebsstoffseite repräsentiert sowie
- der betriebsbezogenen Parameter *Temperaturen Wärmeträgerschienen*, der die Temperatur der Betriebsstoffschienen darstellt und
- der berechnete Wärmedurchgang durch die Wand, der rechnerisch unter Berücksichtigung von Materialeigenschaften (wie z. B. *Wärmeleitfähigkeit*) und Transportgrößen (wie z. B. *Wärmeübergangskoeffizienten*) der Fluide ermittelt wird.

Durch die Verknüpfung der verschiedenen Parameter können Verbrauchsdaten für die Temperierung unter Berücksichtigung von Rührern und Pumpen sowie auftretenden Verlusten (Konvektion, Dissipation, etc.), orientiert an der Realität, erfasst werden. Nicht berücksichtigt werden Regelungsschwankungen, die bei Batchprozessen auftreten und im Extremfall ein gegenläufiges Öffnen der heißen und kalten Schienen bedeuten. Dazu wäre eine Erweiterung der Bausteine um Ansätze der dynamischen Modellierung auf Basis von Echtzeitdaten denkbar [72, 70] unter der Voraussetzung, dass sowohl an den einzelnen Verbrauchern als auch Betriebsschienen entsprechende Erfassungsgeräte vorhanden sind, um die entsprechenden Daten, wie z. B. Temperaturen oder Volumenströme, aufnehmen zu können.

Die Bausteine bieten den Vorteil, Modifikationen der einzelnen Prozesse zu berücksichtigen. Dazu zählen u. a. die Variation von Prozessparametern wie Temperaturen und Druck, apparative Änderungen z. B. verursacht durch die Belegungsplanung oder Veränderungen von Umgebungsbedingungen. Ein Teil der Parameter werden in Excel-Tabellen geschrieben und Makros zur Berechnung von Verbrauchsdaten oder Ermittlung von Stoffdaten angestoßen. Die erhaltenen Daten werden anschließend wieder in die Bausteine geschrieben und dort verwendet. Die Werkzeugumgebung ist in Abb. 3.2 im Detail dargestellt. Bei einer ungenügenden Datenlage können zunächst Standardwerte oder Abschätzungen eingetragen werden, deren Einfluss auf die Verbrauchsdaten bzw. der ökologischen Bewertung durch Sensitivitätsstudien abgesichert werden sollte. Die Parametrisierung ermöglicht außerdem in bestimmtem Umfang die Berücksichtigung von Abweichungen und Inkonsistenzen von Batch- zu Batchansatz, sowohl allgemein für Prozesse (z. B. Einsatzmengen an Hilfsstoffen oder Prozessbedingungen) als auch spezifisch für Mehrzweckanlagen (z. B. Betriebsdauer einzelner Grundoperationen, Belegung unterschiedlicher Apparate). Dies ermöglicht einen Vergleich einzelner Batchansätze eines Produktes, sodass Abweichungen und Auswirkungen untersucht sowie gezielt Verbesserungsvorschläge abgeleitet werden können. Die Erfassung sämtlicher Auswirkungen von Verbesserungsansätzen einzelner Prozesse in einer Mehrzweckanlage, u. a. auf andere Produktionsprozesse, ist mit dieser Art der Bausteine bisher nicht möglich, da diese eine dynamische Abhängigkeit nicht abbilden können. Um dies zu erreichen sowie die Integration von Echtzeitdaten zu ermöglichen, sind Erweiterung bzw. die Einbindung anderer Tools, u. a. zur Produktionsplanung, notwendig.

In Abb. 3.4 ist der Aufbau des Bausteins Kühlen (Trocknen) in dem SSNM-Tool gezeigt. Neben dem Prozessschritt Kühlen sind in diesem zwei zusätzliche Bausteine hinterlegt, die das Umwälzen der verwendeten Betriebsstoffe berücksichtigen – für den Sekundärkreislauf direkt am Apparat und für die in der Anlage zentral verlaufenden Primärkreisläufe, die die verschiedenen Temperaturschienen bereitstellen, aus denen die an den Verbrauchern benötigten Vorlauftemperaturen gemischt werden.

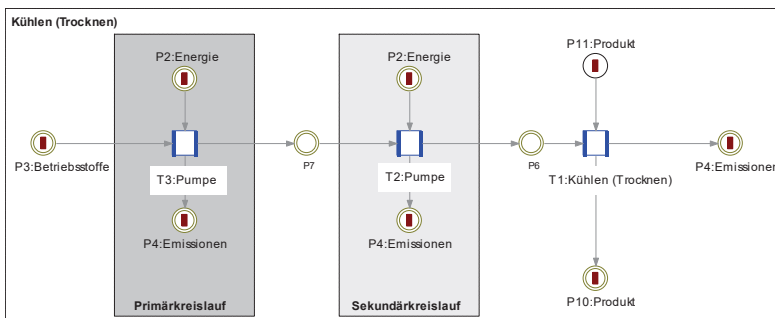


Abb. 3.4: Bsp. Darstellung des Bausteins Kühlen (Trocknen) als Submodell in der Stoffstromnetzmodellierungssoftware umberto® (Version 5.6)

Der Baustein Kühlen (Trocknen) ist in der Modellierung als Subnetz ausgeführt, in dem neben dem eigentlichen Prozessschritt *Kühlen (Trocknen)* (T1) noch zwei Transitionen zur Ermittlung der elektrischen Verbräuche der *Pumpen* im Sekundärkreislauf (T2) und Primärkreislauf (T3) integriert sind. Die Verbräuche der Pumpen werden anteilig in Abhängigkeit der Grundoperationsdauer ermittelt. In der Output-Stelle *Emissionen* wird die bei den Pumpvorgängen anfallende Abwärme erfasst, die keine nutzbare thermische Energie darstellt, sondern lediglich der Bilanzierung dient.

Die Integration des Primärkreislaufes ermöglicht die Erfassung einer zentralen Anlagenkomponente auf Basis der Verbräuche eines einzelnen Prozessschrittes. Der Baustein ermittelt die Wärme- und Betriebsstoffmengen aus den verschiedenen Temperaturschienen, aus denen die umzuwälzenden Massen im Primärkreislauf entnommen werden. Der dazu aufgewandte elektrische Strom wird dem Prozessschritt direkt zugeordnet.

In den in dieser Arbeit erstellten Bausteinen werden übergeordnete und damit indirekte Verbräuche integriert. Dies erfolgt zum einen, wie bereits beschrieben, in Abhängigkeit von verbrauchten Betriebsstoffmengen und zum anderen über die Betriebsdauer. Die indirekten Aufwendungen, verursacht durch den Basisbetrieb der Produktionsanlagen, umfassen z. B. den Betrieb von Vakuumbahnhöfen, die Versorgungsnetze innerhalb der Anlage (Primärkreislauf) oder Sperr- und Spülgasbedarfe. Dies sind Verbräuche, die aus der fortlaufenden Betriebsbereitschaft der Mehrprodukt- bzw. Mehrzweckanlage resultieren. In den Arbeiten verschiedener Autoren wird dem Basisbetrieb ein großer Anteil an den Gesamtverbräuchen zugeordnet. So zeigen die Untersuchungen von Blickenstorfer [64] für Dampf und elektrische Energie Anteile von 53 % bzw. 37 % am Gesamtverbrauch der Mehrprodukt- bzw. Mehrzweckanlagen. Auch die Analysen von Müller et al. [66] weisen hohe Verbräuche verursacht durch den Basisbetrieb aus. Der Betrieb der zentralen Anlagenbestandteile kann in der direkten Prozessbewertung daher nicht vernachlässigt werden. In den vorgestellten Bottom-Up-Ansätzen in Kapitel 2.4 erfolgt allerdings keine direkte Zuordnung dieser Verbräuche zu den einzelnen Prozessen, die Erfassung erfolgt in diesem Zusammenhang auf Anlagenebene [67, 58]. Um die Basisverbräuche in dieser Modellierung zumindest anteilig zu erfassen und den einzelnen Prozessen direkt zuzuordnen, stehen für die Modellierung neben den Bausteinen für die Prozessschritte auch Bausteine zu den einzelnen TAN zur Verfügung, die Apparate und Equipment abbilden. Dieser Bausteintyp bildet die Verbräuche ab, die der Betrieb der TAN verursacht. Dazu zählen im Batchbetrieb sowohl vorbereitende und nachbereitende Arbeitsschritte, wie Inertisieren und Reinigen, als auch der oben beschriebene Basisbetrieb. Für die Modellierung stehen Bausteingerüste für verschiedene TAN zur Verfügung, die mit folgenden Hauptapparaten ausgestattet sind: Rührwerksapparat, Chromatographiesäule, Nutsche und Trockner. Die anteiligen Verbräuche der Anlageninfrastruktur (Basisbetrieb) werden über die Betriebszeiträume der einzelnen GO in den TAN, als Summe aller Prozessschritte der GO oder durch hinterlegte Durchschnittszeiten je GO aus dem Datenerfassungssystem der Anlage erfasst. Dies ermöglicht im Vergleich zu anderen Ansätzen auch eine Zuordnung der zentralen Verbräuche auf Basis der ermittelten GO-Dauer bei Berücksichtigung der individuellen Prozess- und Apparateparameter (wie oben beschrieben) bzw. auf Basis von Daten vorhergegangener Produktionen.

Durch die Erweiterung um diverse prozess-, betriebs- und apparatebezogene Parameter kann mit dem hier vorgestellten Modellierungsansatz des 3-Ebenen-Modells der Verbrauch von Produktionsprozessen betrieben in Mehrprodukt- bzw. Mehrzweckanlagen realitätsnäher als bei anderen Bottom-Up-Ansätzen abgeschätzt werden. Außerdem wird mit den Bausteinen für die verschiedenen Teilanlagentypen sowie durch die Integration von zentralem Equipment in den Bausteinen für einzelne Prozessschritte, wie z. B. den Pumpen in den Primärkreisläufen, ein Anteil der übergeordneten Verbräuche erfasst. Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass dieser Ansatz nicht allumfassend die übergeordneten Verbräuche darstellen kann. Um dies zu realisieren, sind weitere Untersuchungen und Analysen notwendig, mit Augenmerk auf Zusammenhänge zwischen den Produktionsprozessen und dem allgemeinen Anlagenbetrieb.

### 3.3 Einflussgrößen bei der Ermittlung von Verbrauchsdaten

In den Bausteinen sind, wie im vorangegangenen Kapitel beschrieben, eine Vielzahl von Parametern hinterlegt, um sowohl apparate-, als auch betriebs- und prozessbezogene Größen bei der Verbrauchsdatenermittlung zu berücksichtigen. Nachfolgend sind im Rahmen einer Sensitivitätsstudie für einen einzelnen Prozessschritt verschiedene Parameter variiert und die daraus resultierenden Unterschiede in den Verbrauchsdaten aufgezeigt. In Kapitel 5.6.6 werden die damit verbundenen ökologischen Auswirkungen dargestellt und diskutiert.

Verschiedene Bottom-Up Ansätze zur Ermittlung von Verbrauchsdaten beziehen apparative Parameter, wie Nennvolumen (NV), Wandstärken, Füllstandshöhen, Materialien und damit verknüpfte physikalische Eigenschaften, wie z. B. Wärmeleitfähigkeit und -kapazität, mit ein und berechnen anhand dieser Angaben Verluste, die durch das Aufheizen der Stoffe und Dissipation über die Oberflächen auftreten [67, 70, 61]. Der in den Untersuchungen genutzte Baustein ähnelt im Aufbau dem im vorangegangenen Kapitel beschriebenen Baustein Kühlen (Trocknen) und bezieht diverse Parameter aus dem Produktionskontext mit ein, sodass eine möglichst realitätsnahe Ermittlung an Verbräuchen erreicht wird. Ziel dieser Studie ist es, einen ersten Eindruck bzgl. der Einflüsse zu erhalten, die durch apparative oder betriebliche Aspekte sowie dem Produktionsprozess selbst bedingt sind. Die Verfahrensaufgabe in der Sensitivitätsstudie umfasst für den Prozessschritt Heizen das Erwärmen von 900 kg des Lösemittels n-Heptan von 20 °C auf 80 °C in einer TAn einer MZA. Dabei soll der energetische Aufwand bezogen auf die zu erbringende Wärmemenge ermittelt werden. In der Tab. 3.2 sind die Parameter, die bei der Berechnung variiert werden, aufgeführt. Ebenfalls dargestellt sind weitere Parameter, die konstant gehalten werden.

Tab. 3.2: Übersicht über Parameter zugeordnet zu den Einflussgrößen Apparat, Betrieb und Prozess, die in der Sensitivitätsstudie variiert bzw. konstant gehalten werden

Parameter	Apparat	Betrieb	Prozess
<i>Variabel</i>	<b>Material</b> ED (Edelstahl), St/em (Stahl, email- liert), C22 (Hastelloy)	<b>T-Niveau Schienen</b> Thermalöl 130 °C Thermalöl 190 °C	<b>T-Rampe</b> 0,5; 1,0; 1,5 K/min
	<b>NV</b> 1,0; 1,6; 4,0 m <sup>3</sup>		
<i>Konstant</i>	<b>WÜ-Konzept</b> Halbrohrschlangen	<b>Förderleistung WT</b> Pumpen = max	<b>Druck</b> 1,013 bar(a)
	<b>Dämmung</b>	<b><math>\Delta T_{\max}</math> BS und Pr</b> $\Delta T_{\max} = 50$ K	
	<b>Rührertyp</b> Propellerrührer	<b>T<sub>Umgebung</sub></b> <b>T<sub>Umschalt</sub></b>	

In Bezug auf die apparativen Einflüsse werden die beiden Größen Nennvolumen und Material untersucht. Das Nennvolumen der Hauptapparate wird mit 1,0, 1,6 und 4,0 m<sup>3</sup> variiert. Außerdem werden neben den Standardapparaten aus Edelstahl, auch Stahlapparate mit Beschichtung (hier: Emaille) sowie Sonderwerkstoffe (hier: Hastelloy® bzw. C22) untersucht. Für diese Fallstudie wird angenommen, dass der Prozessschritt Heizen in einer RWA betrieben wird, die mit Halbrohrschlangen ausgestattet ist. Auch das Material für die Dämmung und dessen Stärke mit 0,1 m werden als konstant angesehen. In der Studie werden die daraus resultierenden Unterschiede bzgl. der aufzuwendenden Energiemengen ermittelt.

Zur Untersuchung von betrieblichen Parametern werden zwei unterschiedliche Temperaturschienen (T-Schienen) betrachtet. Diese unterscheiden sich lediglich in ihrem Temperaturniveau, nicht in der Art des Betriebsstoffes, der hier mit einem Thermalöl als konstant untergestellt wird. Angenommen wird ein Temperaturunterschied von 60 K, wobei die eine Schiene 130 °C und die andere 190 °C bereitstellt. Nicht



variiert werden betriebliche Parameter wie die maximale Temperaturdifferenz  $\Delta T_{\max}$  zwischen der Betriebsstoff- (BS) und der Produktseite (Pr), die auf 50 K festgesetzt ist. Auch gelten für die jeweiligen Temperaturschienen konstante Umschalttemperaturen von 0 °C, bei denen die Heizschienen zugeschaltet werden, die im eigentlichen Betrieb abhängig von der gewählten Regelung sind. Für die hier durchgeführte Untersuchung ist somit nur die Heischiene angesprochen, da davon ausgegangen wird, dass die Temperatur im Sekundärkreislauf, also direkt an der TAN, der Umgebungstemperatur entspricht. Auerdem wird die Frderleistung der Pumpen in den Wrmetrgerkreislufen (sekundr: 5,5 kW,  $\eta=0,75$ ; primr: 50 kW,  $\eta=0,75$ ) als konstant angenommen. Die vernderte Prozessbedingung betrachtet die vorgegebene Temperaturrampe (T-Rampe), die fr die Untersuchung zwischen 0,5 K/min, 1,0 K/min und 1,5 K/min variiert wird. Als konstanter Parameter wird der Druck im System mit 1,013 bar(a) angenommen<sup>18</sup>.

In der nachfolgenden Tab. 3.3 ist die daraus resultierende Untersuchungsmatrix dargestellt. In Summe werden 54 verschiedene Konstellationen betrachtet, die sich aus je vier verschiedenen Parametern Material, Nennvolumen, T-Niveau, T-Rampe zusammensetzen. Die Bezeichnung der einzelnen Untersuchungen spiegelt diese Sortierung wider. So steht z. B. die Untersuchung ED-1,0-190-0,5 fr die Konstellation: RWA aus Edelstahl mit einem Nennvolumen von 1,0 m<sup>3</sup>, Beheizung mittels Thermall auf dem Temperaturniveau 190 °C bei einer Temperaturrampe von 0,5 K/min.

Die minimal aufzubringende Wrmemenge  $Q$  um die Verfahrensaufgabe des Prozessschrittes Heizen zu erfllen, berechnet sich nach der folgenden Formel, mit der Menge  $m$  des Lsemittels, dessen zwischen Start- und Endtemperatur gemittelte Wrmekapazitt  $c_p$  und der entsprechenden Temperaturdifferenz  $\Delta T$ .

$$Q = m \cdot c_p \cdot \Delta T \tag{Gl. 3.1}$$

Die fr diese Untersuchung bentigten Stoffdaten fr n-Heptan werden dem VDI-Wrmeatlas [103] entnommen. Fr n-Heptan betragen die  $c_p$ -Werte 2.223 J/kgK<sub>T=20 °C</sub> und 2.455 J/kgK<sub>T=80 °C</sub>. Somit ergibt sich bei einer Menge von 900 kg und einer Temperaturdifferenz von 60 K eine Wrmemenge von 126,3 MJ. Diese dient als Benchmark, gegen den die 54 Parameterkonstellationen verglichen werden. Um den bentigten Wrmebedarf zu ermitteln, wird der Prozessschritt mittels des Bausteins Heizen, der fr die Modellierung erstellt wurde, abgebildet. In diesem Baustein knnen, wie im vorangegangenen Kapitel 3.2 beschrieben, die verschiedenen apparativen, betrieblichen und prozesslichen Parameter hinterlegt werden.

Tab. 3.3: Untersuchungsmatrix der Sensitivittsstudie

		Apparat									
		Material Nennvolumen [m <sup>3</sup> ]	ED 1	ED 1,6	ED 4	St/em 1	St/em 1,6	St/em 4	C22 1	C22 1,6	C22 4
Betrieb	T-Niveau [°C]	190	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
		190	1	1	1	1	1	1	1	1	1
		190	1,5	1,5	1,5	1,5	1,5	1,5	1,5	1,5	1,5
		130	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
		130	1	1	1	1	1	1	1	1	1
		130	1,5	1,5	1,5	1,5	1,5	1,5	1,5	1,5	1,5
Prozess - Temperaturrampen [K/min]											

ED - Edelstahl; St/em - emaillierter Stahl; C22 - Hastelloy

<sup>18</sup> Anmerkung: Im Betrieb werden Apparate, wenn nicht im Vakuum, bei leichtem berdruck betrieben. Dies wird hier nicht bercksichtigt.

Die Berechnung in den Bausteinen erfolgt sowohl basierend auf Stoffdaten aus dem VDI-Wärmeatlas für das Thermalöl sowie Materialeigenschaften, wie Dichte, Wärmekapazität und Wärmeleitfähigkeit, aus Werkstoffdatenblättern als auch Daten zum Wärmeübergang auf der Betriebsstoff- und Produktseite. Für letztgenanntes werden für die flüssige Phase 1.500 W/m<sup>2</sup>K und für die gasförmige Phase über dem Lösemittel 20 W/m<sup>2</sup>K angenommen [103]. Zur Ermittlung der Masse werden die Abmessungen der RWA in Abhängigkeit vom NV, die in der DIN 28136 [114] angegeben sind, herangezogen sowie Angaben zu den Wandstärken den vorliegenden Projektierungsunterlagen zu der in Kapitel 4.1 beschriebenen MZA entnommen. Die Daten zu den Materialeigenschaften entstammen typischen Werkstoffdatenblättern, siehe z. B. ThyssenKrupp. In Tab. 3.4 sind relevante Angaben bzw. Unterschiede der Apparate aufgeführt. Dargestellt sind in diesem Zusammenhang die Wärmeleitfähigkeit, die eine Einflussgröße auf den Wärmeeintrag repräsentiert, sowie die Wärmekapazität, die das Aufheizen der Apparatmaterialien bedingt.

Tab. 3.4: Überblick zu den Ausführungen und Materialeigenschaften der untersuchten RWA

RWA	Edelstahl	emailierter Stahl	Hastelloy
Wandstärken [mm]			
NV 1,0 m <sup>3</sup>	6	16 (+ 1,4 Emaille)	6
NV 1,6 m <sup>3</sup>	7	18 (+ 1,4 Emaille)	7
NV 4,0 m <sup>3</sup>	8	20 (+ 1,4 Emaille)	8
Wärmeleitfähigkeit [W/mK]	15	54 Emaille: 1,153	9,2
Wärmekapazität [J/kgK]	500	461 Emaille: 820	427
Dichte [kg/m <sup>3</sup> ]	7980	7850 Emaille: 2500	8890

Die Berücksichtigung der verbauten Masse, die ebenfalls erwärmt wird, erfolgt entsprechend der Gl. 3.1. Dabei errechnet sich die Masse der Materialien basierend auf Angaben zu den Standardabmessungen der RWA nach Norm und den daraus ermittelbaren Materialvolumen sowie den zu den Materialien gehörigen Dichten. Die Daten sind in Tab. 3.4 aufgeführt und ebenfalls Werkstoffdatenblätter entnommen. Die Dämmung der RWA wird mit einer Stärke von 0,1 m angenommen und einer Wärmeleitfähigkeit von 0,044 W/mK.

Ebenfalls relevant sind die in der Gl. 3.2 angegebenen Größen zum Wärmedurchgangskoeffizienten  $k$ , die einen unmittelbaren Einfluss auf den Wärmeübergang von der Betriebsstoffseite auf das Produktgemisch haben. Dazu gehören neben der spezifischen Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$ , die Wandstärke  $s$  sowie die Wärmeübergangskoeffizienten innen  $\alpha_i$  und außen  $\alpha_a$ , die für diese Untersuchungen mit je 1.500 W/m<sup>2</sup>K angenommen werden. Ebenfalls angenommen wird sowohl betriebs- als auch produktseitig eine ideale Durchmischung unabhängig vom NV der Apparate.

$$\frac{1}{k} = \frac{1}{\alpha_i} + \frac{s}{\lambda} + \frac{1}{\alpha_a} \quad (\text{Gl. 3.2})$$

Beim Vergleich der Materialien heben sich Vor- und Nachteile aufgrund der niedrigen Wärmekapazität von Hastelloy und der schlechteren Wärmeleitfähigkeit von Edelstahl auf und weisen mit einer Abweichung von 0,5...1 %-Punkten über die verschiedenen NV ein sehr ähnliches Ergebnis auf. Die Wärmeleitfähigkeit des emailierten Stahls ergibt im Mittel der beiden Materialien unter Berücksichtigung der Wandstärken bzw. Schichtdicken ca. 50 W/mK und liegt damit deutlich höher als die der beiden anderen untersuchten Materialien. Der Wärmeeintrag ist daher als besser einzustufen. Die Wärmekapazität beträgt im Mittel 484 J/kgK und ordnet sich zwischen Edelstahl und Hastelloy ein. Die nachfolgende Abb. 3.5 zeigt ein Netzdiagramm, in dem die Ergebnisse der 54 Untersuchungen, in Bezug auf die jeweils benötigten Wärmemengen, im Überblick zusammengefasst sind. Dargestellt sind die prozentualen Abweichun-

gen zum Benchmark, repräsentiert durch den Mittelpunkt. Die Wärmemenge des Benchmarks beträgt, wie bereits beschrieben, 126.289 kJ.

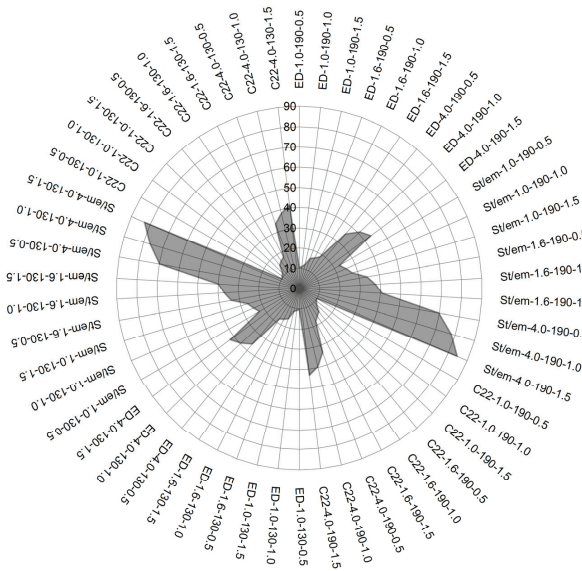


Abb. 3.5: Darstellung der prozentualen Abweichung [%] der benötigten Wärmemengen für das Aufheizen von 900 kg n-Heptan im Vergleich zum idealen Benchmark (Mittelpunkt) für 54 Parameterkonstellationen

Ein Vergleich der Verbräuche von Apparaten aus dem gleichen Material mit identischer T-Rampe und genutzter Temperaturschiene weisen bei Variation des Nennvolumens einen nahezu linearen Zusammenhang zwischen den abweichenden Wärmemengen auf, vgl. dazu Abb. 3.6. Dieses Diagramm zeigt die Wärmemengen, die zur Erfüllung der Verfahrensaufgabe bei Nutzung von RWA aus gleichem Material mit unterschiedlichen NV angewendet werden müssen. Alle dargestellten Berechnungen beziehen sich auf eine Beheizung mittels Thermalöl aus der 190 °C Schiene.

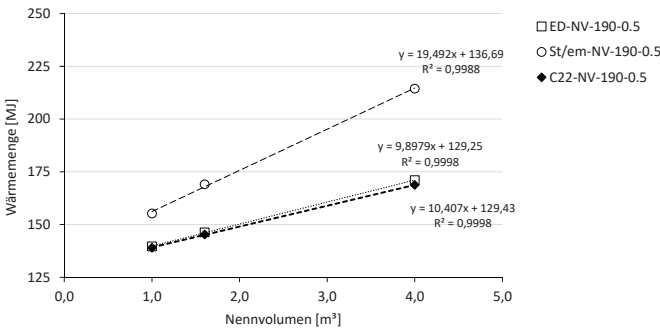


Abb. 3.6: Variation apparativer Parameter Material und Nennvolumen (NV) sowie unveränderter Temperaturschiene (190 °C) und Temperaturrampe (0,5 K/min)



Die Verläufe weisen für die Materialien Edelstahl und C22 einen beinahe identischen Verlauf auf, wohingegen die Wärmemengen bei den RWA aus emailliertem Stahl deutlich höher liegen. Auffällig ist außerdem die hier größere Steigung der Wärmemengen abhängig vom NV. Die Zunahme der Wärmemenge bei zunehmenden NV des RWA ist auf die Zunahme von Wärmeverlusten zurückzuführen. Diese resultieren vorrangig aus dem Aufheizen des Apparatematerials, in dem sowohl die verbaute Masse als auch die Materialart mitberücksichtigt werden. Einfluss auf die Ergebnisse nehmen vor allem die Wandstärken, die abhängig von der Materialart und dem NV variieren. Aus diesem Grund ist der Anstieg der Regressionsgerade, die die Wärmemenge für St/em repräsentiert, in Abb. 3.6 im direkten Vergleich zu ED und C22 ca. zweimal so groß, da die Wandstärken der St/em-Apparate um mehr als den Faktor 2,5 größer ausfallen. Die Wandstärken spielen unmittelbar in die aufzuheizenden Materialmengen ein, deren Erwärmung in diesem Zusammenhang den größten Einflussfaktor auf den Energiebedarf zur Erfüllung der Verfahrensaufgabe aus apparativer Sicht darstellen. Hinzu kommt, dass bei den RWA mit größeren Nennvolumina nur ein geringer Teil der wärmeübertragenden Fläche genutzt wird. Der Bereich an „ungenutzter Wärmeübertragungsfläche“, die den Gasraum über dem Lösemittel erwärmt, ist hingegen deutlich größer. Die im Vergleich höheren Wärmemengen des emaillierten Stahlapparates folgen aus der deutlich schlechteren Wärmeleitfähigkeit der Beschichtung.

Im Hinblick auf den variierten Prozessparameter Temperaturrampe zeigen die Ergebnisse, dass je höher die T-Rampe gewählt wird, die benötigte Menge an Wärmeenergie zunimmt. In Abb. 3.7 ist dieser Zusammenhang für die St/em-Apparate mit unterschiedlichen NV dargestellt. Die Daten beziehen sich auf die Temperaturschiene 190 °C. Der Anstieg der T-Rampe verursacht für alle drei untersuchten Nennvolumen eine Zunahme an benötigter Wärmemenge. Dies ist begründet durch die höheren Vorlauftemperaturen, um einen schnelleren Wärmeeintrag sicherzustellen. Daraus resultieren höhere Wandtemperaturen und damit höhere Verluste durch die Materialaufheizung und Abgabe in die Umgebung pro Zeiteinheit. Diese Verluste sind allerdings durch die deutlich reduzierte Heizdauer negiert. Die im Rahmen dieser Untersuchung gewählten T-Rampen werden durch eine Restriktion der maximalen Temperaturdifferenz zwischen Betriebsstoff- und Produktseite nicht beeinflusst, da diese mit 50 K angenommen ist und für die hier gestellte Verfahrensaufgabe nicht berührt wird.

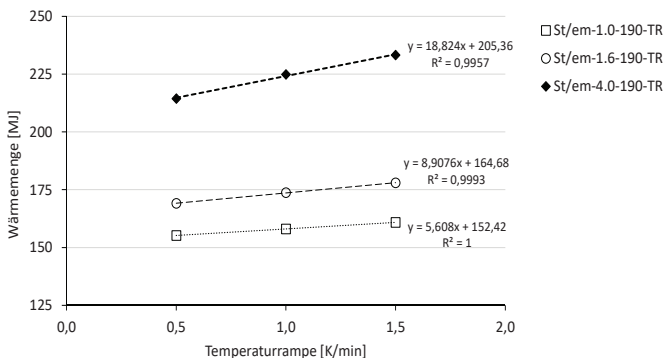


Abb. 3.7: Variation der apparativen Parameter Nennvolumen und prozesslichen Parameter Temperaturrampe bei gleichem verbautem Material (St/em) und unveränderter Temperaturschiene (190 °C)

Die Lagen der Graphen belegen den bereits aufgeführten Einfluss des Nennvolumens und den damit einhergehenden Verlusten aufgrund von Materialmengen sowie der genutzten Wärmeübertragungsfläche. Die Wärmemengen, die bei der Nutzung eines 4 m<sup>3</sup> RWA benötigt werden, liegen deutlich über denen der

1,0 bzw. 1,6 m<sup>3</sup> RWA. Der Schnittpunkt mit der y-Achse liegt in dieser Darstellung deutlich über denen im Graphen der Abb. 3.6. Dies resultiert aus dem deutlich geringeren Einfluss der T-Rampe auf dem Wärmebedarf. Der Schnittpunkt zeigt die notwendige Wärmemenge unabhängig von dem Prozessparameter T-Rampe und weist die apparativen Größen, vorrangig dem NV, als deutlich größere Einflussparameter aus.

Der Einfluss des variierten betrieblichen Aspekts der gewählten Temperaturschiene lässt sich im Rahmen dieser Betrachtung nicht darstellen. Zwar zeigen sich minimale Abweichungen bzgl. der eingetragenen Wärmemengen, diese resultieren allerdings aus dem Abbruchkriterium der Berechnungsvorschriften. Bei quasi identischen Wärmemengen ist jedoch der Betriebsstoffdurchsatz bei Nutzung der 130 °C T-Schiene deutlich höher als bei der 190 °C T-Schiene. Für die Untersuchungen zum Wärmeeintrag ist der Betrachtungsrahmen lediglich auf das Heizen begrenzt, daher sind Standorteinflüsse wie z. B. zur Verfügung stehende Temperaturschienen oder in der Produktionsanlage verbaute Pumpen, die das Umwälzen der Betriebsstoffe sicherstellen, nicht erfasst.

Die Analyse zeigt, dass der Einfluss der variierten Parameter unterschiedlich groß ist. Dies lässt darauf schließen, dass prinzipiell eine Priorisierung der unterschiedlichen Größen in Bezug auf den Wärmebedarf erfolgen kann. Daraus ist eine Ableitung von optimalen Parameterkonstellationen für eine gestellte Verfahrensaufgabe denkbar. Im Hinblick auf die Ausstattung einer Mehrzweckanlage können so Rückschlüsse auf eine optimierte Belegung der TAN gezogen werden. Dazu sind allerdings deutlich umfangreichere Untersuchungen notwendig, da auch Sachverhalte wie Nutzung einer großen RWA vs. zweier kleiner RWA, allerdings mit besseren Wärmeübertragungseigenschaften, hier eine Rolle spielen.

Der Betrachtungsrahmen dieser Analyse muss für die ökologische Bewertung erweitert werden, da die Unterschiede zwischen den verschiedenen Szenarien neben den Apparaten und Equipment auch aus den Verbräuchen und Aufwendungen, die u.a. aus der Bereitstellung der verschiedenen Temperaturschienen sowie der Art der Verteilung der Betriebsstoffe in den Anlagen, resultieren. Die Ergebnisse der ökologischen Bewertung werden in Kapitel 5.6.6 vorgestellt.

## 4 Produktionsprozesse im Mehrzweckanlagen

Mehrzweck-Produktionsanlagen ermöglichen durch die schnelle Anpassung des Produktportfolios eine gleichbleibend hohe Anlagenauslastung, auch bei Veränderungen der Nachfrage am Markt. Dadurch kann die Deckung der Fixkosten der Produktion, unabhängig von Nachfrageänderungen bei einzelnen Produkten, auf einem gleichbleibenden Niveau gehalten werden. In der stoffwandelnden Industrie werden diese Anlagen vor allem im Bereich der Spezialchemie und pharmazeutischen Wirkstoffproduktion betrieben. Vorrangig werden Produkte mit Jahreskapazitäten von mehreren 100 kg bis 1000 t produziert, die gekennzeichnet sind durch kurze Produktlebenszyklen in dynamisch wachsenden Märkten und stellenweise, bedingt durch Forschungsaktivitäten, ständigen Modifikationen unterliegen. Die Anlagen werden häufig diskontinuierlich betrieben und ähneln im Betrieb stark einer konventionellen Batchproduktionsanlage. [11] Der Batchbetrieb ermöglicht neben dem Produktwechsel auch die Variation von Prozessbedingungen, wie Druck oder Temperatur. Nachteilig sowohl aus ökologischer als auch ökonomischer Sicht wirken sich dagegen die Stillstandzeiten der Anlage beim Rüsten und Reinigen der Apparate sowie intensive Heiz- und Kühlstritte aus [61].

Mehrproduktanlagen, Mehrzweckanlagen bzw. Multipurpose-Anlagen, Mehrstrang-Mehrweganlagen, Vielzweckanlagen – der Begriffsdschungel im deutschen Sprachgebrauch für Produktionsanlagen, in denen verschiedene Produkte produziert werden können, ist groß. In der Literatur wird der Begriff Mehrproduktanlage meist übergeordnet für verschiedene Konzepte verwendet. Rauch [11] unterscheidet orientiert an Mah et al. [115] in sogenannten Einstrang- und Mehrweg-Anlagen, siehe Abb. 4.1.

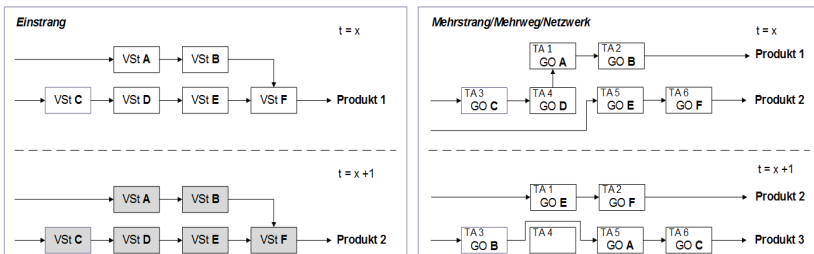


Abb. 4.1: Einteilung von Mehrproduktanlagen, nach [115, 11]

Das gezeigte Einstrang-Konzept ist gekennzeichnet durch eine feste Verschaltung verschiedener Verfahrensstufen. Der Begriff Verfahrensstufe beschreibt in diesem Zusammenhang die technische Realisierung einer bestimmten Verfahrensfunktion mittels Apparaten und Maschinen [116], die in Summe nachfolgend als Teilanlage (TAn) bezeichnet werden. Für das Einstrang-Konzept gilt, dass die Prozesssequenz aus verschiedenen Verfahrensstufen für alle Produkte gleich ist, siehe Abb. 4.1, und die TAn für die einzelnen Verfahrensstufen entsprechend der Anforderungen des bekannten Produktportfolios ausgelegt sind. Jeder TAn ist eine bestimmte Verfahrensstufe zugeordnet, wobei sowohl die Anzahl der TAn als auch deren Größen orientiert sind an der erwarteten Produktionskapazität [117]. In solchen Einstrang-Mehrproduktanlagen werden i. d. R. ähnliche Produkte, meist einer Produktfamilie entstammend, mit ähnlichen Anforderungen hergestellt. Die Produktionen der verschiedenen Produkte erfolgen nacheinander.

der (Kampagnenfertigung). Anlagen, die nach diesem Konzept gestaltet sind, können durch zusätzliche feste Stränge erweitert werden, sodass die Produktion weiterer Produktfamilien parallel ermöglicht wird. Bei diesem Anlagenkonzept erfolgt die Anlagenauslegung verfahren- bzw. produktorientiert. Der Entwurf des Anlagenkonzeptes richtet sich nach den definierten Produktgruppen und den damit verbundenen apparativen und verfahrenstechnischen Anforderungen [117].

Das Mehrweg-Konzept ist gekennzeichnet durch eine Zusammenstellung von unabhängig voneinander betreibbaren TAn, die abhängig von der geforderten Prozessstopologie miteinander verschalten werden [115]. Sowohl die Reihenfolge der Belegung der einzelnen TAn als auch die in den TAn betriebenen Grundoperationen sind variabel und von dem zu produzierenden Produkt bestimmt. Anders als beim Einstrang-Konzept kann die Reihenfolge der Belegung bestimmter TAn produktspezifisch sein. Es können also verschiedene Produkte nach verschiedenen Produktionsverfahren in einem solchem Anlagentyp hergestellt werden. Wie in Abb. 4.1 für Produkt 2 dargestellt, kann die Herstellung einzelner Produkte über verschiedene TAn erfolgen. Die Planung der Belegung ist i. d. R. abhängig von der geforderten Prozessstopologie der Prozesse, der benötigten Kapazität und Batchgröße sowie den freien TAn. Eine parallele Produktion verschiedener Produkte ist ebenfalls möglich. Die TAn sind in verschiedenen Größen, Werkstoffen und Anzahl bei ähnlicher technischer Ausführung in der Produktionsanlage verbaut, da an diese häufig sehr unterschiedlichen Anforderungen gestellt werden. Bei diesem Anlagenkonzept wird die Anlagenauslegung ausrüstungsorientiert vorgenommen. Mittels Designrezepten werden Betriebsbereichsfenster definiert. Einzelne TAn werden für verschiedene Grundoperationen vorgehalten und müssen in einem möglichst großen Parameterbereich betreibbar sein [11]. Ziel ist es, mit diesen Anlagen auch auf zukünftige, eventuell veränderte, Anforderungen aufgrund der nur schwer vorhersehbaren Marktentwicklung reagieren zu können.

Das von Rauch [11] als Einstrang benannte Konzept wird in der Literatur als Mehrproduktanlage, das als Mehrweg titulierte Konzept vorrangig als Mehrzweckanlage bzw. Vielzweckanlage bezeichnet, siehe [118, 115, 117, 119, 64]. An diesen Begriffsdefinitionen orientiert sich diese Arbeit. Mehrprodukt- als auch Mehrzweckanlagen können in verschiedenen Ausführungen gestaltet sein. Eine Übersicht über die wesentlichen, in der Literatur zu findenden Ansätzen, liefert Tab. 4.1, in der eine Zuordnung zu den beiden Anlagenkonzepten erfolgt. Die verschiedenen Gestaltungsansätze sind in der angegebenen Literatur umfassend beschrieben und werden nachfolgend nicht gesondert vorgestellt.

Tab. 4.1: Übersicht zu Gestaltungsansätzen von Mehrprodukt- und Mehrzweckanlagen

Mehrproduktanlage	Mehrzweckanlage
Standardmehrproduktanlage [120]	Modulare Mehrproduktanlage [120] Mehrproduktanlage mit Rohrleitungsverteilerstation [120] Pipeless Plants (wie verwiesen in [121]) Mehrprozessanlage [122]

In der Industrie sind in der Produktion auch Verknüpfungen verschiedener Konzepte, z. B. Mehrprodukt- und Mehrprozessanlagen, zu finden. So werden Abschnitte der Produktion nach dem Prinzip der Mehrproduktanlage ausgeführt, die durch die Struktur einer Mehrzweckanlage ergänzt werden. Für einzelne Prozessabschnitte verschiedener Produkte werden Cluster gebildet, die den gleichen Reaktionstyp aufweisen und bei denen die Aufarbeitungen ähnlich gestaltet sind. Die identifizierten Prozesscluster, bestehend aus ein bis mehrere Grundoperationen, werden in teilweise kontinuierlich betriebenen Einstrang-Produktionsabschnitten realisiert. [123]

In diesem Kapitel werden nachfolgend zunächst die Besonderheiten und Unterschiede verschiedener Anlagentypen und der damit verbundene Einfluss auf die ökologische Bewertung erarbeitet (Kapitel 4.1). Anschließend wird in Kapitel 4.2 der für die ökologische Bewertung entwickelte Ansatz, in Bezug auf die Erfassung der für diesen Anlagentyp relevanten Daten und deren Abschätzung, basierend auf den in Kapitel 2.5 diskutierten Ansätzen zur Erfassung von Produktionsanlagen, vorgestellt. In diesem Zusammenhang wird ein methodisches Vorgehen im Hinblick auf die Berücksichtigung der Lebensdauer der Mehrzweckanlagen präsentiert und anschließend verschiedene Allokationsansätze diskutiert, die die Zuteilung der ökologischen Aufwendungen zu den einzelnen Prozessen bzw. Produkten ermöglichen. Abschließend wird in Kapitel 4.3 die Anwendung des Ansatzes anhand einer Produktionsanlage aus dem Bereich der Spezialchemie demonstriert.

## 4.1 Mehrzweckanlagen – Flexible Produktionsanlagen

Ein großer Vorteil der Mehrprodukt- (MPA) und Mehrzweckanlagen (MZA) ist die flexible Anpassung an wechselnde Anforderungen. Gruhn und Fichtner [124] haben die Flexibilität verfahrenstechnischer Systeme untersucht und fünf verschiedene Arten definiert: Strukturflexibilität, Sortimentsflexibilität, kapazitive Flexibilität, Parameterflexibilität und räumliche Flexibilität. Nach Fürer et al. [120] sind für Mehrproduktanlagen und Mehrzweckanlagen die nachfolgend aufgeführten drei Flexibilitätsarten von besonderer Bedeutung:

### Strukturflexibilität

Diese Eigenschaft beschreibt, wie sich das Produktionssystem durch eine Änderung in der Verknüpfung einzelner Elemente an veränderte Anforderungen anpassen lässt. Übertragen auf die betrachteten Anlagentypen bedeutet dies, dass durch eine Änderung der Verknüpfung einzelner Teilanlagen verschiedene Produktionsprozesse realisierbar sind. Nach dem hier definierten Begriff der MPA ist dieser Anlagentyp durch eine geringe Strukturflexibilität gekennzeichnet. Dies ist vor allem in der festen Verrohrung der einzelnen Teilanlagen (TAn) begründet. Die MZA hingegen weisen eine hohe Strukturflexibilität auf, da in verschiedenen TAn unterschiedliche Grundoperationen (GO) betrieben und die einzelnen TAn individuell miteinander verknüpft werden können, z. B. durch Rohrleitungen (MPA mit Rohrleitungsverteilerstation), Schläuchen oder mobilen periphere Einrichtungen (modulare MPA).

### Kapazitive Flexibilität

Die kapazitive Flexibilität beschreibt die Möglichkeiten auf Änderungen bzgl. der Kapazitätsanforderungen reagieren zu können. In Bezug auf diese Eigenschaft müssen die Gestaltungsansätze der Anlagentypen MPA und MZA einzeln betrachtet werden. Sowohl das Konzept der Standard-MPA als auch der Modularen MPA beinhaltet festinstallierte Reaktorgrößen, sodass die kapazitive Flexibilität als gering eingestuft wird. Die MZA mit Rohrleitungsverteilerstationen und die Pipeless Plants hingegen ermöglichen eine Verschaltung von Hauptapparaten unterschiedlicher Größen – je nach geforderter Prozessstopologie. In diesem Fall wird von einer hohen kapazitiven Flexibilität ausgegangen. [11]

### Sortimentsflexibilität

Die Sortimentsflexibilität stellt die Fähigkeit des Produktionssystems dar, ohne wesentlicher Änderung einzelner Elemente möglichst viele verschiedene Produkte erzeugen zu können. Dies bedeutet für die hier betrachteten Produktionsanlagen, dass in den vorhandenen Teilanlagen verschiedenste Produkte in einem möglichst breiten Betriebsbereichsfenster hergestellt werden können, ohne dass die einzelnen Teilanlagen dazu umgerüstet oder erweitert werden müssen. [120] In diesem Zusammenhang ist diese Flexibilitätsart für die Mehrproduktanlage als hoch einzustufen. Gruhn und Fichtner [124] weisen darauf hin, dass zur

Bestimmung der Sortimentsflexibilität sowohl die Art der zu realisierenden GO in den zur Verfügung stehenden Apparaten als auch der von den Apparaten abgedeckte, von den zu realisierenden Prozessen geforderte Parameterbereich berücksichtigt werden muss. Für eine mögliche Quantifizierung schlagen die Autoren den Eignungsgrad Anlage sowie als Kenngröße ein Verhältnis aus der Summe eben dieses Eignungsgrad für die realisierten Prozesse und den im Idealfall realisierbaren möglichen Prozessen. Entsprechend dieser Definition von Sortimentsflexibilität sind die verschiedenen Anlagen prinzipiell individuell zu bewerten.

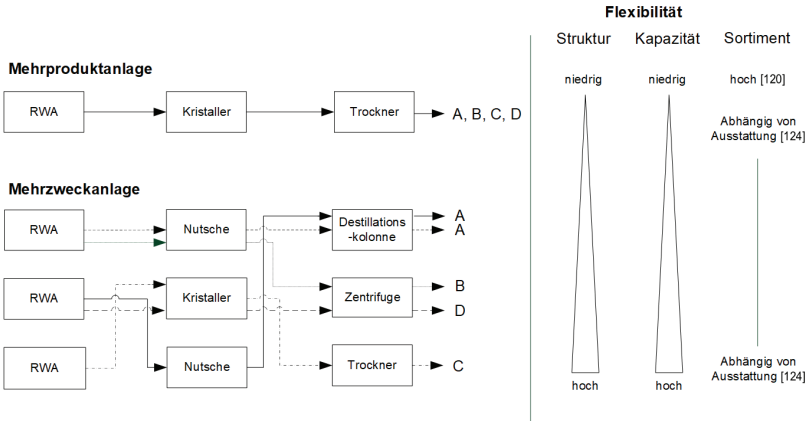


Abb. 4.2: Mehrprodukt- und Mehrzweckanlagen im Vergleich bzgl. Struktur-, Kapazitäts- und Sortimentsflexibilität

Abb. 4.2 zeigt die Unterschiede zwischen MPA und MZA hinsichtlich der drei vorgestellten Flexibilitätsarten. Die MPA sind durch die fest installierten TAN und Peripherie an einer vorgegebenen Sequenz von Apparaten und damit Grundoperationen gebunden. So gilt für das Beispiel in Abb. 4.2, dass lediglich Prozesse mit der Topologie Rührwerksapparat (RWA), z. B. für Reaktionen oder Extraktionen, Kristaller und Trockner in der Anlage betrieben werden können. Aufgrund der festen Verrohrung besteht außerdem nur eine geringe Flexibilität hinsichtlich der zur Verfügung stehenden Kapazität. Die Sortimentsflexibilität ist dagegen nach der Definition in Fürer et al. [120] bei diesen Anlagen als hoch eingestuft. Dies ist darin begründet, dass bei Produktwechsel aufgrund der festen Verrohrung der TAN keine oder nur sehr geringe Umbaumaßnahmen notwendig sind. Nach dem Bewertungsansatz von Gruhn und Fichtner [124] ist die Sortimentsflexibilität unmittelbar abhängig von der Ausstattung und den Anforderungen der Prozesse des Produktsortiments.

Genau gegenläufig verhalten sich die beiden Flexibilitätsarten bezogen auf die Struktur und der Kapazität bei den MZA. Aufgrund des Aufbaus dieser Anlagen werden die einzelnen Teilanlagen für jedes Produkt individuell, entsprechend der geforderten Prozesstopologie, verschaltet, siehe Abb. 4.2. So wird z. B. Produkt B in der Sequenz RWA, Nutsche und Zentrifuge betrieben, Produkt D hingegen benötigt die TAN RWA, Kristaller und Zentrifuge. Für jedes Produkt wird somit eine Umrüstung in der Anlage vorgenommen. Die Strukturflexibilität ist bei MZA im Vergleich zu MPA deutlich höher. Es können aufgrund der flexiblen Verschaltung der einzelnen TAN deutlich mehr und vor allem verschiedene Produkte in der Anlage produziert werden. Sowohl die Sequenz der Apparate als auch die damit verbundenen Grundoperationen sind entsprechend der Prozesstopologien frei kombinierbar. Eine Sonderstellung nehmen hier allerdings die Pipeless Plants ein, da die Anzahl, Anordnung und Ausgestaltung der verschiedenen funktiona-

len Stationen, wie Befüll-, Misch-, Reaktions-, Abfüll- und Reinigungsstationen, einen unmittelbaren Einfluss auf die Strukturflexibilität haben [11]. Diese sind fest verbaut und werden durch bewegliche Behälter entsprechender den Vorgaben in den Rezepturen angesteuert. Daraus resultiert ein Optimierungsproblem aus Design, Layout und Produktionsplanung bei diesem Anlagentyp, welches seit den 90iger Jahren ein umfangreich untersuchtes Forschungsfeld darstellt [121, 125, 126, 127]. Bezogen auf die Sortimentsflexibilität gelten nach der Definition von Gruhn und Fichtner [124] die gleichen Aussagen wie bei den MPA.

Die Flexibilität, die die Produktionsanlagen kennzeichnet, liefert die Anforderungen an die Variabilität des erstellten Modellierungsansatzes, siehe Kapitel 3.1. Die Flexibilitätsmerkmale liefern außerdem einen Anhaltspunkt welche Größen einen Einfluss auf die Bewertung von Produktionsprozessen und die Zuordnung der ökologischen Aufwendungen der Anlagen zu den einzelnen Produktionsprozessen ausüben. In der Tab. 4.2 sind die wesentlichen Einflussgrößen dargestellt, die aus den Anlagenkonzepten resultieren.

Die MPA ist, wie bereits oben beschrieben, gekennzeichnet durch feste Produktionsstränge, die von den in der Anlage betriebenen Produktionsprozessen mit gleicher Prozesssequenz nacheinander durchlaufen werden. Dies bedeutet in Hinblick auf die Zuordnung der ökologischen Aufwendungen zu den Prozessen, dass sowohl Apparateausführung als auch -materialien und -größen sowie die Anzahl der belegten Apparate für jeden Prozess identisch sind (siehe Tab. 4.2). Lediglich die Belegungsdauer der in den TAN verbauten Apparate ist aufgrund der Produktionsmengen sowie der durch die Rezeptur geforderten Prozessdauer einzelner Produkte variabel und nimmt damit Einfluss auf die Zuordnung der ökologischen Aufwendungen zu dem einzelnen Prozess.

Tab. 4.2: Einflussgrößen des Anlagenkonzepts auf die Zuordnung der ökologischen Aufwendungen zu einzelnen Produktionsprozessen

Flexibilitätsmerkmal	Zuordnung der ökolog. Aufwendungen bei Mehrproduktanlagen (MPA)	Zuordnung der ökolog. Aufwendungen bei Mehrzweckanlagen (MZA)
<b>Strukturflexibilität</b>		
Apparateausführung	Identisch	variabel, i.d.R. abh. von Verfügbarkeit
Apparatematerial	Identisch	variabel, i.d.R. abh. von Einsatzstoffen und Verfügbarkeit
<b>Sortimentsflexibilität</b>		
Anzahl und Belegung TAN	Identisch	variabel, abh. von Verfügbarkeit und Rezeptur
Belegungsdauer TAN	variabel, abh. von Rezeptur und Produktionsmenge	variabel, abh. von Rezeptur und Produktionsmenge
<b>Kapazitive Flexibilität</b>		
Apparategröße	Identisch	variabel, abh. von Verfügbarkeit und Produktionsmenge (Ausnahme: Modulare Mehrproduktanlagen)

Anders verhält es sich dagegen bei MZA. Sowohl die Apparateausführung als auch Apparatematerial, -anzahl und -größe variiert für die verschiedenen Prozesse. Auch sind Variationen bei einem Prozess, abhängig von der Verfügbarkeit einzelner TAN, übers Jahr gesehen möglich. Aufgrund der unterschiedlichen Produktionsprozesse, die in einem solchen Anlagentyp betrieben werden können, variiert ebenfalls die Belegungsdauer. Für die Zuordnung der ökologischen, durch die Anlagen verursachten Aufwendungen zu einem einzelnen Produktionsprozess müssen somit für jeden Prozess individuell die belegten TAN erfasst werden. Zum einen sind so die jeweiligen Apparate mit dazugehörigen Informationen für die ökologische Bewertung zu ermitteln, zum anderen gilt es zu prüfen, welche Produktionsprozesse diese betrachteten TAN ebenfalls belegen. Für den Anlagentyp MZA ist die Berücksichtigung der Produktionsanlage bei der ökologischen Bewertung eines Produktionsprozesses aufgrund der hohen Flexibilität in Bezug auf Kapazität und Struktur somit deutlich komplexer, als für MPA.

In dieser Arbeit liegt der Fokus auf MZA und den mit diesem Anlagentyp verbundenen Herausforderungen bzgl. der Erfassung ökologischer Aufwendungen. Diese sind vor allem bedingt durch Anlagenstruktur, -aufbau und -betrieb. Ziel ist es, einen Ansatz zur Verfügung zu stellen, der es ermöglicht, bei der ökologischen Bewertung von Produkten bzw. Prozessen auch den Anteil darstellen zu können, den die Produktionsanlage mit einbringt. Dies befähigt den Anwender, unterschiedliche Anlagenkonzepte zu vergleichen und die Bewertungen allumfassend und transparent für Stakeholder bereitzustellen. Ein Vorgehen für die Erfassung der ökologischen Aufwendungen, die durch Produktionsanlagen verursacht werden und deren Zuordnung zu einzelnen Produktionsprozessen, wird im Kapitel 4.2 im Detail vorgestellt.

## 4.2 Ansatz zur Integration anlagenbedingter ökologischer Aufwendungen

Um die ökologischen Aufwendungen, die durch die MZA verursacht werden, bei der Bewertung eines Produktionsprozesses zu berücksichtigen, müssen diese zunächst ermittelt werden. Als Basis für die Zusammenstellung der benötigten Daten dient hierfür der Lebenszyklus der einzelnen Apparate und des Equipments, der im Kapitel 2.5 bereits erläutert wurde.

Der zeitliche Aufwand, der mit der Erfassung der Daten einer Produktionsanlage einhergeht, ist groß. Von daher ist es wichtig zu prüfen, welche Daten zu den MPA und MZA aus dem Betrieb benötigt werden, um die betrachteten Prozesse bzw. Produkte mit einer akzeptablen Genauigkeit zu beschreiben. In dieser Arbeit wird ein Vorgehen gezeigt, welches die Datenerfassung der Anlage und der zugehörigen Infrastruktur sowie die Einbindung von Aufwendungen, die über die Lebensdauer einer solchen Anlage in Form von Instandhaltung anfallen, ermöglicht. So soll eine Basis für die Erfassung von Daten zur ökologischen Bewertung von Produktionsanlagen geschaffen und ein handhabbares Vorgehen zur Gewinnung von relevanten Informationen bereitgestellt werden. Die jährlichen ökologischen Aufwendungen müssen abgeleitet und auf die Produktionsprozesse, die in dem Betrachtungszeitraum in der Anlage betrieben wurden, adäquat allokiert werden. Ein entsprechendes methodisches Vorgehen wird nachfolgend in den Kapiteln 4.2.1 und 4.2.2 vorgestellt. Die Untersuchungen erfolgten auf Basis von Daten einer typischen Mehrzweckanlage, die durch die Firma Merck KGaA am Standort Darmstadt, Deutschland, zur Produktion von Spezialchemikalien betrieben wird. Der entwickelte generische Ansatz spiegelt sowohl die wesentlichen Einflussgrößen wider als auch die Möglichkeit vergleichende, aussagekräftige Bewertungen zwischen verschiedenen Anlagenkonfigurationen oder Prozessvarianten vorzunehmen.

### 4.2.1 Datenerfassung

Der Lebenszyklus einer Produktionsanlage kann, wie in Kapitel 2.5 beschrieben, in sieben Abschnitte unterteilt werden: *Ressourcengewinnung*, *Materialveredelung*, *Apparatebau*, *Anlagenbau*, *Produktionsbetrieb* und *Anlagenrückbau* sowie *Entsorgung bzw. Recycling/Verwertung*. Für die einzelnen Lebenszyklusbereiche existieren in den gängigen Datenbanken Datensätze, die bei fehlenden Informationen für eine grobe Abschätzung genutzt werden können. Diese Datensätze beschreiben entweder einzelne Abschnitte oder fassen in sich mehrere Abschnitte zusammen. So beinhaltet z. B. der im Detail in Kapitel 2.5 beschriebene Datensatz „chemical plant, organic“ aus der ecoinvent DB sowohl die Lebenszyklusabschnitte *Ressourcengewinnung*, *Materialveredelung*, Transporte als auch *Anlagenbau und -abbau*. Andere Datensätze aus dieser Datenbank, wie z. B. „chromium steel 18/8, at plant“, die Rohstoffgewinnung und Materialveredelung oder „iron ore, 46% Fe, at mine“ nur die Rohstoffgewinnung. Außerdem existieren auch Datensätze für die ökologische Bewertung, die lediglich einzelne Elementarflüsse repräsentieren, wie z. B. „Hydrogen sulfide, air, low population density“. Die hier angegebenen Datensätze entstammen alle





## 4.2 Ansatz zur Integration anlagenbedingter ökologischer Aufwendungen

der Datenbank ecoinvent [16], die aufgrund ihrer Verbreitung und Nutzung als repräsentativ angesehen wird.

Wie beschrieben, werden Monoproduktanlagen individuell für die Produktion eines einzelnen Produktes in der chemischen Industrie, i. d. R. sog. Bulkchemikalien, über eine geplante Anlagenbetriebsdauer ausgelegt und entsprechende Materialien für Apparate und Equipment gewählt. Dies bedeutet, dass in einigen Fällen allgemeingültige Datensätze für die Abschätzung der ökologischen Aufwendungen genutzt werden können. Allerdings sollte geprüft werden, inwiefern die einzelnen Lebenszyklusabschnitte in den Datensätzen berücksichtigt sind und ggf. zusätzliche Betrachtungen, z. B. im Hinblick auf Instandhaltung, notwendig werden. In MZA werden häufig Standardapparate aus unterschiedlichen Materialien kombiniert, um den Anforderungen der verschiedenen Prozesse bezüglich Werkstoffbeständigkeit Rechnung tragen zu können. Beispielsweise werden bei chloridhaltigen Medien häufig Apparate aus Nickelbasis-Legierungen wie Hastelloy<sup>®</sup> verwendet. In Tab. 4.3 sind die Wirkungsindikatorwerte verschiedener Materialien in den Wirkungskategorien (WK) Klimaänderung (CC) und Humantoxizität (HT) nach den Charakterisierungsmodellen der ReCiPe 2008 Methode [111] zusammengestellt<sup>19</sup>. Anhand der Daten zeigt sich, dass Materialien in den verschiedenen Wirkungskategorien deutliche Unterschiede aufweisen können, vgl. das Material Gusseisen in der WK CC mit dem niedrigsten Wert, in der WK HAT mit dem zweithöchsten, und somit bei der Bewertung eine zentrale Bedeutung einnehmen können. Es kann daher davon ausgegangen werden, dass vor allem die Sondermaterialien einen hohen ökologischen Impact in die Bewertung einbringen. Die Häufigkeit des Austausches einzelner Apparate und Equipment aufgrund von Korrosion und Abrasivität in Folge der eingesetzten Stoffe in den Prozessen oder die unterschiedlich hoch ausfallenden Instandsetzungsaufwendungen, wie Neubeschichtungen oder Wechsel von Dichtungen etc., sind daher ebenfalls zu berücksichtigen. Demzufolge sind für Mehrzweckanlagen Standarddatensätze, wie „chemical plant, organic“ (ecoinvent) nicht geeignet, sodass die Produktionsanlage im Rahmen ökologischer Bewertungen erfasst werden muss.

Tab. 4.3: Wirkungsindikatorwerte verschiedener Materialien in den Wirkungskategorien Klimaänderung und Humantoxizität mittels den Charakterisierungsmodellen der ReCiPe 2008 Methode [111] (midpoint (I))

Material (Datensatz ecoinvent v2.2; Datensatz-Nr.)	Klimaänderung [kg CO <sub>2</sub> -Äq./kg] ReCiPe, midpoint (I), 20 a	Humantoxizität [kg 1,4-DCB-Äq./kg] ReCiPe, midpoint (I), 100 a	Beispielanwendung
Gusseisen (cast iron, at plant; #1069)	1,7046	1,2135	Rohrfittings
Blasstahl, niedriglegiert (steel, converter, low-alloyed, at plant; #1151)	1,9494	0,50597	Baustahl
Chromstahl 18/8 (chromium steel 18/8, at plant; #1072)	4,9945	0,60401	Werkstoff-Nr. 1.4301 (X5CrNi18-10)
Eisen-Nickel-Chrom-Legierung (iron-nickel-chromium alloy, at plant; #6946)	4,9288	1,8600	Werkstoff-Nr. 1.4876 (X10NiCrAlTi 32-20)
Ferronickel, 25 % Ni (ferronickel, 25 % Ni, at plant; #1098)	10,1800	0,35114	Eisenlegierung für rostfreie Stähle und Legierungen

Der grundsätzliche Aufbau einer MZA setzt sich zusammen aus zentralen Anlagenbestandteilen und Infrastruktur sowie diversen TAN. Eine TAN ist in dieser Arbeit definiert als eine unabhängig betreibbare Einheit, zusammengesetzt aus einem Hauptapparat und diversem ergänzendem Equipment. Die TAN sind technisch und organisatorisch begrenzte Abschnitte der Anlage, die stellenweise unterschiedliche, klar definierte Aufgaben in der Produktion erfüllen. Im Betrieb ist eine eindeutige Zuordnung zwischen TAN und Grundoperation möglich. Für die Einbindung der Produktionsanlage in eine ökologische Bewertung werden in dem hier entwickelten Ansatz, im Zuge der Datenerfassung, zwei Abschnitte unterschieden:

<sup>19</sup> Die Datensätze entstammen der Datenbank ecoinvent v2.2, beziehen sich jeweils auf ein Kilogramm des entsprechenden Materials und beinhalten i. d. R. die Lebenszyklusabschnitte von der Ressourcengewinnung bis zum fertigen Material (cradle-to-gate).

Anlagenbestandteile, deren ökologische Aufwendungen als *belegungsabhängig* den verschiedenen Produktionsprozessen bzw. Anlagenbestandteile, die *belegungsunabhängig* dem Produktionsprozess zuzuordnen sind. In Abb. 4.3 wird eine entsprechende Zuordnung beispielhaft dargestellt.

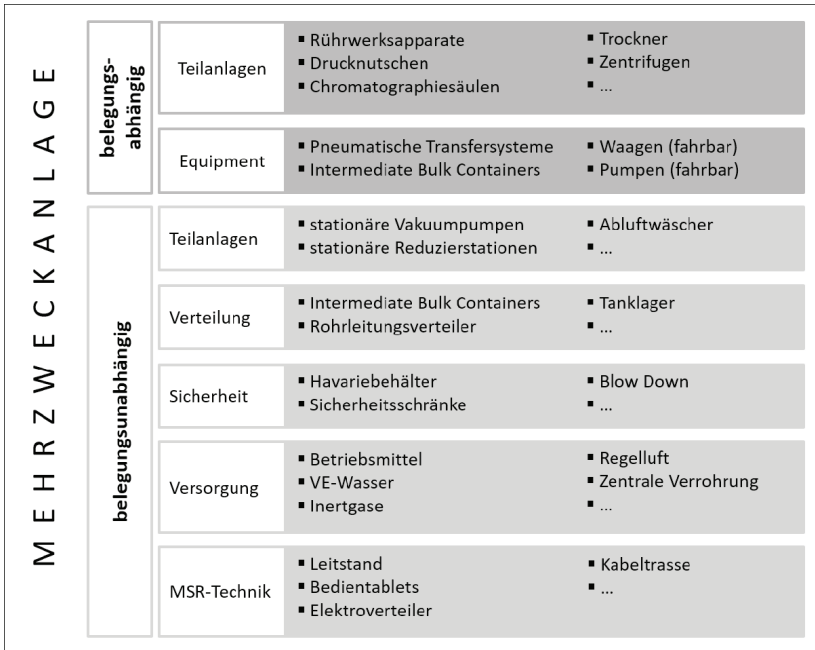


Abb. 4.3: Unterteilung einer Mehrzweckanlage in belegungsabhängige und belegungsunabhängige Abschnitte im Zuge der Datenerfassung für die ökologische Bewertung

Zu den belegungsabhängigen Anlagenbestandteilen zählen TAN, mit Hauptapparaten, Equipment sowie der Mess-, Steuer- und Regelungstechnik (MSR-Technik) und der Verrohrung. Als ebenfalls belegungsabhängig werden die während des Betriebes der Mehrzweckanlage benötigten IBC (Intermediate bulk containers) eingestuft. Diese werden vorrangig als Auffangbehälter für Endprodukte, Zwischenprodukte und Abfälle sowie als Transportbehälter für nicht im angeschlossenen Tanklager bereitgestellte Lösemittel eingesetzt.

Zentrale Anlagenbestandteile und die Anlageninfrastruktur gelten als belegungsunabhängig. Diese werden dauerhaft im Basisbetrieb gehalten, unabhängig davon welche TAN zum Betrachtungszeitpunkt belegt sind, wie z. B. Vakuumpverteilerstationen oder Abluftwäscher. Ebenfalls als zentrale Bestandteile werden Sicherheitsvorkehrungen angesehen, wie beispielsweise Blow-Down-Systeme, Sicherheitsschränke oder sogenannte Havariebehälter, in denen z. B. bei einer Reaktionsakkumulation die TAN notentleert werden. Hinzukommen die Betriebsmittelversorgung, das Tanklager und sonstige Verrohrung mit Ventilen und MSR-Technik, die nur bei Betriebsstillständen außer Betrieb genommen werden.

Diese Unterscheidung in belegungsabhängige und belegungsunabhängige Anlagenbestandteile unterstützt die konkrete Zuordnung, der durch die Mehrzweckanlage verursachten ökologischen Aufwendungen zu einem einzelnen Produktionsprozess. Die belegungsunabhängigen Bestandteile stellen die Grundausrüstung dar, die die Produktion ermöglicht und unabhängig von den Anforderungen der einzelnen Prozesse

zur Verfügung stehen muss und werden daher zu gleichen Teilen allen Prozessen zugeschlagen, die im Betrachtungszeitraum in der Anlage betrieben werden. Die Aufwendungen der belegungsabhängigen Abschnitte werden hingegen im Betrachtungszeitraum nur den in ihnen betriebenen Prozessen zugeordnet.

Die in Abb. 4.3 vorgeschlagene Untergliederung zu den benötigten Daten erleichtert außerdem die Datenerfassung für die ökologische Bewertung. Alle übergeordneten Einheiten (Sicherheit, Verteilung, etc.) sind einzeln aufgeführt, um daran orientiert Schritt für Schritt die zugehörigen Anlagenbestandteile zuzuordnen und zu erfassen. So kann geprüft werden, ob in den Einheiten Datenlücken vorliegen, die eventuell durch Nutzung allgemeinerer Datensätze im ersten Schritt geschlossen werden können, z. B. für die Einheit MSR-Technik der ecoinvent Datensatz „electronics for control units“ (#550) für die Bereitstellung und „disposal, electronics for control units“ (#2053) für die Entsorgung. In Abb. 4.4 ist beispielhaft der typische Aufbau einer TAn in einer MZA mit Rohrleitungsverteilerstation dargestellt. Diese ist ausgestattet mit einer RWA als Hauptapparat (B2). Das dazugehörige Equipment umfasst an weiteren Behältern: Vorlagebehälter (I1), Kleinmengeneintrag (B1), festverrohrter Auffangbehälter (B3) und ein Auffangbehälter (I2), der als beweglicher Behälter in Form z. B. eines Intermediate Bulk Containers (IBC) ausgeführt sein kann. Außerdem sind für den Eintrag und Austrag in den Hauptapparat Pumpen (P2, P4) installiert. Hinzukommen ein Kondensator (K1), der an einem Kühlkreislauf, ausgeführt als Temperiermodul (M2) mit separater Pumpe (P3), angeschlossen ist sowie eine Vakuumpumpe (P5), angeschlossen an einen Sekundärkühlkreislauf mit einer weiteren Pumpe (P6). Ebenfalls über ein Temperiermodul mit Pumpe (P1) wird die Beheizung des Rührwerksapparates realisiert. Die Abluftströme aus dem Rührwerksreaktor werden durch Filter (F1, F2) der Abluftverbrennung zugeführt.

Der in Abb. 4.4 beispielhaft skizzierte Aufbau, zeigt das Hauptequipment, also Apparate, Behälter, Vorrichtungen (z. B. Filter) und Maschinen, ohne Instrumentierung. Nicht dargestellt sind die Verrohrungen, die MSR-Technik, Armaturen, Antriebe, etc. Für jeden einzelnen Bestandteil der TAn muss im Rahmen der ökologischen Bewertung der Lebenszyklus mit einbezogen werden – orientiert an den in Kapitel 2.5 vorgestellten Lebenszyklus einer Produktionsanlage. Für einen einzelnen Apparat oder Maschine sind lediglich die Lebenszyklusabschnitte Anlagenbau und Rückbau durch Installation und Deinstallation zu ersetzen. Wie bereits oben beschrieben, können die meisten Lebenswegabschnitte durch Datensätze beschrieben werden. Allerdings fehlen zu den meisten Bestandteilen der TAn und auch anderen zentralen Anlagenbestandteilen Datensätze bzgl. der Fertigung, da i. d. R. keine allgemeingültigen Datensätze für einzelne Apparatetypen zur Verfügung stehen bzw. das einzelne Equipment individuell gefertigt wird. Aktuell fehlen Untersuchungen, die eine allgemeingültige Abschätzung zulassen. Daher wird auf die im ILCD-Handbuch [30] vorgeschlagene Vorgehensweise zur Abschätzung der ökologischen Aufwendungen, wie in Kapitel 2.1 vorgestellt, zurückgegriffen. Dazu sind die verbauten Materialien sowie deren Massen und Ausführungen zu erfassen. Sämtliche durch die Herstellprozesse generierten Aufwendungen werden so indes nicht berücksichtigt, sodass die Aufwendungen unterschätzt werden. Dieser Lebenszyklusabschnitt ist jedoch gekennzeichnet durch hohe Energieaufwendungen, wie in Kapitel 2.5 gezeigt, sodass von einem relevanten Anteil an den ökologischen Auswirkungen über den Lebensweg auszugehen ist.

Aufgrund der Komplexität einer Mehrzweckanlage ist die Aufnahme der Rohdaten, also der einzelnen Bestandteile, mit einem hohen Zeitaufwand verbunden, der bei einer lückenhaften Datenlage beliebig groß ausfallen kann. Um die Erfassung der einzelnen Teilanlagen bzw. des zentralen Anlagenequipments mit einem überschaubaren Aufwand zu realisieren, wird eine Unterteilung in Haupt- und Nebenequipment vorgeschlagen. Zum Hauptequipment werden die Ausführungsart, das verbaute Material und dessen Menge erfasst. Als Hauptequipment gelten alle größeren Bestandteile, wie beispielhaft für eine Teilanlage in Abb. 4.4 dargestellt. Das Nebenequipment wird anschließend basierend auf diesen Daten abgeschätzt. Zum Nebenequipment zählen die in Abb. 4.4 nicht aufgeführten Elemente sowie die in der Darstellung angedeutete Verrohrung.

## 4 Produktionsprozesse im Mehrzweckanlagen

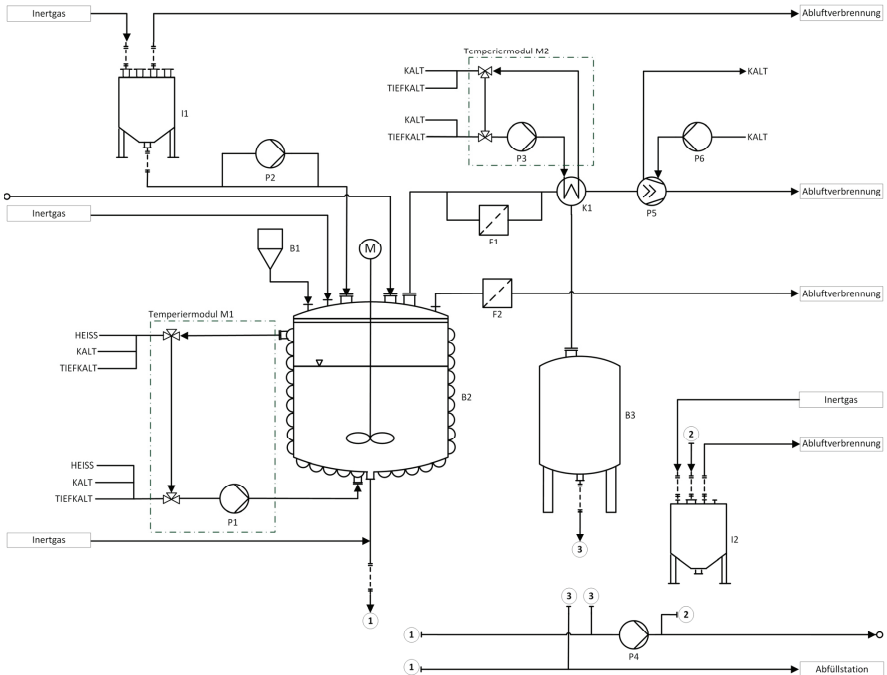


Abb. 4.4: Beispielhafte Darstellung zum Aufbau einer Teilanlage einer Mehrzweckanlage mit Rohrleitungsverteilung

Um die Materialien und verbauten Mengen zum Hauptequipment zu ermitteln, können verschiedene Quellen herangezogen werden. Grundsätzlich sind die benötigten Angaben zu Material und Gewicht der einzelnen Positionen in den Projektierungsunterlagen zu finden, die als erstrangige Quelle eingestuft werden. Vor allem aktuelle 3D-Planungsunterlagen zu einer bestehenden Anlage können Informationen sowohl zu Haupt- als auch Nebenequipment liefern, da in diesen auch exakte Rohrlängen sowie Anzahl und Typ von Armaturen etc. enthalten sind. Allerdings sind vor allem Mehrzweckanlagen, die schon länger betrieben werden, gekennzeichnet durch Anpassungsarbeiten, Austausch einzelner Apparate bzw. Equipment oder größeren Umbauarbeiten. Manchmal gehen damit verbundene Informationen oder Neuerungen in den Dokumentationen verloren. In diesem Fall muss auf andere Datenquellen zurückgegriffen werden, die nachfolgend kurz dargestellt sind.

### Interne Datenbank

Anlagendaten werden in Unternehmen meist in ERP-System (Enterprise Resource Planning) eingepflegt und stellen daher ebenfalls eine Quelle bzgl. des verbauten Equipments dar. Der Umfang der Eintragung, also Angaben zu Gewichten der einzelnen Positionen oder Materialien, ist dabei meist von den Vorgaben im Unternehmen bzw. dem Bearbeiter abhängig. Die Datenqualität kann daher sehr unterschiedlich ausfallen.

### Herstellerangaben

Vor allem bei Apparaten bzw. Standardequipment, also nicht individuell gefertigten Positionen, besteht die Chance, die benötigten Informationen direkt vom Hersteller oder Anbietern ähnlichen Equipments zu

beziehen. Dies ist allerdings häufig auf das aktuelle Sortiment beschränkt. Bei Sonderanfertigungen oder älteren Modellen sind diese Daten, wenn vorhanden, in den Herstellerdokumentationen zu finden.

### Rohrleitungs- und Instrumentenfließschema (R+I-Fließschema) mit Apparatliste

R+I-Fließschema liefern Informationen zum verbauten Equipment und über den Umfang der verbauten Instrumentierung. Außerdem sind zum Hauptequipment meist Informationen bzgl. des Volumens und des verbauten Materials enthalten. Basierend auf diesen Informationen können Abschätzungen hinsichtlich Materialmassen, z. B. anhand von Normen, vorgenommen werden. Zu den Rohren sind neben den Materialien (Rohrklassen), die Normdurchmesser aufgeführt, die u. a. Rückschlüsse auf die Wandstärken zu lassen. Anhand der R+I-Fließschema sind Abschätzungen in Bezug auf die verbauten Längen nicht möglich. Zusätzlich liefern, wenn vorhanden, sog. Apparatlisten einen Überblick zu dem verbauten Hauptequipment bzgl. Materialien, Apparategröße/-volumen, Betriebsfenster, etc.

### Abschätzung anhand von Normen

Normen können vor allem bei der Ermittlung von verbauten Materialmengen in Bezug auf einzelne Apparate unterstützen. So finden sich z. B. in der DIN 28018 [128] Angaben zu den Gewichten je m<sup>3</sup> Behälter oder in DIN 28180 [129] je laufendem Meter Stahlrohr für Wärmeübertrager (WÜ). In Verbindung mit den Angaben aus dem R+I-Fließschema können so erste Abschätzungen zum einzelnen Hauptequipment getroffen werden.

### Abschätzung durch Fachleute

Zusätzliche Begehungen der Anlage in Begleitung von den in der Anlage tätigen Betriebsingenieuren und Betriebspersonal stellen eine wichtige Quelle dar, vor allem bei der Schließung von Datenlücken. Die Erfahrungswerte und Kenntnisse der Mitarbeiter in den Anlagen und der Betriebsingenieure, die die Anlagen betreuen, sind im Hinblick auf die Datenqualität als wertvoll einzustufen.

Die Erfassung des Nebenequipments erfolgt im Rahmen dieses Ansatzes mittels eines Faktors, der die Komplexität der einzelnen TAN bzw. zentralen Anlagenbestandteile berücksichtigt. Mit Hilfe dieses Komplexitätsfaktors wird verhindert, dass die verbauten Kleinteile im Detail, wie z. B. Schraube oder Dichtung, erfasst werden müssen, da dies im Hinblick auf den damit verbundenen Aufwand nicht realisierbar ist. Der Faktor hängt unmittelbar mit dem Automatisierungsgrad, der Verrohrung und den an den TAN zur Verfügung stehenden Betriebsmittelschienen zusammen. In Tab. 4.4 ist dies beispielhaft für eine TAN dargestellt.

Für diesen Ansatz werden drei verschiedene Komplexitätsstufen vorgeschlagen: gering (1), mittel (2) und hohe (3) Komplexität. Die Ermittlung der Faktoren erfolgte auf Basis von Untersuchungen in Zusammenarbeit mit der Firma Merck KGaA, Darmstadt, Deutschland. Dazu wurden zwei TAN im Detail aufgenommen. Die Tab. 4.4 zeigt dies für eine dieser TAN. Neben den Hauptapparaten, Pumpen, etc. umfasst die Aufnahme die Anzahl und die Masse einzelner Rohrverbindungsstücke, Stutzen, Armaturen, etc. Anschließend erfolgte eine Zuordnung der einzelnen Teilanlagenbestandteile zu Haupt- und Nebenequipment.

Zusätzlich wurde eine weitere TAN in diesem Detaillierungsgrad aufgenommen. Basierend auf diesen Daten können zwei Komplexitätsgrade, die sich aus den Gesamtmassen von Haupt- und Nebenequipment ableiten, definiert und die in der Anlage verbauten TAN diesen Komplexitätsgraden zugeordnet werden. Dabei zeigte sich, dass ein dritter Komplexitätsgrad zur Unterscheidung notwendig ist. Die Zuordnung der TAN erfolgte auf Basis der Darstellung in den R+I-Fließschema bzw. der visuellen Abschätzung bei der Begehung der Mehrzweckanlage. Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass bei der rein optischen Darstellung der R+I-Fließschema nicht der „Schwärzegrad“ ausschlaggebend ist und der Detaillierungsgrad der Fließbilder berücksichtigt werden muss. Die Begehung bzw. die Einordnung durch einen Betriebsingenieur ist i. d. R. unver-

zichtbar. In Tab. 4.5 sind die ermittelten Faktoren, zugeordnet zu den verschiedenen Komplexitätsstufen, orientiert an hier als Beispiel fungierenden R+I-Fließschema, dargestellt.

Tab. 4.4: Beispielhafte Darstellung zu den zu erfassenden Massen des Haupt- und Nebenequipments einer TAN

Positionen der Teilanlage		Anzahl Positionen	Masse [kg]	$\Sigma$ Masse [kg]
<b>Hauptequipment</b>	Hauptapparat	1	2726	7979
	Behälter	1	50	
	Pumpe	1	50	
	Filter	4	200	
	Druckspeicher	1	50	
	Wärmeübertrager	1	853	
	Abscheider	1	50	
	Big-Bag-Station	1	2000	
Temperiermodul	1	2000	6001	
<b>Nebenequipment</b>	Verrohrung			4829
	Rohre	197,3 m		
	Komponenten (z. B. Flansche, Reduzierstücke)	19.204		
	Verkabelung			200
	Sicherheitsschrank	1	100	
MSR und Antriebe	80	872		

Die Faktoren für Stufe 1 und 2 wurden anhand der beiden im Detail erfassten TAN ermittelt, wobei in der Darstellung Tab. 4.4 der Komplexitätsfaktor 0,75 resultiert. Die Bestimmung des Komplexitätsfaktors 1,5 für die Stufe 3 erfolgte in Zusammenarbeit mit Projektingenieuren der Firma Merck KGaA, basierend auf Erfahrungswerten unter Berücksichtigung der vorliegenden Daten zu den Komplexitätsstufen 1 und 2. Für die Verwendung der Komplexitätsfaktoren gilt die Annahme, dass die Baufelder für einzelne TAN in einer Mehrzweckanlage ähnlich groß sind. Daraus leitet sich ab, dass die räumlichen Bedingungen sehr ähnlich sind und somit auch die Entfernungen zwischen den einzelnen Positionen in der Teilanlage. Vor diesem Hintergrund werden die ermittelten Komplexitätsfaktoren, die vorrangig im Hinblick auf die verbauten Massen einen Hinweis auf die Komplexität der Verrohrung liefern, als allgemeingültig angenommen und auf andere TAN übertragen.

Tab. 4.5: Komplexitätsfaktoren zur Ermittlung der verbauten Massen der Nebenequipment, beispielhaft anhand der R+I-Fließschema gezeigt, der den Umfang einzelner Teilanlage widerspiegelt

Komplexitätsstufe 1	Komplexitätsstufe 2	Komplexitätsstufe 3
Komplexitätsfaktor: <b>0,1</b>	Komplexitätsfaktor: <b>0,75</b>	Komplexitätsfaktor: <b>1,5</b>

Zur Ermittlung der verbauten Materialmassen des Nebenequipments  $m_{neq}$  wird die Gesamtmaterialmasse des Hauptequipments  $m_{heq}$  mit dem Komplexitätsfaktor  $f$  multipliziert (Gl. 4.1).

$$m_{neq} = f \cdot m_{heq} \tag{4.1}$$

Durch die Nutzung von Komplexitätsfaktoren zur Ermittlung der verbauten Massen im Nebenequipment kann keine konkrete Zuordnung der Materialien erfolgen, eine Angabe, die für die ökologische Bewer-

tung allerdings zwingend erforderlich ist. Als Bezugsmaterial für das Nebenequipment wird daher das im Hauptequipment der TAn vorrangig verbaute Material angenommen. Diese Annahme stützt sich auf die Tatsache, dass Rohrleitungen, die mit dem Produktgemisch in Berührung kommen, i. d. R. aus dem gleichen Werkstoff gefertigt werden wie die Hauptapparate selbst und die Verrohrung den mit Abstand größten Anteil an den Nebenequipment aufweist, siehe Tab. 4.4.

Basierend auf dem hier vorgeschlagenen Ansatz zur Erfassung der Daten einer Produktionsanlage im MPA- und MZA-Umfeld kann sichergestellt werden, dass die wesentlichen anlagenspezifischen Aspekte für eine ökologische Bewertung von Produktionsprozessen bzw. Produkten berücksichtigt werden. Durch Unterteilung der einzelnen TAn und zentralen Anlagenbestandteile in Haupt- und Nebenequipment und die Einführung eines Komplexitätsfaktors wird der Umfang der zu erfassenden Daten reduziert und damit das Handling deutlich vereinfacht. Die möglichen aufgeführten Quellen erheben nicht den Anspruch auf Vollständigkeit, sollen aber dennoch aufzeigen, welche Dokumente die Datenaufnahme unterstützen und mit welchen Ansätzen Datenlücken geschlossen werden können.

Zu den erfassten Materialien und Massen werden anschließend die ökologischen Aufwendungen für deren Bereitstellung und Entsorgung bzw. Recycling nach dem Anlagenrückbau ermittelt. Im nächsten Schritt müssen diese noch um Informationen zur Lebensdauer des einzelnen Equipments (Kapitel 4.2.2), zur Belegung der einzelnen TAn in dem jeweiligen Betrachtungszeitraum sowie die Anzahl der Prozesse, die in Summe in der MZA in dem Zeitraum betrieben werden (Kapitel 4.2.3), ergänzt werden. Aufbauend auf dieser so erhaltenen Datenbasis erfolgt anschließend die Zuordnung der ökologischen Aufwendungen zu den Produktionsprozessen bzw. Produkten.

### 4.2.2 Abschreibung ökologischer Aufwendungen

Die ökologische Bewertung von Produktionsprozessen, die in MZA betrieben werden, ist auf Grund der in dem Kapitel 4.1 beschriebenen Besonderheiten, bezogen auf den Aufbau und dem belegungsabhängigen und belegungsunabhängigen Betrieb, mit Herausforderungen verbunden. Die belegungsabhängigen TAn werden, bedingt durch die geforderte Prozesstopologie, der benötigten Kapazität und den frei verfügbaren TAn belegt. Wie bereits beschrieben, sind für das typische Produktportfolio, das in Mehrzweckanlagen gefertigt wird, kurze Lebenszyklen charakteristisch. In der Regel sind diese deutlich kürzer als die Lebensdauer der Apparate und des Equipments, welches in den TAn verbaut ist.

Aus diesem Grund orientiert sich der entwickelte Ansatz zur Berücksichtigung der ökologischen Aufwendungen von MZA an der steuerlichen Abschreibung von Anlagen – entgegen den Vorgaben in der Empfehlung der Europäischen Kommission [5]. Die Nutzungsdauer für die verschiedenen Apparate und Anlagen der Chemischen Industrie wird typenabhängig in den AfA (Absetzung für Abnutzung)-Tabellen des Bundesministeriums für Finanzen für einen Zeitraum zwischen fünf und fünfzehn Jahren [130] angenommen. Die Vorgaben dienen als Grundlage für die Ermittlung der jährlichen ökologischen Aufwendungen einzelner Apparate und Maschinen, die in den Tabellen als Anlagegüter (AG) bezeichnet werden. Bei der ökologischen Bewertung dienen bei fehlenden Daten zur Apparateherstellung, die in den Apparaten verbauten Materialart und -massen als Bezugsgrößen [30], daher ist der entwickelte, im Folgenden beschriebene Ansatz an diesen Größen orientiert. Der Begriff Anlagenbestandteile wird dabei auch im Rahmen der Abschreibung beibehalten.

Zunächst sind die einzelnen Anlagebestandteile zu erfassen sowie den einzelnen Positionen die Abschreibungsdauer und der Abschreibungssatz zuzuordnen. Anschließend werden die einzelnen Materialmassen der Anlagegüter (AG) mit dem vorgegebenen Abschreibungssatz über die angegebene Nutzungsdauer verteilt. Die so ermittelten ökologischen Aufwendungen werden auf die im Betrachtungsjahr in der Mehrzweckanlage produzierten Produkte allokiert.

#### 4 Produktionsprozesse im Mehrzweckanlagen

Um den zeitlichen Aufwand zur Ermittlung der jährlichen ökologischen Aufwendungen zu reduzieren, wird geprüft, ob eine Vereinheitlichung der Abschreibungsdauer und des Abschreibungssatzes möglich ist. Dazu wird der Einfluss der unterschiedlichen Nutzungsdauer und des Abschreibungssatzes der verschiedenen verbauten Apparate und Ausstattung orientiert an den verbauten Materialmassen, bezogen auf die gesamte Anlage untersucht. Anhand einer für den Bereich Spezialchemie typischen Mehrzweckanlage mit dem Umfang von 100 Teilanlagen sind ein repräsentativer Auszug von 65 Teilanlagen im Detail sowie die vorhandenen zentralen Anlagenbestandteile erfasst worden. Für die Untersuchungen sind diese den in den AfA-Tabellen [130] zugrunde gelegten Gruppierungen zugeordnet:

- AfA-Tabelle lfd. Nr. 2.1: Maschinen, Apparate und maschinelle Einrichtungen aller Art mit Arbeits- und Bedienungsbühnen (einschl. Vorrats- und Lagerbehälter im Produktionsbereich)
- AfA-Tabelle lfd. Nr. 2.2: Typische Tankanlagen (außerhalb des Produktionsbereichs)
- AfA-Tabelle lfd. Nr. 2.3: Verteilungsanlagen für chemische Produkte, Wasser, Dampf, Sole, Gas und Elektrizität

Die Gruppierungen berücksichtigen das bewegliche Anlagenvermögen bezogen auf die reine Produktion, d. h. ohne Werkzeuge und Geschäfts- bzw. Betriebsausstattungen sowie Fahrzeugen. Auf Basis des in den Gruppierungen vorgegebenen linearen Abschreibungssatzes  $p_{linear,AfA}$  ermittelten jährlichen Materialmassen  $m_{verb}$  können die jährliche Abschreibungsgröße in den einzelnen Gruppierungen und daraus resultierend die Gesamtabschreibungsgröße pro Jahr  $m_{p.a.,gesamt}$  (Gl. 4.2) berechnet werden.

$$m_{p.a.,gesamt} = \sum_i^{AG} (m_{verb} \cdot p_{linear,AfA})_i \quad (4.2)$$

mit  $i$  für

- linearer AfA-Satz 10 % (10 Jahre Nutzung)
- linearer AfA-Satz 5 % (20 Jahre Nutzung)
- linearer AfA-Satz 7 % (15 Jahre Nutzung)

In Tab. 4.6 ist die Ermittlung des jährlichen Abschreibungssatzes im Überblick zusammengefasst.

Tab. 4.6: Ermittlung der durchschnittlichen jährlichen Aufwendungen orientiert an den AfA-Tabellen der chemischen Industrie [130]

Lfd. Nr. AfA-Tabelle	Anlagengüter (AG)	AfA-Satz <sub>linear</sub> [%]	t [a]	n <sub>AG</sub> [-]	m <sub>verb</sub> [kg]	m <sub>p.a.</sub> [kg]	Anmerkungen
2.1	Maschinen, Apparate und maschinelle Einrichtungen aller Art mit Arbeits- und Bedienungsbühnen (einschließlich Vorrats- und Lagerbehälter im Produktionsbereich)	10	10	471	1.495.339	149.534	Aufgenommene Anzahl an TA: 65 (zentrale TA/ sonstige TA: 34/31)
				1003	3.183.626	318.363	Vorhandene Anzahl an TA: 100 (zentrale TA/ sonstige TA: 34/66)
2.2	Typische Tanklager (außerhalb Produktionsbereich)	5	20	30	306.200	15.310	vollständig erfasst
2.3	Verteilungsanlagen für chemische Produkte, Wasser, Dampf, Sole, Gas, Elektrizität	7	15	13	79.750	5.317	vollständig erfasst
Summe			10,5	1.046	3.569.576	338.989	
			(11,1)	(514)	(1.881.289)	(170.161)	
<b>Durchschnittliche Abschreibung p.a.</b>		<b>9,5%</b>	(9,0%)				

Die erfassten 65 TAn setzen sich zusammen aus 34 zentral genutzten TAn, wie z. B. Vakuumpumpstationen oder Abluftwäscher, und 31 sonstigen TAn, die für die Durchführung der einzelnen Grundoperationen der Prozesse zur Verfügung stehen, z. B. Rührwerksapparate, Zentrifugen oder Trockner. In Summe ergeben sich daraus 471 aufgenommene Anlagengüter, in denen in Summe 1.495 t Material verbaut sind.



Mit den erfassten 34 zentralen TAn sind diese vollständig dokumentiert; die sonstigen TAn stellen mit 31 von 65 vorhandenen knapp 48 % dar. Basierend auf den Daten erfolgte eine Abschätzung der verbauten Materialmassen und Anlagegüter der nicht erfassten 34 TAn. Daraus resultieren insgesamt für die untersuchte Mehrzweckanlage 1003 Anlagegüter mit einer Gesamtmasse von 3.183 t, die der laufenden Nr. 2.1 der AfA-Tabellen zuzuordnen sind.

Die laufende Nr. 2.2 umfasst das Tanklager, in dem die für die Produktion benötigten Chemikalien vorgehalten werden. Das Tanklager geht mit 30 Anlagegütern vollständig erfasst in die Betrachtung mit ein. Ebenfalls vollständig aufgenommen sind die Anlagegüter, die der laufenden Nr. 2.3 zugeordnet werden. Die 13 Verteilungsanlagen umfassen u. a. die zentrale Verrohrung aller in der Anlage zur Verfügung stehenden Betriebsstoffschienen, wie z. B. Dampf und Stickstoff, als auch die Produktverteiler, Abluft und Sicherheitseinrichtungen, wie Blow-Down-Systeme sowie die Hauptverteiler des Tanklagers.

Anhand der erfassten Daten lässt sich ablesen, dass die Anzahl der Anlagegüter ( $n_{AG}$ ) als auch die damit verbundenen Materialmassen nach der laufenden Nr. 2.1 der AfA-Tabellen in der Anlage den größten (für die ökologische Betrachtung) relevanten Anteil darstellt. Die gemittelten Abschreibungsgrößen ergeben eine durchschnittliche Abschreibungsdauer ( $t$ ) von 10,5 Jahren bei einem Abschreibungssatz (AFA-Satz<sub>linear</sub>) von 9,5 %. Basierend auf diesen Daten wird für die lineare Abschreibung ein pauschaler Abschreibungssatz von 10 % postuliert. Dies bedeutet im Hinblick auf die ökologischen Aufwendungen, dass in der Mehrzweckanlage hergestellte Produkte 10 % der ökologischen Aufwendungen für Bereitstellung und Entsorgung der Anlagegüter zu zuschlagen sind. Die Anlagegüter der Produktionsanlage werden so zunächst über zehn Jahre „ökologisch abgeschrieben“. Zu diesen ermittelten jährlichen ökologischen Aufwendungen kommen außerdem die ökologischen Aufwendungen, die durch die Instandhaltung verursacht werden. Die Wartung umfasst Maßnahmen, die zum Erhalt des Soll-Zustandes bzw. zur Verzögerung der Abnutzung durch chemische und/oder physikalische Vorgänge einzelner Anlagegüter durchgeführt werden (z. B. Schmierungen). Instandsetzungsmaßnahmen dienen zur Wiederherstellung der Funktion von fehlerhaften oder ausgefallenen Anlagegütern. [88]

Der Aufwand für diese Instandhaltung ändert sich i. d. R. über die Nutzungsphase. Schenk et al. [87] beschreibt die Ausfallrate in Abhängigkeit von der Betriebsdauer eines technischen Systems (Anlage oder Anlagenkomponente) idealisiert mittels einer „Badewannenkurve“, siehe Abb. 4.5 (a), die bereits 1962 von Baumgarten [131] veröffentlicht wurde. Die in diesem auf einer empirischen Beziehung basierendem Modell dargestellte Ausfallrate  $\lambda(t)$  spiegelt die Wahrscheinlichkeit wider, mit der eine funktionsfähige Anlage oder Anlagenkomponente zu einem bestimmten Zeitpunkt  $t$  ausfällt. Die Unterteilung in drei Phasen berücksichtigt dabei, dass über die Nutzungsphase die Einflussgrößen auf den Ausfall sich ändern.

In Phase I sind vor allem Konstruktionsfehler-, Werkstoff- oder Herstellungsfehler bzw. Bedienfehler oder Fehlfunktionen im Automatisierungssystem für einen Ausfall verantwortlich – von einer Abnutzung wird in dieser Phase nicht ausgegangen. Die Behebung dieser „Kinderkrankheiten“ führt zur Reduzierung der Ausfallrate. Phase II zeigt eine weitestgehend konstante Ausfallrate; die Ausfälle werden in dieser Nutzungsphase vorrangig durch äußere Einflüsse, wie z. B. Umweltbeanspruchung oder unzulässige Belastung, also zufallsbedingt Ausfälle verursacht. Der Anstieg der Ausfallrate in Phase III ist bedingt durch Abnutzungserscheinungen, verursacht durch z. B. Verschleiß oder Korrosion. [87, 132] Die Ermittlung der ökologischen Aufwendungen erfolgt orientiert an diesem Modell.

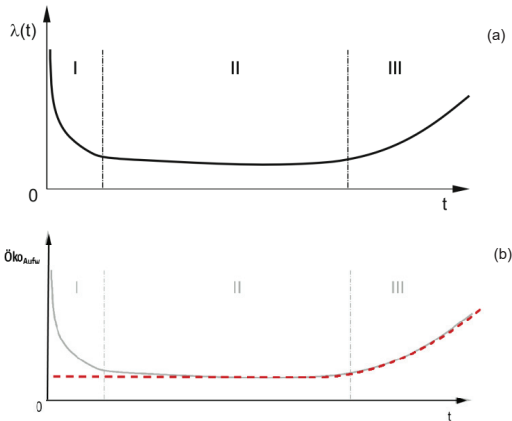


Abb. 4.5: (a) Idealisierter Verlauf der Ausfallrate in drei Phasen über die Lebensdauer/Betriebsdauer eines technischen Systems [87]; (b) Angenommener Verlauf (rot gestrichelte Linie) zur Ermittlung der ökologischen Aufwendungen für die Instandhaltung über die Nutzungsphase

Abb. 4.5 (b) zeigt den aus der Badewannenkurve abgeleiteten Ansatz zur Ermittlung der ökologischen Aufwendungen für die Instandhaltung. Der Verlauf der Badewannenkurve ist i. d. R. stark abhängig von den betrachteten Anlagenkomponenten [133]. So ordnet z. B. Baumgarten [131] der Phase I vorrangig empfindliche Komponenten, u. a. aus dem elektrischen und elektronischen Bereich zu, die beim ersten Einsatz ausfallen können; Palm [134] und Zhang [132] ordnen Maschineneinheiten zu, die aufgrund der Heterogenität von Werkstoffen sowie von Fertigungs- und Montagefehlern, früh ausfallen. Konkrete Daten für Phase I zur Höhe und Dauer der Ausfallrate typischer Anlagenkomponenten in der chemischen Industrie bzw. Pharma- und Spezialchemie liegen nicht vor. Auch die Länge und der Verlauf von Phase II und III sowie den in diesen Phasen auftretenden Instandhaltungsbedarf wird nach der Studie von Becker und Brinkmann [135] in diesen Industriezweigen vorrangig beeinflusst von Betriebsstunden, Alter der Anlagen, Betriebsmodus und Einsatzstoffen. Dies ist bedingt durch drei wesentliche Parameter:

1. Die *stofflichen Eigenschaften* der Produktgemische und die Reaktionen sowie die eingesetzten Lösemittel.
2. Die *Betriebsbedingungen*, wie Temperaturen und Drücke, als auch die Fahrweise der Anlage, wobei in diesem Zusammenhang vor allem Anschaltungen bzw. Wiederanfahren von Unternehmen der chemischen Industrie im Rahmen einer Studie [135] genannt wurden.
3. Das *eingesetzte Equipment* und die *Art der Prozesse*, die nach ConMoto [136] i. d. R. gekennzeichnet sind durch eine geringe technische Standardisierung sowie maßgeschneiderte und gefahrgeneigte Prozesse.

Keiner dieser drei Parameter hat einen signifikanten Einfluss auf die erste Phase der Ausfallrate. Daher wird zur Ermittlung der ökologischen Aufwendungen vereinfacht für diese Phase der gleiche Aufwand wie für Phase II angenommen. An der Annahme, dass mit zunehmender Betriebsdauer die Abnutzung der Anlagenkomponenten zunimmt, wird auch bei der Ermittlung des damit einhergehenden ökologischen Aufwands festgehalten.

Zur Festlegung der Werte für die Berücksichtigung der Instandhaltung bei der ökologischen Bewertung der Mehrzweckanlage orientiert sich der Ansatz ebenfalls an ökonomisch behafteten Kennzahlen. Die Tab. 4.7 zeigt verschiedene Studien und Schätzungen zur relativen Höhe von Instandhaltungskosten, zu-

geordnet zu den in den Untersuchungen betrachteten Branchen, wobei nicht in allen Quellen eine genaue Beschreibung zu den betrachteten Unternehmen vorliegt.

Tab. 4.7: Relative Höhe der Instandhaltungskosten in verschiedenen Branchen

Literatur	Instandhaltungs- kostenquote [%]	Instandhaltungs- kostenrate [%]	Branchen bzw. Industriezweige
dank+partner [140]		1,5 – 6,7	Chemische Industrie
März et al. 2014 [136]		2,1 – 9,1	Chemische und Pharmazeutische Industrie (inkl. anorganische Grundchemikalien, Petrochemikalien, Polymere, Silikone, Fein- und Spezialchemie, Wasch- und Körperpflegemittel, pharmazeutische Grundstoffe und Spezialitäten)
Schroll 2011 [141]	3,0 – 15,0		unbekannt
Becker und Brinkmann 2000 [135]		4,0	Chemische Industrie (inkl. Raffinerie und Pharmazie)
Warnecke 1992 [142]	3,0 – 10,0		unbekannt, komplexe Anlagen
Kastner und Dankl 1992 [143]		3,0 – 12,0	unbekannt
Kern 1992 [144]		10,0	Chemische Industrie
Männel 1990 [145]		5,0 – 15,0	unbekannt

In den aufgeführten Quellen sind entweder die Angaben zur Instandhaltungskostenquote oder Instandhaltungskostenrate angegeben. Die Kennzahlen sind definiert in der VDI-Richtlinie 2893 [137] und werden wie folgt ermittelt:

$$\text{Instandhaltungskostenquote} = \frac{\text{Instandhaltungskosten (gesamt)}}{\text{indizierten Anschaffungswert}} \quad (4.3)$$

$$\text{Instandhaltungskostenrate} = \frac{\text{Instandhaltungskosten (gesamt)}}{\text{Wiederbeschaffungswert}} \quad (4.4)$$

Die Instandhaltungskostenquote bezieht sich auf den indizierten Anschaffungswert, also den Wert der Anlagenkomponente im Jahr der Anschaffung verrechnet mit dem Index für Kostensteigerung des statistischen Bundesamtes für das betrachtete Jahr und beinhaltet ggf. auch die Montagekosten [138]. In der Instandhaltungskostenrate wird dagegen der Wiederbeschaffungswert zum Stichtag als Bezugsgröße, der auch technische Innovationen [139] berücksichtigt, angenommen. [137]

Beide Kennzahlen berücksichtigen die direkten, jedoch nicht die indirekten Instandhaltungskosten, wie z. B. Ausfallkosten. In den Quellen sind diese Bezeichnungen stellenweise noch nicht entsprechend der Definitionen verwendet. Eine Zuordnung erfolgte anhand der in den Quellen angegebenen Berechnungen bzw. Beschreibungen. Die Instandhaltungskostenquote in der Übersicht bewegt sich in einem Korridor von 3...15 %, die Instandhaltungskostenrate von 1,5...15 %. Für die Ermittlung des Anteils für die Instandhaltung der Produktionsanlage wurden lediglich die Zahlen zur Branche *Chemische Industrie* herangezogen. Der Mittelwert der zugehörigen Instandhaltungskennzahlen beträgt 5,4 % und wird nach Rundung in der Betrachtung mit 5 % für Phase I und II der Nutzungsdauer der einzelnen Anlagegüter angenommen. Um den im Badewannenmodell postulierten kontinuierlichen Anstieg des Instandhaltungsaufwandes mit zunehmender Betriebsdauer zu berücksichtigen (Abb. 4.5 (b)), wird im Rahmen der ökologischen Bewertung für Phase III ebenfalls ein Anstieg des ökologischen Aufwandes angerechnet. Dieser wird nach vollständiger Abschreibung des Anlagengutes für weitere fünf Jahre mit 2 % je Jahr Nutzungsdauer angenommen.

Der in Abb. 4.6 dargestellte daraus resultierende Verlauf, dient als Basis zur Ermittlung der jährlichen ökologischen Aufwendungen, die durch die Mehrzweckanlage verursacht werden. In dem entwickelten

Ansatz resultiert der ökologische Gesamtaufwand aus der linearen Abschreibung sowie der Instandsetzung und Wartung der einzelnen Anlagegüter in der Mehrzweckanlage über die Lebensdauer. Über die ersten zehn Jahre beträgt dieser konstant 15 % der gesamten ökologischen Aufwendungen, die mit der Bereitstellung und Entsorgung der Anlagegüter einhergehen. Nach zehn Jahren sind die Anlagegüter abgeschrieben, sodass der jährliche Aufwand auf die Instandhaltung reduziert wird. Über die folgenden Jahre wird der anrechenbare ökologische Aufwand, den die einzelnen Anlagegüter verursachen, nur noch durch die Instandhaltung hervorgerufen. Die damit verbundenen Aufwendungen steigen nach vollständiger Abschreibung jährlich um 2 % an. Nach 15 Jahren erreicht der ökologische Aufwand 15 % und damit den Stand der ersten zehn Jahre. Anschließend wird von einem konstanten Verlauf bzw. einer Neuanschaffung ausgegangen.

Diese Betrachtung müsste für jedes einzelne erfasste Anlagengut durchgeführt werden. Um den mit der Datenaufnahme bzgl. Anschaffungsdatum und Zuordnung des aktuellen Lebensjahrs (hier gleichgesetzt mit Nutzungsdauer) verbundenen Zeitaufwand möglichst zu minimieren, wird für die Ermittlung des ökologischen Aufwands der Anlagegüter in einer Mehrzweckanlage vereinfachend ein zeitlich konstanter Wert von 15 % p.a. angenommen. Diese 15 % berücksichtigen sowohl einen, aufgrund der vorliegenden Betriebs- und Prozessbedingungen möglichen, höheren Instandhaltungsaufwand als auch den schnelleren Verschleiß und damit verbunden eine frühzeitige Neubeschaffung von einzelnen Anlagegütern.

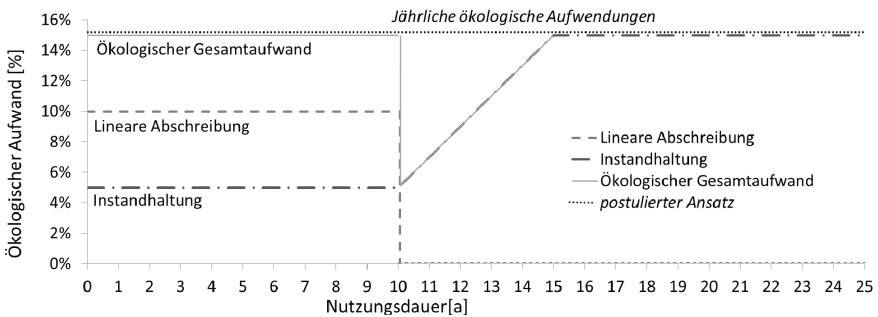


Abb. 4.6 Abschreibung der ökologischen Aufwendungen unter Berücksichtigung der Instandhaltung, angepasst nach [61]

Mit diesem Ansatz lassen sich die jährlichen ökologischen Aufwendungen einer Mehrzweckanlage, die mit der Bereitstellung und Entsorgung sowie der Instandhaltung einhergehen, ermitteln. Methodisch lässt sich dieser Ansatz bei unzureichender Datenlage auch auf Betrachtungen von anderen Anlagentypen, wie z. B. Monoproduktionsanlagen, Mehrproduktanlagen, etc., anwenden. Die ermittelten jährlichen ökologischen Aufwendungen gilt es anschließend für die ökologische Bewertung von Produktionsprozessen in Mehrzweckanlagen auf die im Betrachtungsjahr betriebenen Prozesse transparent und adäquat zu verteilen. Im folgenden Kapitel werden verschiedene Allokationsansätze vorgestellt, die diese Zuordnung ermöglichen.

### 4.2.3 Allokationsansätze für die Zuordnung von ökologischen Aufwendungen

Die folgenden vorgestellten Allokationsansätze beziehen sich auf die verschiedenen in der MZA verbauten TAn. Bei Belegung einer TAn durch einen Produktionsprozess werden i. d. R. alle zugehörigen Anlagenbestandteile beansprucht. Jede dieser TAn besteht aus verschiedenem Equipment, das wie in Kapitel 4.2.1 dargestellt, untergliedert ist in Haupt- und Nebenequipment. Wie zu Beginn des Kapitels 4 bereits beschrieben, belegen die Prozesse i. d. R. eine unterschiedliche Kombination an TAn, abhängig von gefor-

derer Topologie und laufendem Betrieb. Die ermittelten jährlichen ökologischen Aufwendungen sind opportun der Nutzung auf die einzelnen Produktionsprozesse umzulegen, um den Anteil für den einzelnen Prozess zu ermitteln.

Für diese Betrachtungen wurden vier Allokationsansätze in Bezug auf die einzelnen vom Prozess belegten TAN untersucht:

- nach Anzahl der die TAN belegenden Prozesse,
- nach Anzahl der Batchansätze der Prozesse in der TAN,
- nach Anzahl der Belegung der TAN je Batchansatz,
- und nach Dauer der Belegung der TAN je Batchansatz.

Die Ansätze unterscheiden sich im Detaillierungsgrades (DG) sowie dem damit einhergehenden benötigten Datenumfang, siehe Abb. 4.7. Mit zunehmenden untersuchten DG steigt der Datenumfang, der zur Ermittlung der ökologischen Aufwendungen für den einzelnen Prozess nötig ist.

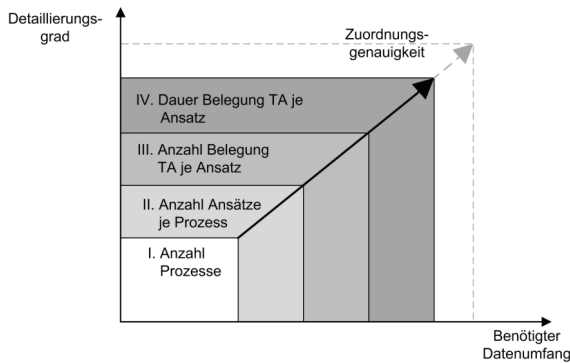


Abb. 4.7: Verschiedene Allokationsansätze mit Schwerpunkt auf dem Detaillierungsgrad der Aufwendungsverteilung [61]

Der einfachste Ansatz berücksichtigt die Anzahl der Prozesse  $N$ , welche die einzelne TAN benutzen. Die jährlichen ökologischen Aufwendungen dieser TAN  $EE_{WK, TAN(a)}$  werden auf die entsprechenden Prozesse gleichverteilt. Wurde beispielsweise eine TAN im Jahr von zwei verschiedenen Prozessen belegt, würde jedem Prozess die Hälfte des Aufwandes zugeschlagen. Der dem Produktionsprozess zugeordnete ökologische Aufwand, verursacht durch die Produktionsanlage ( $EE_{WK,A(a)}$ ) ergibt sich somit aus der Summe von der Prozessanzahl abhängigen Aufwände aller durch den Prozess belegten TAN  $Z$  (vgl. Gl. 4.5).

$$EE_{WK,A(a)} = \sum_i \left( \frac{EE_{WK,TAN(a)}}{N} \right)_i \quad (4.5)$$

Der nächst höhere DG berücksichtigt zusätzlich, wie viele Batchansätze  $Y$  in den einzelnen TAN erfolgen. Die hier betrachtete TAN wird z. B. mit insgesamt 12 Ansätzen belegt, vier davon durch Prozess 1, acht durch Prozess 2. Daher werden Prozess 1  $1/3$  und Prozess 2  $2/3$  der ökologischen Aufwendungen zugeordnet. Somit ermittelt sich der Aufwand für den einzelnen Prozess aus der Summe aller ökologischer Aufwendungen durch den Prozess belegten TAN in Abhängigkeit vom Anteil seiner Batches  $Y_p$  an der Summe der Batches in der TAN (vgl. Gl. 4.6).

$$EE_{WK,A(a)} = \sum_i \left( EE_{WK,TA(a)} \cdot \frac{Y_p}{\sum_{k=1}^N Y_k} \right) \quad (4.6)$$

Weiterhin können die Anzahl der Belegungen  $B_p$  einer TAN durch einen Prozess im Verlauf eines Batchansatzes berücksichtigt werden. Eine TAN kann in einer MZA innerhalb eines Produktionsprozesses mehrmals zum Einsatz kommen, z. B. zum Verdampfen eines leichtsiedenden Lösemittels aus einem Gemisch und zur Umkristallisation. Für das Beispiel würde sich dies wie folgt darstellen: Prozess 1 belegt im Verlauf eines Batchansatzes die betrachtete TAN dreimal, Prozess 2 dagegen nur zweimal. Insgesamt deckt die TAN somit 28 Belegungen ab. Die ökologischen Aufwendungen der TAN würden sich in diesem Fall zu 3/7 (12/28) auf Prozess 1 und 4/7 (16/28) auf Prozess 2 verteilen. Somit ermittelt sich der Aufwand für den einzelnen Prozess aus der Summe aller ökologischer Aufwendungen der durch den Prozess belegten TAN in Abhängigkeit vom Anteil seiner Batches  $Y_p$  und deren Belegungsanzahl  $B_p$  an der Summe aller Batches und deren Belegungshäufigkeit in der TAN (vgl. Gleichung 4.7).

$$EE_{WK,A(a)} = \sum_{i=1}^Z \left( EE_{WK,TA(a)} \cdot \frac{(Y_p \cdot B_p)}{\sum_{k=1}^N (Y_k \cdot B_k)} \right) \quad (4.7)$$

Der detaillierteste betrachtete Ansatz bezieht neben der Anzahl zusätzlich die Dauer  $T$  der einzelnen Belegungen durch einen Prozess mit ein. Da bestimmte Grundoperationen die TAN durchschnittlich deutlich länger belegen als andere, divergiert der Abnutzungsgrad. Angenommen die Belegungsdauern in obigem Beispiel betragen dabei je Batch 40 h, 24 h und 42 h für Prozess 1 sowie 20 h und 16 h je Batch für Prozess 2. Insgesamt ist die betrachtete TAN damit 712 Stunden belegt. Die ökologischen Aufwendungen der TAN verteilen sich zu 3/5 (424/712) auf Prozess 1 und 2/5 (288/712) auf Prozess 2. So ermittelt sich der ökologische Aufwand eines Prozesses somit aus der Summe aller ökologischer Aufwendungen der durch den Prozess belegten TAN in Abhängigkeit vom Anteil seiner Batches  $Y_p$ , deren Belegungsanzahl  $B_p$  und der jeweiligen Belegungsdauer  $BD$  an der Summe aller Batches, deren Belegungshäufigkeit und -dauer in der TAN (vgl. Gleichung 4.8).

$$EE_{WK,A(a)} = \sum_{i=1}^Z \left( EE_{WK,TA(a)} \cdot \frac{Y_p \cdot \sum_{j=1}^{B_p} BD_j}{\sum_{k=1}^N \left( Y_k \cdot \sum_{j=1}^{B_k} BD_j \right)} \right) \quad (4.8)$$

Diese vier entwickelten Allokationsansätze werden im folgenden Kapitel an einer seit mehreren Jahren im Betrieb befindlichen Mehrzweckanlage angewandt und der Einfluss des DG auf die Zuordnungsgenauigkeit untersucht. Ziel ist eine Quantifizierung der erreichbaren Zuordnungsgenauigkeit in Abhängigkeit dieser Datenbasis, wobei der höchste untersuchte DG für die Betrachtung als Benchmark definiert ist. Dies geschieht vor dem Hintergrund, dass für eine Anwendung ein handhabbarer Ansatz, vor allem in Bezug auf den notwendigen Datenumfang angestrebt wird.

In Bezug auf die zentralen Anlagenbestandteile sind keine entsprechenden Allokationen vorgesehen. Dies ist in der zwingenden Verfügbarkeit zum Betreiben des einzelnen Prozesses begründet. Ohne die Anlageninfrastruktur ist ein Betrieb nicht möglich. Aus diesem Grund werden diese jährlichen ökologischen Aufwendungen allen in dem Betrachtungsjahr betriebenen Prozessen zu gleichen Teilen zugeschlagen und entspricht dem ersten, der hier dargestellten DG.

## 4.3 Anwendungsbeispiel

Die Basis für die Untersuchungen stellt eine MZA der Firma Meck KGaA am Standort Darmstadt dar. In dieser Anlage werden Produktionsprozesse zur Herstellung von Spezialchemikalien betrieben. Benötigte Daten sowohl zur Anlage als auch zu den Prozessen und der Produktion wurden im Rahmen des Forschungsprojektes InnovA<sup>2</sup> [146] zur Verfügung gestellt.

### 4.3.1 Aufbau und Struktur der untersuchten Mehrzweckanlage

Bei der betrachteten Produktionsanlage handelt es sich um eine MZA mit Rohrverteilerstation. Dieser Aufbau ermöglicht die größtmögliche Strukturflexibilität [11], da die einzelnen TAN durch die Rohrverteilerstationen je nach geforderter Prozessstopologie verschaltet werden können, siehe Abb. 4.8.

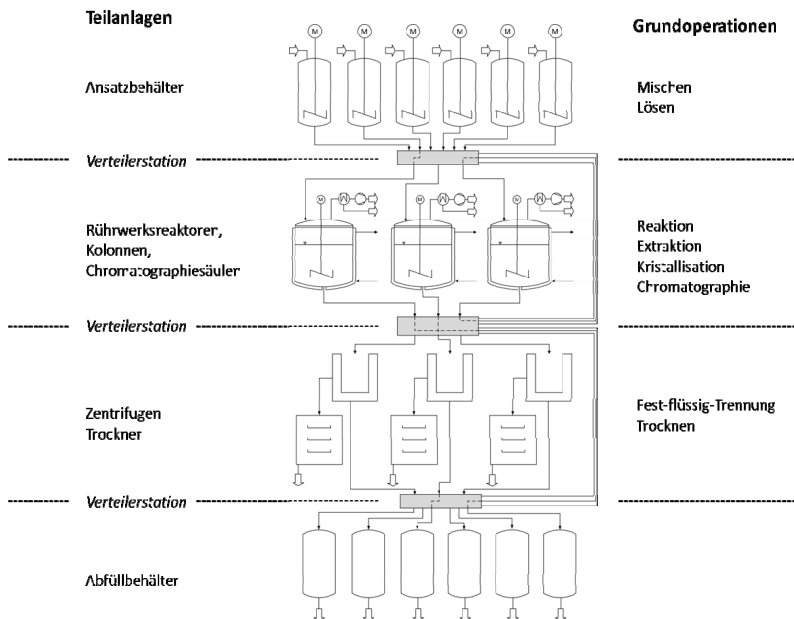


Abb. 4.8: Schematischer Aufbau der untersuchten Mehrzweckanlage

Die betrachtete Mehrzweckanlage ist vertikal in sechs Ebenen unterteilt, die je in neun Abschnitte gegliedert sind. Die Produktionsfläche beträgt insgesamt ca. 3950 m<sup>2</sup>. In jeder Ebene sind je zwei Rohrverteilerstationen verbaut, die die Verschaltung der Produktionsfelder innerhalb und zwischen den Ebenen ermöglichen. Die Produktionsfelder sind mit verschiedenen TAN belegt. In den oberen Ebenen sind Apparate angeordnet, in denen Grundoperationen betrieben werden, die die ersten verfahrenstechnischen Abschnitte eines Produktionsprozesses realisieren. Dazu gehören z. B. die Reaktion und das Lösen, i. d. R. gefolgt von Destillation und Kristallisation. In den mittleren Ebenen befinden sich vorrangig die TAN zur Fest/Flüssig-Trennung, wie z. B. Drucknutschen und Zentrifugen, in den unteren die Trocknung und Abfüllung. Dieser für MZA typische Aufbau (vgl. Abb. 4.8) ermöglicht u. a. den Übertrag zwischen den TAN mit Unterstützung der Schwerkraft. So werden die Produktionsprozesse durch Belegung der TAN von oben nach unten mit einem möglichst geringen Energieaufwand für den Wechsel der TAN betrieben.

Dieses Werk ist copyrightgeschützt und darf in keiner Form vervielfältigt werden noch an Dritte weitergegeben werden. Es gilt nur für den persönlichen Gebrauch.

In der in dieser Arbeit untersuchten MZA sind, wie in Tab. 4.6 angegeben, 100 TAN verbaut, von denen 34 den zentralen Elementen zugeordnet werden und zu den belegungsunabhängigen Abschnitten zählen. Hinzukommen 30 Behälter eines Tanklagers und 13 Rohrleitungsverteiler sowie die zentrale Verrohrung für die Betriebsstoffversorgung, die zugehörige MSR-Technik und die Sicherheitsvorrichtungen. Die verbleibenden 66 Teilanlagen zählen nach der Definition in Kapitel 4.2.1 zu den belegungsabhängigen Anlagenabschnitten. Alle zentralen Elemente der Mehrzweckanlage sind vollständig aufgenommen, die als belegungsabhängig deklarierten TAN mit 31 von 66 zu 47 % erfasst. Die Erfassung der verbauten Materialien und -massen erfolgt nach dem in Abb. 4.3 vorgestellten Ansatz mit Unterteilung der verbauten Apparate, Equipment, Verrohrung, MSR-Technik, etc. in Haupt- und Nebenequipment. Für die Berücksichtigung des Nebenequipments werden die vorgeschlagenen Komplexitätsfaktoren eingesetzt. Basierend auf den Daten zu den Materialien, verbauten Materialmassen und den Ausführungen der einzelnen Bestandteile erfolgt die Ermittlung der ökologischen Aufwendungen in den 18 verschiedenen WK der ReCiPe 2008 Methode, siehe dazu Tab. A2.1, im Anhang. In Abb. 4.9 ist die prozentuale Verteilung der ökologischen Aufwendungen, die durch die zentralen Elemente verursacht werden, in den einzelnen WK dargestellt.

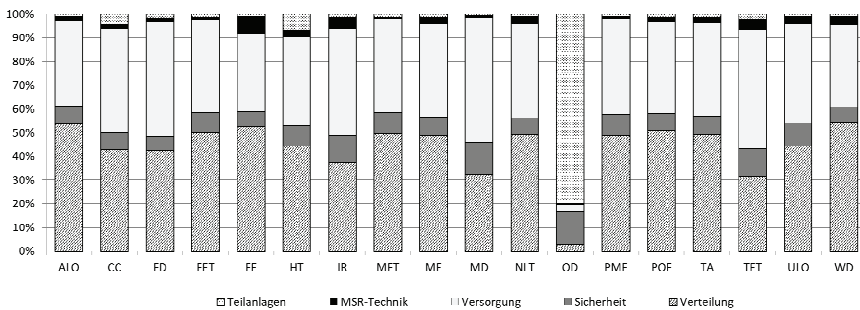


Abb. 4.9: Prozentuale Verteilung der ökologischen Aufwendungen der zentralen Elemente der MZA; die Bewertung erfolgt mittels Charakterisierungsmodellen der ReCiPe 2008 Methode [111].

Die Ergebnisse zeigen, dass in allen WK außer *Ozonabbau* (OD) vorrangig die zentralen Elemente, die der Versorgung und Verteilung zugeordnet sind (siehe Abb. 4.3), den größten Anteil an den ökologischen Aufwendungen aufweisen. Der Beitrag der Versorgung in den verschiedenen Wirkungskategorien befindet sich in einem Korridor von 35...53 %, der Beitrag der Verteilung im Korridor von 32...54 %. Mit Ausnahme der einen WK verursachen diese beiden Einheiten jeweils min. 1/3 der gesamten ökologischen Aufwendungen der zentralen Elemente in der betrachteten MZA. Sowohl der Anteil der MSR-Technik als auch der TAN schwankt in einer Bandbreite von 1...7 %. Die zentralen Elemente, die der Sicherheit zugeordnet sind, verursachen zwischen 6...13 % der Gesamtaufwendungen. Eine Ausnahme stellt die WK OD dar, in der die TAN mit 80 % den größten ökologischen Anteil ausmachen. Hingegen betragen die Anteile der zentralen Elemente zur Verteilung, Versorgung und die MSR-Technik in Summe 6 %. Die Sicherheitsausrüstung der MZA macht 14 % der Gesamtaufwendungen aus und liegt damit in der Größenordnung der anderen WK. Die signifikante Abweichung vom allgemein erkennbaren Trend in der WK OD resultiert vorrangig aus dem in der MZA verbauten Abluftwäscher.

In Abb. 4.10 sind die Anteile der verbauten Materialien des Hauptequipments und deren Anteil an den ökologischen Aufwendungen in der WK OD dargestellt. Die Gegenüberstellung der verbauten Materialien und den mit diesen Materialien verbundenen ökologischen Aufwendungen zeigt, dass vorrangig der verbaute fluorierte Kunststoff Perfluoralkoxy-Polymer einen sehr großen Einfluss ausübt. Trotz eines sehr geringen Anteils von ca. 1 % an den verbauten Materialmassen des Hauptequipments in der TAN



Abluftwäscher verursacht er beinahe 100 % ihrer ökologischen Auswirkungen in der WK OD. In der Anlage sind acht Abluftwäscher verbaut, mit einem dem hier gezeigten sehr ähnlichen Materialmix. In Summe resultieren aus diesen Anlagenbestandteilen knapp 80 % der Umweltwirkungen in der WK. Diese Untersuchung zeigt zum einen, dass die verbauten Materialien neben den verbauten Massen einen großen Einfluss auf den ökologischen Aufwand haben und zum anderen, dass die Erfassung allen Hauptequipments in vollem Umfang notwendig ist. Ein Abschneiden von Positionen mit kleineren Materialmassen kann in einzelnen WK zu einer starken Verzerrung bzw. zu einer Verfälschung der Ergebnisse insbesondere bei Sondermaterialien führen.

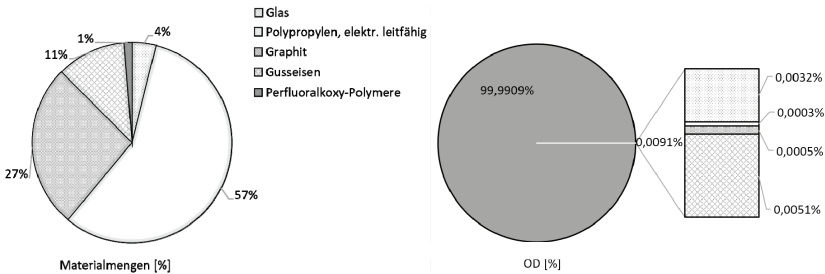


Abb. 4.10: Prozentualer Anteil der verbauten Materialien des Hauptequipments einer der aufgenommenen TAN Abluftwäscher (zentrales Element der MZA) und die prozentuale Verteilung der ökologischen Aufwendungen in der WK OD (ReCiPe 2008 Methode [111])

In Abb. 4.11 sind die erfassten 31 in der MZA als belegungsabhängig definierten TAN, unterteilt nach den in den TAN verbauten Hauptapparaten und deren Anteil an den ökologischen Aufwendungen, aufgeführt. Nachfolgend sind die fünf aus der Unterteilung resultierenden Hauptapparate aufgeführt.

- *Rührwerksapparate (RWA)* werden vorrangig eingesetzt für die Grundoperationen Reaktion, Mischen, Lösen, Destillation, Kristallisation und Extraktion. Die Apparategrößen variieren in der betrachteten MZA zwischen 0,6 m<sup>3</sup> und 4 m<sup>3</sup>, ebenfalls unterschiedlich sind die Behältermaterialien, die u. a. in Edelstahl, mit PTFE oder Emaille beschichtete Stahlbehälter oder Stähle mit einer Nickelbasislegierung ausgeführt sind. Ausgestattet sind die Apparate mit unterschiedlichen Rührwerken, wie Anker-, Propeller- oder Impellerrührer.
- *Zentrifugen* dienen der Fest/flüssig-Trennung und werden vorrangig zum Ende der Produktaufreinigung eingesetzt, meist unmittelbar vor der Trocknung. In der MZA sind unterschiedliche Apparateausführungen, wie z. B. Schälzentrifugen oder StülpfILTERZENTRIFUGEN, installiert. Die Zentrifugen variieren ebenfalls in der Größe und der Materialausführung.
- *Trockner* kommen i. d. R. am Ende der Prozesse zum Einsatz. Auch hier sind unterschiedliche Ausführungen in Form, wie z. B. Schaufel- oder Trommeltrockner, Material und Größe vorhanden.
- *Nutschen* dienen in der MZA vorrangig zur Abtrennung von Feststoffen aus Suspensionen, also ebenfalls zur Fest/flüssig-Trennung, und sind häufig der GO Kristallisation nachgeschaltet. Die Nutschen sind auf die NV der RWA abgestimmt, um das Volumen in einem übertragen zu können.
- *Chromatographiesäulen* werden eingesetzt, um verschiedene Verunreinigungen, die in geringen Mengen auftreten, abzutrennen. In der betrachteten MZA stehen vier baugleiche Säulen zur Verfügung, die sowohl in Größe als auch Material identisch ausgeführt sind.

#### 4 Produktionsprozesse im Mehrzweckanlagen

Die Darstellung zeigt, dass die RWA mit 42...79 % den größten Anteil der ökologischen Aufwendungen in allen betrachteten Wirkungskategorien ausmachen. Ebenfalls einen hohen Anteil bei der Betrachtung der aufgenommenen TAN weisen die Trockner mit 16...42 % auf. In der WK OD weisen die Zentrifugen 12 % Anteil auf, im Vergleich zu den anderen Wirkungskategorien eine um durchschnittlich 6 %-Punkte erhöhte Umweltwirkung. Der Anteil der Nutschen und Chromatographiesäulen liegt in allen WK unter 7 %.

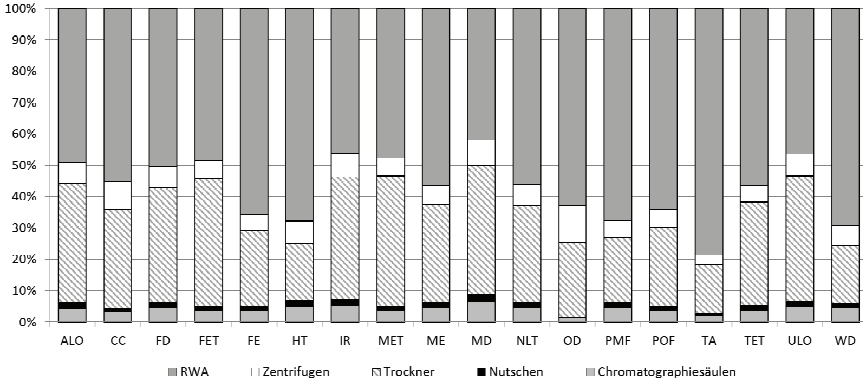


Abb. 4.11: Prozentuale Verteilung der ökologischen Aufwendungen der aufgenommenen 31 belegungsabhängigen TAN, orientiert an den verbauten Hauptapparatetypen; Bewertung mittels Charakterisierungsmodellen der ReCiPe 2008 Methode [111]

Da nicht alle belegungsabhängigen TAN erfasst sind, lässt sich kein allumfassendes Bild darstellen. Um trotzdem eine grobe Abschätzung bereitzustellen, können die durchschnittlichen ökologischen Aufwendungen der einzelnen TAN der fünf oben aufgeführten Hauptapparatetypen herangezogen werden. Durch Verrechnung dieser mit der jeweiligen in der MZA verbauten Anzahl wäre eine erste Abschätzung möglich. Die durchschnittlichen ökologischen Aufwendungen der fünf verschiedenen Hauptapparate in der WK Klimaänderung (CC) zeigt Abb. 4.12.

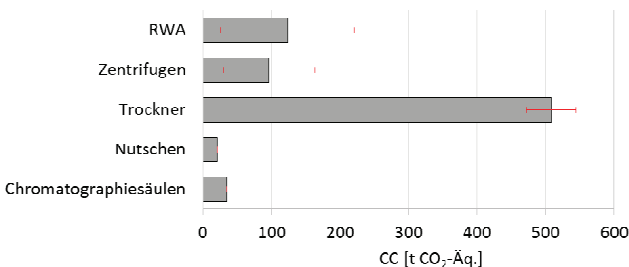


Abb. 4.12 Übersicht über die gemittelten ökologischen Aufwendungen der einzelnen TAN mit unterschiedlichen Hauptapparatetypen in der WK Klimaänderung (CC); Bewertung mittels Charakterisierungsmodellen der ReCiPe 2008 Methode [111]

Die Darstellung zeigt, dass die potentiellen ökologischen Aufwendungen, die mit der Bereitstellung und Entsorgung der Trockner verbunden sind, ca. 500 t CO<sub>2</sub>-Äq. betragen. Die Umweltwirkungen liegen damit um mehr als 40 % höher als die Mittelwerte der TAN mit anderen Hauptapparatetypen. Sowohl die aufgenommenen Chromatographiesäulen als auch die Nutschen verursachen im Vergleich mit 35 bzw.

21 t CO<sub>2</sub>-Äq. deutlich geringere Aufwendungen. Die RWA und Zentrifugen weisen im Mittel ökologische Aufwendungen von 128 bzw. 96 t CO<sub>2</sub>-Äq. auf. Sowohl die Angaben zu den TAN mit RWA als auch Zentrifugen als Hauptapparat zeigen hohe Standardabweichungen mit Werten von ± 70 bzw. 72 %. Die Abweichungen bei den Zentrifugen könnten aus der geringen Anzahl an aufgenommenen TAN resultieren bzw. dem Charakter der MZA, dass verschiedene Ausführungen vorgehalten werden, die sich in Komplexität, Größe und Material unterscheiden – Faktoren, die einen unmittelbaren Einfluss auf die ökologische Bewertung der TAN ausüben. Deutlich geringere Schwankungen mit einer Standardabweichung von 7 % zeigen die aufgenommenen Trockner. Dies ist zum einen darauf zurückzuführen, dass die in der MZA verbauten Trockner allgemein einen hohen Komplexitätsgrad besitzen und zum anderen, dass zwei der drei aufgenommenen TAN baugleich sind und die dritte zwar eine andere Bauform darstellt, allerdings das Material und das Nennvolumen identisch sind. Die vier aufgenommenen Chromatographiesäulen weisen hingegen keine Standardabweichung auf, da diese TAN identisch sind und diesen TAN-Typ in der Anlage auch vollständig abbilden. Eine sehr geringe Standardabweichung von knapp 0,5 % zeigen die Nutschen. Dies liegt vorrangig daran, dass die Hauptapparate sehr ähnlich sind und die Komplexitäten der aufgenommenen TAN der Stufe 1 zugeordnet sind, sodass die Abweichungen in der Verrohrung etc. nicht stark ins Gewicht fallen. Die dargestellten Standardabweichungen in der WK CC zeigen für die TAN-Typen Chromatographiesäulen, Nutschen, Trockner und Zentrifugen in den anderen WK ähnliche Werte. Für die RWA schwanken die Standardabweichungen allerdings sehr stark mit Werten zwischen 54...292 %, siehe Abb. A2.1 im Anhang.

Eine detailliertere Betrachtung der aufgenommenen 18 TAN mit einem RWA als Hauptapparat (HA), sortiert nach den zugeordneten Komplexitätsstufen, zeigt die deutlichen Abweichungen zwischen den ökologischen Aufwendungen der einzelnen TAN, siehe Abb. 4.13. Die auf der Sekundärachse (rechts) aufgetragenen verbauten Materialmassen berücksichtigen sowohl das Hauptequipment, als auch das über die Komplexitätsfaktoren ermittelte Nebenequipment (siehe Kapitel 4.2.1). Im Vergleich sind die Mittelwerte der verbauten Materialmassen in den drei Komplexitätsstufen dargestellt.

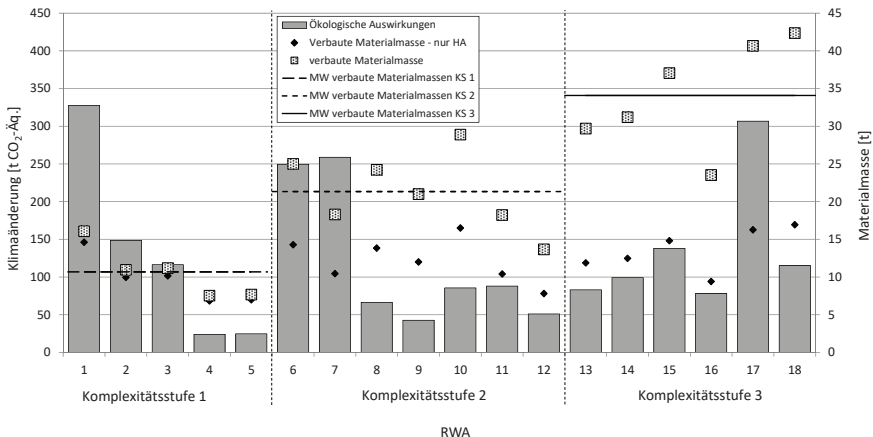


Abb. 4.13: Übersicht über die ökologischen Aufwendungen der aufgenommenen TAN mit RWA als Hauptapparat (HA) in der WK Klimaänderung, Bewertung mittels Charakterisierungsmodellen der ReCiPe 2008 Methode [111], mit Zuordnung der in der TAN verbauten Materialmenge sortiert nach den drei Komplexitätsstufen

In der graphischen Darstellung ist ein deutlicher Zusammenhang zwischen den Komplexitätsstufen und den verbauten Materialmassen erkennbar. Je komplexer die betrachtete TAN, desto größer ist im Mittel

die verbaute Masse an Material. Die Abweichungen der Materialmassen zum Mittelwert zeigen eine Schwankungsbreite von -36 % ... +51 %, wobei die TAn der Komplexitätsstufe 3 mit Werten zwischen -31 % ... +24 % im Vergleich zur Komplexitätsstufe 1 mit -30 % ... +51 % geringere Abweichungen aufweist. Die Komplexitätsstufe 2 ordnet sich zwischen Stufe 1 und Stufe 3 ein. Außerdem zeigt die Auswertung, dass einzelne TAn aufgrund ihrer Ausstattung mit höheren Aufwendungen belastet sind als andere. Die durchschnittliche Menge an t CO<sub>2</sub>-Äq. je verbauten Tonne Material ist bei den TAn 1, 2 und 3 (Komplexitätsstufe 1) sowie den TAn 6, 7 (Komplexitätsstufe 2) und TAn 17 (Komplexitätsstufe 3) im Vergleich zu den übrigen TAn deutlich erhöht. Dies ist bei den TAn 1, 2, 3, 6 und 7 vorrangig auf die NV und die in den TAn verbauten PTFE-Pumpen zurückzuführen, deren ökologische Auswirkungen wie bereits gezeigt einen sehr großen Anteil haben. Diese Pumpenart besteht zum großen Teil aus fluoriertem Kunststoff und wird vorrangig beim Einsatz stark korrosiver Stoffe eingesetzt. Fluorierte Kunststoffe wie Polytetrafluorethylen (PTFE) haben im Vergleich z. B. zu Chromstahl eine um 40.000-fach höhere Wirkung auf den Ozonabbau (ReCiPe 2008, ecoinvent v2.2). Neben diesen Pumpen befinden sich diese Kunststoffe außerdem in den Beschichtungen einzelner Apparate. In der TAn 17 sind ebenfalls PTFE-Pumpen verbaut. Die TAn ist hingegen deutlich kleiner, besteht jedoch zum größten Teil aus dem mit hohem ökologischem Einfluss verbundenen Sonderwerkstoff Hastelloy®.

Zwischen den Komplexitätsfaktoren und verbauten Materialmassen kann auf Basis der untersuchten TAn in Bezug auf die ökologischen Aufwendungen einer RWA-TAn keine allgemeingültige Aussage getroffen werden. Die Bildung von Durchschnittswerten sowohl in den einzelnen Komplexitätsstufen als auch über alle TAn ist aufgrund der Abweichungen nicht belastbar. Bei der hier betrachteten MZA sind keine allgemeingültigen Aussagen möglich, da auch TAn gleicher Art aufgrund der Unterschiede in verbauten Materialmassen, Komplexität und Hauptapparatetyp sehr unterschiedliche ökologische Aufwendungen aufweisen. Die Ergebnisse der Schwerpunktanalysen zeigen, dass eine möglichst genaue Aufnahme der Produktionsanlage für die ökologische Bewertung von Produktionsprozessen in MZA erforderlich ist.

Die Tatsache, dass einzelne Prozesse aufgrund der Einsatzstoffe nur in bestimmten TAn betrieben werden können, zeigt in Anbetracht der Ergebnisse aus den Schwerpunktanalysen die Notwendigkeit einer genauen Zuordnung der ökologischen Aufwendungen zu den einzelnen Produktionsprozessen. Der in Kapitel 4.2 vorgestellte Ansatz ermöglicht es, diese Aspekte zu berücksichtigen. Aus den ökologischen Aufwendungen, die aus der Bereitstellung und Entsorgung der betrachteten MZA resultieren sowie den durch die Instandhaltung hinzukommenden, sind die jährlichen Aufwendungen nach dem in Kapitel 4.2.2 beschriebenen Vorgehen zu ermitteln. Diese gilt es, auf die in dem betrachteten Jahr in der MZA betriebenen Prozesse zu allokiieren. Im nachfolgenden Kapitel ist dies demonstriert.

### 4.3.2 Zuordnung der ökologischen Aufwendungen nach verschiedenen Allokationsansätzen

Die Allokationsansätze werden anhand des Produktionsjahres 2011 getestet und evaluiert. In Tab. 4.8 sind die für die Betrachtung relevanten Eckdaten wie belegte TAn, Anzahl Batches, Häufigkeit der Belegung und Dauer der Belegung, siehe Kap. 4.2.3, zusammengestellt.

Die Produktion umfasst 50 verschiedene Produktionsprozesse mit insgesamt 730 Batchansätzen. Für die Untersuchungen werden 14 dieser Prozesse berücksichtigt, die in Summe 216 Batchansätze umfassen und damit ca. 30 % der Produktion darstellen. Zu jedem dieser Produktionsprozesse werden neben der Anzahl der Batches, die belegten Teilanlagen sowie die Häufigkeit und Dauer der Belegung erfasst. Nachfolgend ist dies beispielhaft am Produktionsprozess P4 (siehe Tab. 4.8) erläutert: Der Prozess P4 belegt je Batchansatz die Teilanlagen TAn 18 vier und die TAn 23 ein Mal.

Tab. 4.8: Belegung der TAn in der untersuchten MZA durch die betrachteten Produktionsprozesse, Jahr 2011

betrachtete Prozesse	Produktion 2011														Σ	Σ	
	P 1	P 2	P 3	P 4	P 5	P 6	P 7	P 8	P 9	P 10	P 11	P 12	P 13	P 14	Stichprobe	Produktion	
Anzahl Batches	15	2	3	3	67	12	6	22	12	21	29	16	5	3	216	730	
TA 1	1 14						1 14								21 302	75 1,080	
TA 2	1 14						1 14								21 302	75 1,080	
TA 3	1 14						1 14								21 302	75 1,080	
TA 4	1 14						1 14								21 302	75 1,080	
TA 5						1 2									12 24	43 86	
TA 6	2 4						4 8								54 108	193 386	
TA 7	2 4						4 8								54 108	193 386	
TA 8		5 13						3 7	4 13			5 15		8 46	228 712	814 2,542	
TA 9			6 38										1 6		23 142	82 507	
TA 10	3 26		2 15												51 432	182 1,544	
TA 11	2 20														30 304	107 1,084	
TA 12	1 13														15 195	54 696	
TA 13		2 13	7 40												25 146	89 521	
TA 14													4 17		20 86	71 307	
TA 15	4 40														60 607	214 2,169	
TA 16							8 51								48 308	171 1,102	
TA 17						4 12				5 14					153 438	546 1,564	
TA 18				4 37	5 18						3 13				434 1,674	1,037 4,000	
TA 19						2 8				4 24					108 593	386 2,118	
TA 20	2 11														30 158	107 564	
TA 21	3 11	4 31													53 226	189 808	
TA 22		5 15						5 15	6 30			2 13		5 20	239 981	854 3,505	
TA 23	2 11			1 5											33 174	118 620	
TA 24							2 11								12 63	43 225	
TA 25										2 7					58 211	207 752	
TA 26												1 5		1 5	19 100	68 357	
TA 27		1 5													2 11	7 38	
TA 28	4 59														1 15	63 929	225 3,319
TA 29							1 15								6 89	21 316	
TA 30		1 15										1 15			18 266	64 948	
TA 31	1 5							1 5							37 189	132 675	

Anzahl Belegungen je Batch [-]
Dauer Belegung je Batch [h]

Die Dauer der Belegung in der TAn 18 beträgt je Batch in Summe 37 h, in der TAn 23 insgesamt 5 h. Von dem Produktionsprozess P4 wurden im betrachteten Jahr drei Ansätze (Anzahl Batches) betrieben. So ergibt sich für den Produktionsprozess P4 für das Jahr 2011 eine Gesamtnutzung der TAn 18 von zwölf Belegungen mit einer Dauer von 111 h. Für die TAn 23 resultieren bezogen auf den P4 eine Anzahl der Belegungen von drei bei einer Dauer von 15 h. Basierend auf den Daten der Beispielprozesse erfolgt die Ermittlung der Belegungsanzahl und die Gesamtdauer der Belegungen in Betriebsstunden der einzelnen Teilanlagen durch die 14 Prozesse.

Die Belegungsdauer der TAn ist vorrangig abhängig von den betriebenen GO. Für das Betrachtungsjahr wird die Belegungsdauer der verschiedenen GO aller in dem Jahr betriebenen Prozesse aufgenommen. Anhand dieser Daten wird der durchschnittliche Zeitbedarf für die verschiedenen GO ermittelt. Diese Angaben werden in Zeiteinheiten überführt und sind in Abb. 4.14 für die typischen GO der Produktion in der MZA dargestellt. Ebenfalls aufgeführt ist der Anteil der einzelnen GO an den Prozessen im Betrachtungsjahr.

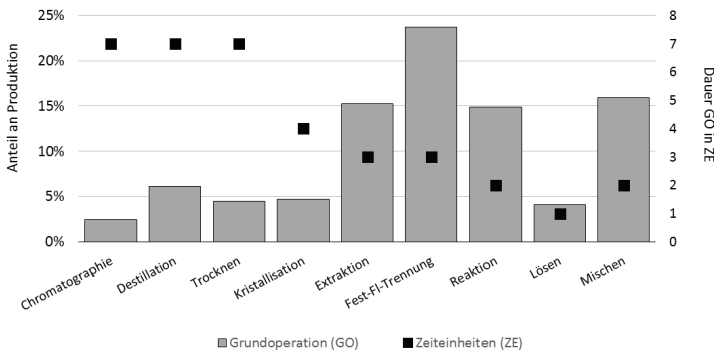


Abb. 4.14: Prozentualer Anteil der verschiedenen Grundoperationen an den Produktionsprozessen der Stichprobe und ihre jeweilige Dauer, angegeben in Zeiteinheiten

Die Daten zeigen, dass der Anteil der GO Chromatographie, Destillation und Trocknung, die die TAn am längsten belegen, mit in Summe knapp 13 % eher gering ist. Den größten Anteil an der Produktion mit etwa 44 % haben die GO Kristallisation, Extraktion und Fest-flüssig-Trennung bei einer mittleren Zeitdauer im Korridor von  $4 \leq x \leq 8$  Zeiteinheiten. Die verbleibenden 43 % in der Produktion werden durch GO mit einer kürzeren Betriebsdauer von  $x \leq 4$  ZE belegt.

Unter Berücksichtigung der Produktionsprozesse P5 und P11 wird so u. a. für die TAn 18 die Gesamtnutzung im Rahmen der Stichprobe ermittelt. Die Anzahl der Belegungen durch die 14 Produktionsprozesse beträgt 434 bei einer Belegungsdauer von 1.674 h. Basierend auf diesen Daten wird auf die Gesamtnutzung der durch die 14 Produktionsprozesse belegten 31 TAn geschlossen. Dabei wird angenommen, dass

- die festgelegten 14 Prozesse mit den Daten zu Belegung der TAn und Dauer der Belegung durch die einzelnen GO repräsentativ für die Produktion 2011 sind.
- die maximale Belegungsdauer der einzelnen TAn 4000 h beträgt. Diese Stundenanzahl wird als Obergrenze festgelegt und damit auch die Belegungsanzahl entsprechend angepasst. Einige Prozesse der Stichprobe wurden im Betrachtungsjahr 2011 deutlich häufiger in der Mehrzweckanlage betrieben (z. B. Prozess P5) und belegten vorrangig nur eine oder zwei TAn, sodass diese für andere Prozesse nicht zur Verfügung standen. Durch die Deckelung wird dies berücksichtigt.

- die Reinigung der TAn, die nach jeder betriebenen GO erfolgt, vom zeitlichen Umfang identisch ist und somit sich proportional zu den Belegungsdauern verhält. Diese Annahme basiert auf der Tatsache, dass die Reinigung der TAn einem Standard-Reinigungsprotokoll unterliegt, das unabhängig von Art und Dauer der Belegung ausgeführt wird. Sollte eine TAn nach dem Betrieb einer GO nicht gereinigt werden, da in der Belegung die nächste GO in derselben Apparatur erfolgt, wird dies in dieser Aufstellung nicht berücksichtigt.

So ergibt sich für die hier als Beispiel aufgeführte TAn 18 eine Gesamtbelegungsdauer von 4000 h bei einer Belegungsanzahl von 1.037. Die in Tab. 4.8 gezeigten Daten repräsentieren die Basis für die Anwendung der in Kapitel 4.2.3. beschriebenen Allokationsansätze zur Verteilung der ermittelten ökologischen Aufwendungen.

In der Abb. 4.15 ist die Anwendung der Allokationsansätze für die Zuordnung der ökologischen Aufwendungen zu den 14 Prozessen dargestellt. Gezeigt sind die vier verschiedenen Detaillierungsgrade (DG), die den belegungsabhängigen Anteil abbilden sowie die zentralen Elemente (ZE), die den belegungsunabhängigen Anlagenteil repräsentieren. Die Bewertung erfolgt mittels Modelle der ReCiPe 2008 Methode [111], gezeigt sind hier auszugsweise die WK *Terrestrische Versauerung* (TA) und *Überdünnung Frischwasser* (FE).

In den beiden dargestellten WK wird deutlich, dass die Prozesse P1, P6, P7, P10 und P11 die höchsten Anteile an den Gesamtaufwendungen zugeordnet bekommen. Diese Tendenz zeigt sich mit wenigen Ausnahmen auch in den anderen untersuchten WK. Die zugeordneten Auswirkungen weisen allerdings keinen einheitlichen Trend auf – der direkte Vergleich zeigt für P1 und P10 in der WK FE die höchsten zugeordneten Aufwendungen. In der WK TA sind die Umweltwirkungen des P1 allerdings in der Größenordnung des P7 angesiedelt und damit für alle DG deutlich unter denen von P6 und P10, die in dieser WK die höchsten Auswirkungen repräsentieren. Die unterschiedlichen Zuordnungen in den WK können unmittelbar zurückgeführt werden auf die Schwerpunkte der unterschiedlichen Umweltproblemfelder. Einzelne Materialien und die damit verbundenen Elementarflüsse werden, bedingt durch die Charakterisierungsmodelle und den dazugehörigen Charakterisierungsfaktoren, unterschiedlich gewichtet, siehe Tab. 4.3.

Deutlich sind ebenfalls die Abweichungen der berechneten ökologischen Aufwendungen abhängig von den einzelnen DG. Den Prozessen P2, P4, P6, P7 und P11 sowie P14 werden bei der Anwendung des DG I, im Vergleich zu allen betrachteten DG, höhere ökologische Aufwendungen zugeschlagen. Genau gegenläufig verhält sich dies für die Prozesse P1, P5, P8, P9 und P10 sowie P12. Bei diesen Prozessen werden durch den DG I die geringsten ökologischen Aufwendungen zugeordnet. Bei diesen Prozessen sind die durch Anwendung des DG III und IV ermittelten ökologischen Aufwendungen i. d. R. höher.

Die Unterschiede in den einzelnen DG resultieren aus der Genauigkeit der Zuordnung. Dies wird nachfolgend beispielhaft für die Prozesse P4, P8 und P9 sowie P10 zu den abgebildeten WK im direkten Vergleich mit der Aufstellung in Tab. 4.8 im Detail erläutert: Dem Prozess P4 werden bei der Allokation nach dem DG I deutlich mehr ökologische Aufwendungen zugeschlagen, als bei der Anwendung der anderen drei untersuchten DG. Die Übersicht in Tab. 4.8 zeigt, dass dieser mit TAn 18 und TAn 23 lediglich zwei TAn belegt. Daher sind die ökologischen Aufwendungen im Vergleich zu anderen Prozessen, z. B. P1 mit 15 TAn, deutlich geringer. Da in der TAn 23 lediglich ein weiterer der untersuchten Prozesse (P1) und in der TAn 18 zwei weitere Prozesse (P5 und P11) betrieben werden, erhält der P4 allerdings einen höheren Gesamtanteil an den beiden Teilanlagen zugeordnet als z. B. P2 von der TAn 8. Bezogen auf die Gesamtzahl von 50 Prozessen wird davon ausgegangen, dass sieben Prozesse die TAn 23 und elf Prozesse die TAn18 belegen. Im Vergleich dazu werden in der TAn 8 neben dem P2 vier weitere Prozesse der Stichprobe betrieben, sodass von einer Belegung durch 18 Prozesse ausgegangen wird, auf denen

die jährlichen ökologischen Aufwendungen der TAN 8 zu allokierten sind. Im direkten Vergleich des P4 mit P10, der ebenfalls nur zwei TAN belegt, sind die dem P10 zugeordneten ökologischen Aufwendungen deutlich höher, obwohl für beide TAN ebenfalls von einer Nutzung durch elf Prozesse im Betrachtungs-jahr ausgegangen wird. Hier kommen sowohl die Komplexitäten als auch die verbauten Materialien in den TAN zum Tragen. Die von dem P4 belegten TAN sind gekennzeichnet durch eine mittlere und hohe Komplexität mit einem geringen Anteil an Sonderwerkstoffen. Dahingegen sind sowohl die durch P10 belegten TAN 17, als auch TAN 19 durch eine hohe Komplexität, Sonderwerkstoffe und Beschichtungen charakterisiert. Bereits bei der Verwendung des DG I zeigt sich also, dass Produktionsprozesse in MZA, die eine gesonderte TAN-Gestaltung verlangen, den damit verbundenen ökologischen Mehraufwand spezifisch zugeordnet bekommen.

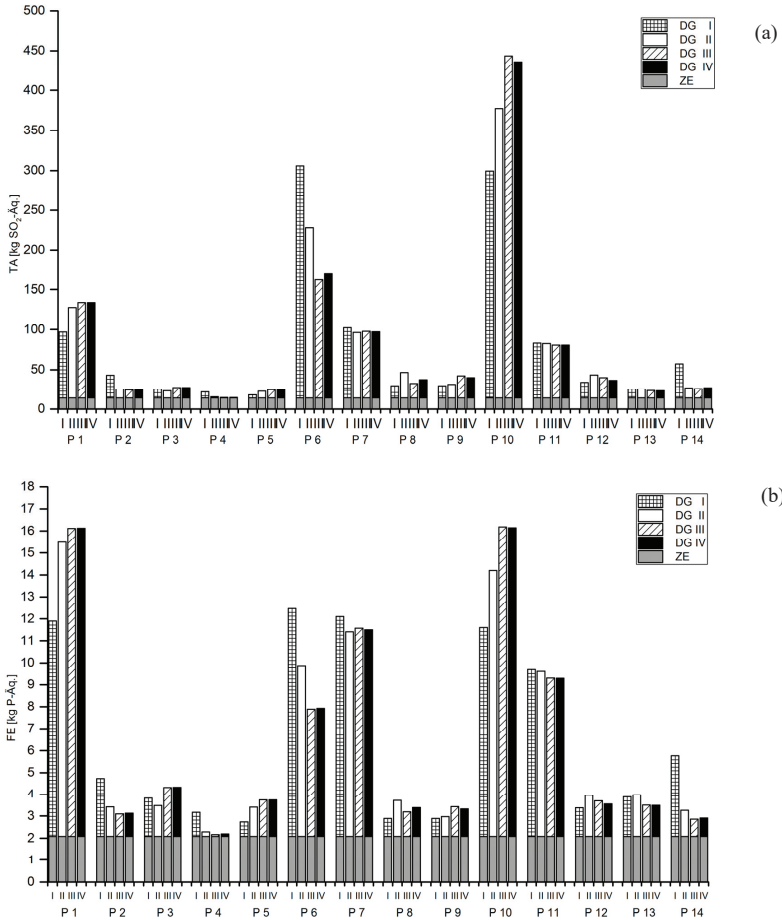


Abb. 4.15: Verteilung der jährlichen ökologischen Aufwendungen, die durch die MZA verursacht werden auf 14 untersuchte Prozesse, Produktionsjahr 2011; Auszug aus der Bewertung hier für die WK (a) Terrestrische Versauerung (TA) und (b) Überdüngung Frischwasser (FE) nach Charakterisierungsmodellen der ReCiPe 2008 Methode [111]



Da die Anzahl von drei Batches für den P4 im Betrachtungsjahr gering ist und auch die Belegungsanzahl niedrig ausfällt, entfallen im DG II, der die Anzahl der Ansätze berücksichtigt, auf P4 im Vergleich zu anderen Prozessen, wie z. B. P10 oder P11, deutlich geringere anlagenbedingte Aufwendungen. Die hohe Belegungsanzahl je Batch der TAn18 durch den P4 im Verhältnis zur Belegungsanzahl spiegelt sich in einem um 37,5 % größeren zugeordneten Aufwand im DG IV als in DG III wider. Im Vergleich mit allen anderen Prozessen werden dem P4 in den DG II, III und IV in beinahe allen WK die geringsten ökologischen Aufwendungen zugeordnet, und damit der geringen Nutzung der Anlage sowie der geringeren Beanspruchung der TAn in der Allokation der Umweltwirkungen Rechnung getragen.

Für die Prozesse P8 und P9 sind die im DG I zugeordneten ökologischen Aufwendungen über alle betrachteten WK gleich hoch. Da bei diesem DG lediglich diese Prozesse berücksichtigt werden und beide Prozesse die gleichen TAn (TAn 8 und TAn 22) belegen, resultiert die Allokation an dieser Stelle in identischen ökologischen Aufwendungen. In den anderen DG zeigen sich in den verschiedenen WK hingegen deutliche Abweichungen. So betragen die Abweichungen im DG II zwischen P8 und P9 in allen WK 55 %, die aus der unterschiedlichen Anzahl an Batches resultieren. Deutliche Schwankungsbreiten liefert der Vergleich der beiden Prozesse über die betrachteten WK in den DG III mit -70 %...49 % und DG IV -67 %...11 % bezogen auf P8. Dies ist begründet in der Tatsache, dass bei diesen DG mit der Belegungsanzahl (BAZ) und Belegungsanzahl (BD) (P8: TAn 8 (BAZ=66; BD=154 h), TAn 22 (BAZ=110; BD=330 h) vs. P9: TAn 8 (BAZ=48; BD=156 h), TAn 22 (BAZ=72; BD=360 h) die Allokation spezifischer, unter Berücksichtigung aller 50 Prozesse, durchgeführt wird.

Die Auswertungen zeigen außerdem, dass die ZE nicht vernachlässigt werden können, da der daraus resultierende Anteil an den ökologischen Aufwendungen der Anlage in den verschiedenen WK unterschiedlich groß ist. Dieser schwankt zwischen 0,4 % in WK *Ozonabbau* (OD) und 96,4 % in der WK *Verbrauch von Wasser* (WD). Im Mittel liegt der Anteil der ZE in den verschiedenen WK für die vier DG in einem Korridor von ca. 30...53 % – ohne Berücksichtigung der WK OD, die im Vergleich zu den anderen WK für die ZE einen deutlich geringeren Einfluss zeigt. Dies ist darin begründet, dass in dieser WK die Sonderwerkstoffe sowie fluorhaltige Kunststoffe im Vergleich zu anderen Materialien mit höheren Charakterisierungsfaktoren belegt sind, da diese in dem repräsentierten Umweltproblemfeld besonders große Auswirkungen haben. Diese Materialien sind in den ZE, anders als in einzelnen TAn, allerdings gar nicht bzw. nur in geringem Anteil verbaut, z. B. in Form von Pumpen.

In der Abb. 4.16 sind die Abweichungen der DG I-III vom DG IV zu den untersuchten 14 Prozessen in den betrachteten 18 WK im Überblick zusammengetragen. Der höchste betrachtete Detaillierungsgrad IV dient dabei als Benchmark, da davon ausgegangen wird, dass dieser die Verteilung der durch die MZA verursachten ökologischen Aufwendungen am genauesten widerspiegelt. Jeder Datenpunkt repräsentiert einen Produktionsprozess (P1-P14), wobei die grauen Quadrate jeweils die Abweichungen zwischen DG III und DG IV in der jeweiligen WK darstellen. Die schwarzen Quadrate zeigen die prozentualen Differenzen zwischen DG IV und II, die weiß ausgefüllten Rauten zwischen DG IV und I. Anhand der eingezeichneten oberen und unteren Grenzen können die Schwankungen, die sich bei Anwendung der verschiedenen Detaillierungsgrade für die 14 Prozesse in den einzelnen WK ergeben, abgelesen werden.

Die mit Abstand größten Abweichungen der ökologischen Aufwendungen vom Benchmark weist der DG I mit Werten bis zu 883 % auf. Diese Größenordnung wird vorrangig verursacht durch Prozesse, mit einer geringen jährlich Batchanzahl und die dabei nur wenige, vorrangig mit Standardausrüstung ausgestatteten TAn belegen (wie z. B. der oben beschriebenen P4). Deutlich wird in der Darstellung außerdem, dass die zugeordneten ökologischen Aufwendungen in der WK OD allein die unteren Grenzen der DG I-III bedingen. Dies resultiert zum einen aus dem bereits beschriebenen Einfluss der Sonderwerkstoffe und zum anderen aus der voran genannten Batchanzahl.

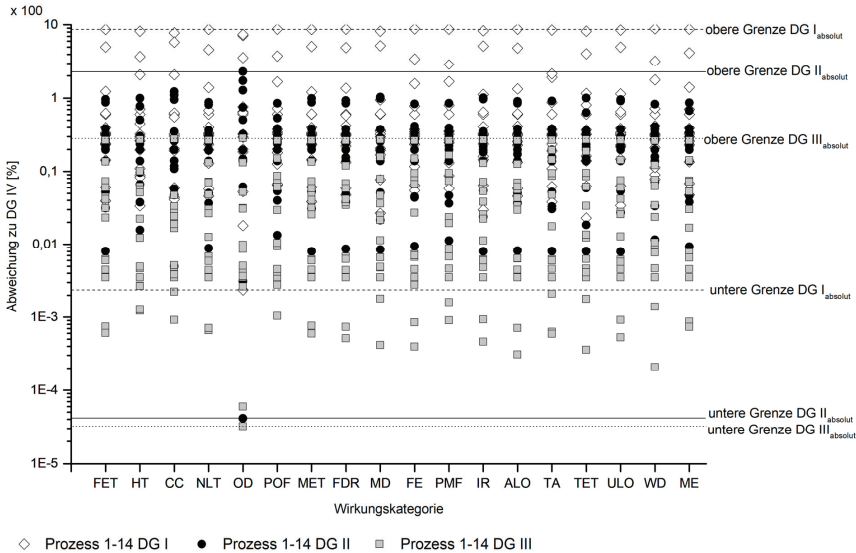


Abb. 4.16: Übersicht über die prozentuale Abweichung der Detaillierungsgrade I-III vom Benchmark (DG IV) über die 14 untersuchten Prozesse in 18 verschiedenen Wirkungskategorien, bewertet mittels den Charakterisierungsmodellen der ReCiPe 2008 Methode [111]

Ebenfalls hohe Abweichungen vom Benchmark zeigen die Aufwendungen, die nach dem DG II allokiert werden. Auch wenn die Schwankungsbreite im Vergleich zum DG I deutlich geringer ausfällt, liegen die Abweichungen noch bei 0...228 % im Vergleich zum Benchmark. So zeigen z. B. die Aufwendungen in den WK *Überdüngung Frischwasser* (FE) und TA Abweichungen für Prozess P7 von je 1% bzw. für P4 von 83 % bzw. 91 %, siehe Abb. 4.15(b). Deutlich geringer fallen die Abweichungen mit 0...29 % über alle WK und Prozesse für den DG III aus. Der für den DG III an dieser Stelle gewählte Allokationsansatz berücksichtigt die Anzahl der Belegungen. Die geringere Abweichung vom Benchmark resultiert vorrangig aus der im Mittel doch sehr ähnlichen Dauer der einzelnen Belegungen, da der Anteil der GO mit längerer Verweildauer in den TAN gering ist (siehe Abb. 4.14).

### 4.3.3 Erkenntnisse aus der ökologischen Bewertung der MZA

Der in Kapitel 4 präsentierte Ansatz zur Ermittlung der jährlichen ökologischen Aufwendungen, die mit dem Lebenszyklus einer Anlage einhergehen, ermöglicht neben der Bereitstellung und Entsorgung auch die Berücksichtigung der Aufwendungen für die Instandhaltung. Der gewählte Ansatz kalkuliert sowohl die Abnutzung und den damit einhergehenden über die Nutzungsdauer steigenden Mehraufwand als auch die (Wieder-)Beschaffung einzelner Apparate bzw. ganzer TAN in einer MZA mit ein. Um die ermittelten potentiellen jährlichen Umweltwirkungen transparent und objektiv auf die verschiedenen Produktionsprozesse im Betrachtungsjahr zuzuordnen, sind verschiedene Allokationsansätze möglich. Im Rahmen der durchgeführten Untersuchungen wird der Zusammenhang zwischen Detaillierungsgrad und Zuordnungsgenauigkeit betrachtet, prinzipiell darauf ausgerichtet, Produktionsprozessen mit spezifischen Anforderungen auch die damit verbundenen ökologischen Aufwände zuzuweisen und diese nicht pauschal auf alle Prozesse zu verteilen. Zu solchen Prozessen zählen jene, für deren Betrieb Equipment aus Sonderwerk-

stoffen oder mit Sonderbeschichtungen bereitgestellt werden müssen. Die Ergebnisse zeigen, dass die Berücksichtigung der von diesen Prozessen belegten TAn dem Sachverhalt Rechnung trägt.

Die Ergebnisse zeigen auch, dass für die ökologische Bewertung von Produktionsprozessen in MZA ein möglichst hoher Detaillierungsgrad für eine transparente und gerechte Zuordnung notwendig ist. Dem gegenüber steht der mit steigendem Detaillierungsgrad verbundene Aufwand bei der Erhebung der benötigten Daten. Lässt sich die Anzahl der in einer MZA im Betrachtungsjahr betriebenen Produktionsprozesse und deren Häufigkeit noch einfach ermitteln, bedeutet die Erfassung der Belegung einzelner TAn i. d. R. eine Durchsicht der Produktionsplanung oder der Prozessprotokolle bzw. Rezepturen. Die Dauer der Belegung verlangt eine weiterreichende Betrachtung der Rezepturen, da die einzelnen Grundoperationen berücksichtigt werden müssen. Aus diesem Grund erfolgt die Empfehlung, die Berücksichtigung der MZA auf Basis der Allokation nach Anzahl der Belegungen vorzunehmen. Dies stellt im Hinblick auf den benötigten Datenaufwand einen handhabbaren Ansatz dar. Die Ergebnisse belegen, dass daraus eine max. Abweichung von 30 % vom nächst höheren DG resultieren, für die hier untersuchten WK nach den Charakterisierungsmodellen der ReCiPe 2008 Methode.

In Hinblick auf einzelne WK, bei denen die höchsten potentiellen ökologischen Aufwendungen, die ein Produktionsprozess verursacht, aus der Inputklasse Anlage stammen, können Abweichungen von bis zu 30 % das Ergebnis signifikant beeinflussen. Verursacht ein Produktionsprozess in der WK *Verbrauch mineralischer Rohstoffe* (MD) z. B. 25 t Fe-Äq., von denen der Anlage allein 85 % zugeordnet sind, bedeutet diese Höhe der Abweichung ein  $\pm$  von 6 t Fe-Äq. Diese Menge repräsentiert knapp ein Viertel der potentiellen, ökologischen Aufwendungen des Prozesses. Daher sind bei der Anwendung der hier vorgestellten Allokationsansätze Sensitivitätsstudien zur Einschätzung des Einflusses auf das Endergebnis erforderlich. Die Untersuchungen zu der in dieser Arbeit analysierten MZA liefern erste Ansätze für die Spannweiten in den verschiedenen Detaillierungsgraden. Durch die Betrachtung weiterer Anlagen dieses Typs sollten diese Ergebnisse verifiziert und die Datenbasis gestärkt werden.

Als Rückschluss aus diesen Untersuchungen wird davon ausgegangen, dass die dem einzelnen Produktionsprozess zugeordneten ökologischen Aufwendungen durch eine Belegung der TAn, die die Minimalanforderungen erfüllen, gezielt beeinflusst werden können. Auch bei der Planung einer neuen bzw. die Erweiterung einer bestehenden Produktionsanlage spielt für die zukünftige ökologische Performance die Anzahl der TAn mit Sonderwerkstoffen und Beschichtungen eine nicht zu vernachlässigende Rolle. Letztgenanntes ist in diesem Zusammenhang sicherlich der Planung der geforderten Flexibilität und Verfügbarkeit sowie Kapazität nachgestellt, sollte allerdings zwingend berücksichtigt werden.

## 5 Ökologische Bewertung eines Produktionsprozesses in einer Mehrzweckanlage

Nachfolgend wird die Anwendung des in Kapitel 3 beschriebenen Ansatzes zur Modellierung anhand eines Beispielprozesses aus dem Bereich der Spezialchemie, betrieben in einer MZA der Firma Merck KGaA am Standort Darmstadt, Deutschland, demonstriert. Dieser wird bilanziert, analysiert und ökologisch bewertet. Beispielhaft werden verschiedene, durch die Modellierung und dem damit verfügbaren Detaillierungsgrad ermöglichte Betrachtungen in Form von Schwerpunkt- und Sensitivitätsanalysen vorgestellt. Außerdem erfolgt basierend auf den Ergebnissen die Ableitung möglicher Ansatzpunkte zur Verbesserung der ökologischen Performance. In diesem Zusammenhang werden Einflussgrößen identifiziert, die sowohl aus der Anlagenstruktur als auch aus der Betriebsweise und dem Prozess selbst resultieren.

### 5.1 Beschreibung des Produktionsprozesses im MZA-Umfeld

In der Abb. 5.1 ist der betrachtete Prozess in Form eines Blockfließbildes dargestellt. Im Anschluss an die Reaktion folgt eine umfangreiche Aufreinigung des in der Reaktion gewonnenen Produktes, die sich aus 14 Grundoperationen (GO) zusammensetzt. Die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Untersuchungen schließen die Extraktion EX02 und alle nachfolgenden Verfahrensoperationen, bestehend aus vier Destillationen (DE01, DE02, DE03, DE04), drei Kristallisationen (KR01, KR02, KR03), einer Chromatographie (CR01) sowie einer Trocknung (TR01), mit ein.

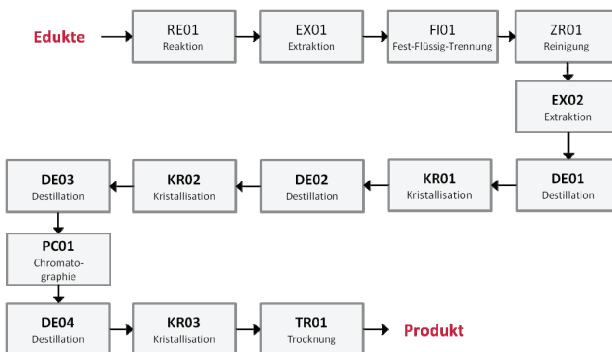


Abb. 5.1: Blockfließbild des Produktionsprozesses bestehend aus 14 Grundoperationen, von denen die zehn GO mit hervorgehobener Kurzschreibweise in die Untersuchungen eingehen.

Die apparative Umsetzung der Aufreinigung erfolgt bis einschließlich der GO DE03 in TAN mit RWA als Hauptapparate, wobei die EX02, DE01 und KR01 nacheinander in einer TAN betrieben werden. Gleiches gilt für die GO DE02 und KR02. Die GO DE03 belegt ebenfalls eine TAN mit einem RWA. Nachfolgend wird die GO CR01 in vier parallel betriebenen Chromatographiesäulen realisiert. Der Betrieb der anschließend folgenden GO DE04 und KR03 erfolgt in zwei parallel betriebenen TAN mit RWA. Für die

abschließende Trocknung kommen vier Schaufeltrockner zum Einsatz. Die Wahl der TAN ist dabei abhängig von den aktuell frei verfügbaren TAN, wobei vorrangig die benötigte Ausstattung in Bezug auf Material und Beschichtung bei Einsatz korrosiver Lösemittel bzw. Produkten ausschlaggebend ist. In Summe belegt der untersuchte Prozess 13 TAN. Für die nachfolgenden Untersuchungen werden die im Betrachtungsjahr vom Prozess am häufigsten belegten TAN gewählt. In der Tab. 5.1 sind die relevanten Informationen zu diesen TAN aufgeführt. Die TAN variieren im Material, im Nennvolumen und den Komplexitätsfaktoren, die den Umfang der TAN widerspiegeln (siehe Kapitel 4.2.1).

Tab. 5.1: Überblick über die TAN, in denen der untersuchte Produktionsprozess vorrangig im Betrachtungsjahr betrieben wurde

Grundoperation	Anzahl TA	Art Hauptapparat	Material Hauptapparat	Nennvolumen [m <sup>3</sup> ]	Komplexitätsfaktor
EX02	1	RWA	emaillierter Stahl	4,0	0,1
DE01					
KR01					
DE02	1	RWA	Edelstahl	4,0	0,7 5
KR02					
DE03	1	RWA	Edelstahl	4,0	0,1
PC01	4	Chroma	Edelstahl	0,6	0,1
DE04	2	RWA	Edelstahl	1,6	1,5
KR03					
TR01	4	Trockner	Hastelloy (C22)	0,6	1,5

Die Versorgung der TAN in der MZA mit Wärmeenergie erfolgt über zentrale mit Thermalöl betriebene Primärkreisläufe, die verschiedene Temperaturniveaus zur Verfügung stellen: zwei Kreisläufe auf höheren Temperaturniveaus  $> 100\text{ °C}$  (heiß, H), zwei Kreisläufe im mittleren Temperaturbereich  $5\text{ °C} < T < 20\text{ °C}$  (kalt, K) und zwei Kreisläufe auf tieferen Temperaturniveaus  $-40\text{ °C} < T < -15\text{ °C}$  (tiefkalt, TK). In Bezug auf die Versorgung mit Wärmeenergie ist die MZA zweigeteilt dargestellt. Jeder Teil verfügt über drei Primärkreisläufe, die jeweils eine Heiß-, eine Kalt- und eine Tiefkaltschiene umfassen. Diese sind nachfolgenden durch eine Zuordnung zu T1, mit H(T1), K(T1) und TK(T1), oder T2, mit H(T2), K(T2) und TK(T2) beschrieben. Die Bereitstellung der Temperaturniveaus erfolgt sowohl dezentral direkt im Produktionsgebäude, z. B. über einen Erdgasbrenner, oder zentral über Betriebsnetzschiene, wie z. B. Dampfnetz, Rückkühlwasser oder am Gebäude befindliche Ammoniakverdampfer, die über das Betriebsnetz gespeist werden. Jede TAN verfügt über einen mit Thermalöl betriebenen Sekundärkreislauf, i. d. R. in Form von Wärmeträgermodulen (siehe Abb. 4.4, Temperiermodul M1), der durch die verschiedenen Temperaturbereiche (H, K, TK) gespeist wird, siehe schematische Darstellung in Abb. 5.2.

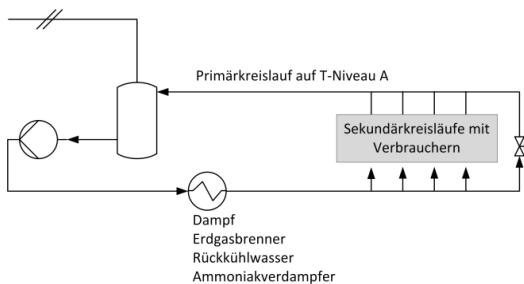


Abb. 5.2: Schematische Darstellung der Wärmeversorgung in der MZA mit Primärkreislauf, der die Sekundärkreisläufe an den Verbrauchern (TAN) speist

Die Primärkreisläufe stellen die verschiedenen Temperaturniveaus zur Verfügung, die in den Sekundärkreisläufen direkt an den TAn entsprechend den geforderten Vorlauftemperaturen gemischt werden. So sind die verschiedenen gestellten Anforderungen, wie z. B. Abfahren Temperaturrampen bei der Kristallisation oder das Einhalten von Temperaturdifferenz zwischen Betriebsstoff- und Produktseite, realisierbar. Dies stellt ein gängiges System dar, um die in einer MZA geforderten großen Betriebsfenster abfahren zu können [11].

## 5.2 Modellierung des Produktionsprozesses

Die Modellerstellung erfolgt in der vorgestellten Modellierungsumgebung (siehe Abb. 3.2) und zielt auf die Ermittlung von Verbrauchsdaten, vor allem in Hinblick auf die eingesetzten Mengen an Betriebsstoffen, Emissionen und elektrischer Energie sowie den anfallenden Reststoffen. Diese werden rechnerisch ermittelt, basierend auf Berechnungen mittels den in Kapitel 3.3 beschriebenen Bausteinen, in denen Einflussgrößen aus der Prozessführung, den Betriebs- und Apparatedaten sowie anlagenspezifische Daten hinterlegt sind. Das Modell ist nach dem in Kapitel 3.1 gezeigten Ansatz des 3-Ebenen-Modells strukturiert.

In der nachfolgenden Abb. 5.3 ist eine schematische Darstellung der dritten Ebene dargestellt. In dieser Ebene sind die an der Mehrzweckanlage zur Verfügung stehenden Betriebsstoffnetze und sonstige Versorgungseinheiten dargestellt, unterschieden in zentrale und dezentrale Organisation.

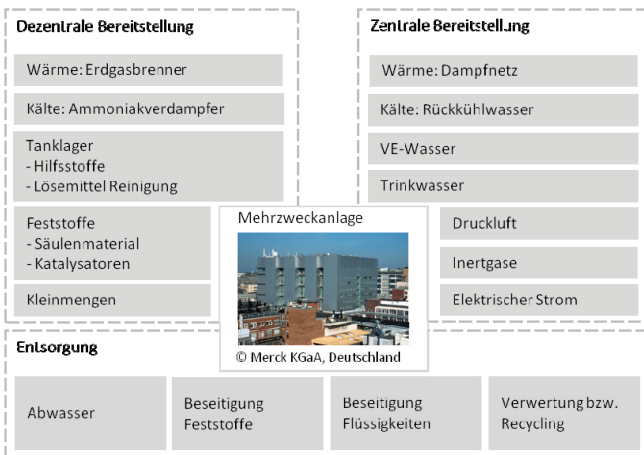


Abb. 5.3: Stoffstromnetz Ebene 3, schematische Darstellung der Betriebsstoffnetze sowie die Bereitstellung von Hilfs- und Betriebsstoffen (Kennzeichnung zentral und dezentral) und Entsorgungswege

In Bezug auf die Ermittlung der ökologischen Aufwendungen stehen für die dezentralen Strukturen Daten zur Verfügung, die eine unmittelbare Zuordnung zu den Produktionsprozessen, die in der MZA betrieben werden, ermöglichen. Die Daten zu den zentralen Strukturen müssten mittels Allokation zugeordnet werden. Da ebendas aufgrund der Datenverfügbarkeit zu den anderen Produktionen an dem Standort nicht möglich ist, erfolgt dies zum Teil rechnerisch. Dies betrifft insbesondere die Kalt- und Tiefkaltschienen der zentralen Netze, bei denen anteilig der  $\text{kW}_{\text{Motorenstrom}} / \text{kW}_{\text{Temperaturniveau}}$  mittels eines Verrechnungsfaktors, eruiert aus den Verbrauchsdaten, generiert wird, siehe Anhang A2.2. Dieser ist abhängig vom jeweiligen Medium und damit Temperaturniveau im Primärkreislauf der MZA und berücksichtigt die

Verbräuche der in der Wiederaufbereitung der Betriebsstoffe zum Einsatz kommenden Maschinen. Die Bereitstellung der Heischienen wird unter Bercksichtigung der zur Verfgung stehenden Infrastruktur, wie Dampfnetz und Erdgasbrenner, rechnerisch ermittelt. Smmtliche weiteren zentral bereitgestellten Medien, die sowohl Betriebs- als auch Hilfsstoffe, darstellen knnen, werden prozessabhngig ermittelt und unabhngig von unternehmensspezifischen Aufwendungen mittels generischer Datenstze bewertet. Diese werden sowohl durch das Tanklager als auch die Feststoffbereitstellung erfasst. In dieser Ebene erfolgt ebenfalls die Abbildung der zur Verfgung stehenden Entsorgungswege wie Abwasserbehandlung, Beseitigung von Feststoffen und Flssigkeiten sowie verschiedene Verwertungs- und Recyclingwege.

Die Abb. 5.4 zeigt einen Auszug aus der Modellebene 2. Diese Ebene bildet, wie in Kapitel 3.1 beschrieben, den Produktionsprozess modular strukturiert nach GO ab. Hier sind die GO Destillation (Subnetz-Transition DE01) und Kristallisation (Subnetz-Transition KR01) aufgezeigt, vgl. Abb. 5.1.

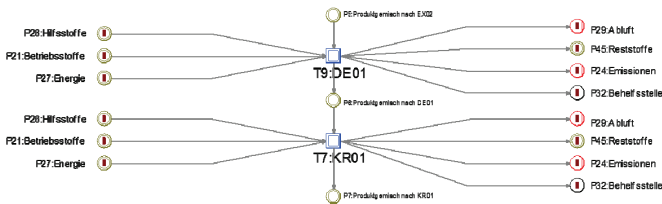


Abb. 5.4: Stoffstromnetzmodell Ebene 2, Ausschnitt der Prozessdarstellung

Die Connection-Stellen zwischen den Transitionen dienen der Weiterleitung des Produktgemisches, dessen Zusammensetzung und Menge in Abhngigkeit von den Funktionen der einzelnen GO variiert. Ebenfalls dargestellt sind die Input-Stellen (links) und Output-Stellen (rechts), die der in Kapitel 2.2.3 angegebenen Klassifizierung entsprechen und so eine konkrete Zuordnung der eingesetzten Stoffe und Energie zu den GO ermglichen. Die Input- und Output-Stellen sind als Connection-Stellen mit senkrechtem Balken dargestellt. So erfolgt die Verknpfung mit der Ebene 3, um die in den einzelnen GO ermittelten Verbruche aus den Betriebsstoffnetzen sowie Reststoffmengen zur Entsorgung direkt weiterzuleiten. Die Stelle P32 stellt eine Behelfsstelle dar und dient lediglich zur Bilanzierung. In der Output-Stelle *Emissionen* wird die anfallende Abwrme erfasst, die keine nutzbare thermische Energie darstellt, sondern lediglich der Bilanzierung dient. Dies gilt fr alle in den Stoffstromnetzdarstellungen befindlichen Outputstellen mit dieser Bezeichnung. Die Abluft wird in diesem Modell separat aufgefhrt, da die Einbindung der KWK, wie in den Annahmen (Anhang A2.3) beschrieben, bisher nicht erfolgt.

Die Abb. 5.5 zeigt die beispielhafte Darstellung einer GO in der Ebene 1. Die Basis bildet ein Baustein fr eine TAN, hier ausgestattet mit einem RWA als Hauptapparat mit einem Nennvolumen von 1,6 m<sup>3</sup>. In diesem bergeordneten Baustein sind sowohl Subnetz-Transitionen hinterlegt, die die Aufwendungen des Basisbetriebes dieser TAN abbilden als auch solche, die das Rsten und Reinigen als festen Bestandteil des Batchbetriebes darstellen.

Zu den Aufwendungen, die durch den Basisbetrieb anfallen, gehren u. a. wie hier fr diese TAN dargestellt, der Sperr- und Splgasverbrauch fr den Betrieb der Gleitringdichtungen (T9), die Druckregulierung durch die Vakuumpumpen bzw. einen zentralen Vakuumbahnhof (T1, T10), Luftbedarf fr die pneumatische Regelung (T5) und die zentralen Abluftwscher (T4). Das Rsten und Reinigen beschreibt typische Arbeitsgnge eines Batchbetriebes, hier das Inertisieren der Apparate (T2) und der genutzten Tankcontainer (T8) sowie das Reinigen der TAN (T3). Diese detaillierte Darstellung der GO ermglicht bei der Durchfhrung von Schwerpunktanalysen die Herausstellung von Aufwendungen, die durch die Betriebsweise der MZA bedingt sind. Die als Behelfsstellen gekennzeichneten Stellen (P32, P18) dienen

der Bilanzierung bzw. der Organisation von Informationen, die für die Nutzung der allgemeingültigen Bausteine benötigt werden. Connections-Stellen, die nicht Ebenen übergreifend genutzt werden (ohne senkrechten Balken), dienen ebenfalls der Übertragung von Informationen, die aus der Art der Modellierung der Bausteine resultieren.

Die links angeordneten Subnetz-Transitionen stellen die einzelne Prozessschritte dar, aus denen sich die GO zusammensetzt – hier handelt es sich um Heiz- und Kühlvorgänge sowie dem Rühren – ergänzt um Equipmentbausteine, wie Tanklagerpumpe oder Vakuumpumpe. Die Grundoperation ist untergliedert in verschiedene Abschnitte, die durch unterschiedliche Prozessbedingungen gekennzeichnet sind.

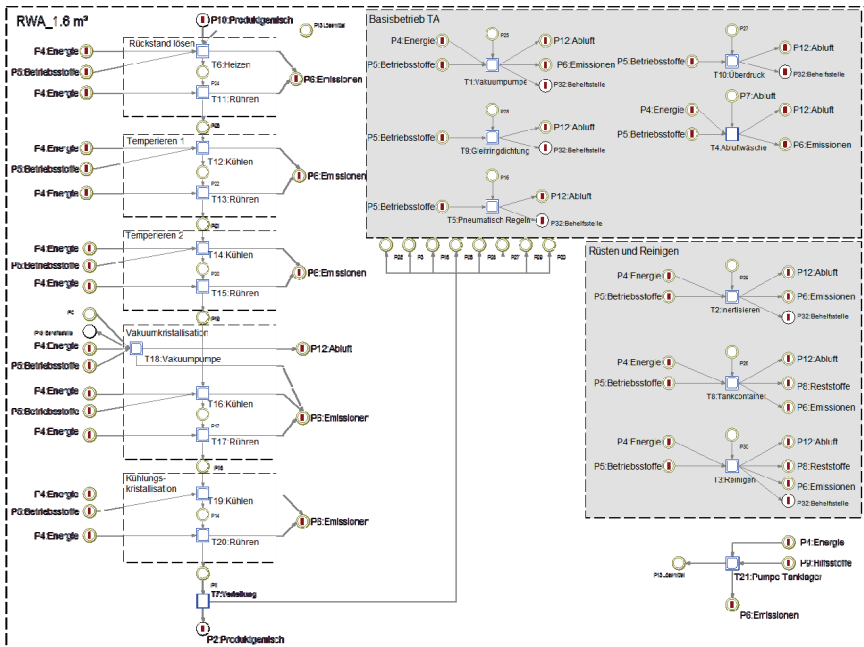


Abb. 5.5: Stoffstromnetzmodell Ebene 1, Darstellung der Grundoperation KR03 [61]

Die Subnetz-Transition *Heizen* (T6) erfasst den Verbrauch des Betriebsstoffs Thermalöl in den verschiedenen Temperaturschienen, die am Sekundärkreislauf des RWA zur Verfügung stehen. Diese Transition stellt einen Baustein dar, der als Subnetz-Transition ausgeführt ist und neben dem eigentlichen Prozessschritt *Heizen* (T1) noch zwei Transitionen zur Ermittlung der elektrischen Verbräuche der Pumpen im Sekundärkreislauf (T2) und Primärkreislauf (T3) umfasst. Die entsprechende Subnetzstruktur ist in Abb. 3.4 dargestellt. Das Ansteuern der Sekundärkreisläufe kann über verschiedene Regelstrukturen erfolgen. Dazu gehört u.a. die Regelung über die Vorlauftemperatur, der Innentemperatur oder über Temperaturdifferenzen und Leistungsbegrenzungen bzgl. der Vorlauf/Rücklauf-Temperaturen der Primärkreisläufe. In der Modellierung erfolgt die Temperatursteuerung der Sekundärkreisläufe mittels der Temperaturdifferenz zwischen Betriebsstoff- und Produktseite mit der Innentemperatur als Regelgröße, um apparative Restriktionen, wie z. B. Begrenzungen aufgrund der Beschichtungen in den Apparaten, oder spezifische Produktanforderungen zu berücksichtigen. Ebenfalls zum Grundoperationsabschnitt *Rückstand lösen* gehört die Subnetz-Transition T11 *Rühren*, in der der Verbrauch an elektrischen Strom für den in



dem RWA verbauten Rührertyp, unter Berücksichtigung des Durchmesserverhältnisses nach DIN 28131 [114], der Leistungskennzahl [147] und der entsprechenden vorgegebenen Rührerdrehzahl, berechnet wird. Den einzelnen Grundoperationsabschnitten sind jeweils der Prozessschritt Rühren zugeordnet. Dies ist zum einen begründet in dem Modellierungsprinzip der Bausteine, da das Rühren mit unterschiedlichen Rührertypen abhängig von der belegten TAN erfolgt und zum anderen in den Prozessbedingungen, die sich in Bezug auf die Rührerdrehzahl über die Dauer der GO ändern können. Die benötigten Lösemittel (hier: Hilfsstoff) werden direkt aus dem Tanklager in den RWA gepumpt. Die T21 erfasst als Equipmentbaustein *Pumpe Tanklager* den entsprechenden Verbrauch an elektrischem Strom. Die beiden nachfolgenden Grundoperationsabschnitte *Temperieren 1* und *Temperieren 2* sind gekennzeichnet durch die Prozessschritte *Kühlen* (T12, T14) und *Rühren* (T13, T15). Diese unterscheiden sich in der vorgegebenen Temperaturrampe, als auch in den Haltezeiten; die Rührvorgänge in den Rührerdrehzahlen. *Temperieren 1* dient dem Abkühlen des zuvor erwärmten Produkt-Lösemittelgemisches um 30 K. *Temperieren 2* stellt den eigentlichen Startpunkt der Kristallisation dar. Mit einer deutlich reduzierten Temperaturrampe wird die Temperatur des Gemisches um weitere 10 K gesenkt. Nach Erreichen des Kristallisationspunktes wird die Temperaturrampe unterbrochen und das Gemisch über eine längere Zeitspanne gerührt. Der Grundoperationsabschnitt *Vakuumbildung* umfasst neben dem Prozessschritt *Kühlen* (T16) und *Rühren* (T17) noch die Einstellung eines Vakuums, hier durch den Equipmentbaustein *Vakuumpumpe* (T18) repräsentiert. Dieser ermittelt den Verbrauch an elektrischer Energie für die Evakuierung und dem Halten des Druckniveaus aufgrund von Leckagen. Hinzukommt der Bedarf am Betriebsstoff Thermalöl zur Kühlung der Vakuumpumpe und den damit verbundenen Verbräuchen der Pumpen in den Thermalölkreisläufen. In einem Vakuum von  $< 0,5$  bar(a) wird in diesem Prozessabschnitt die Temperatur um weitere 15 K reduziert. Außerdem erfolgt eine Absenkung der Temperaturrampe und eine Anpassung der Rührerdrehzahl. Der Prozessschritt *Kühlen* beschreibt hier die Kondensation des aufgrund des Vakuums verdampfenden Lösemittels im Rückfluss und erfasst den Betriebsstoffverbrauch, der mit dem Betrieb des Kondensators und den Pumpen in den Thermalölkreisläufen einhergeht. Der letzte Abschnitt *Kühlungskristallisation* entspricht dem Aufbau der Abschnitte *Temperieren 1* und *Temperieren 2*. In diesem Abschnitt wird die Temperatur um weitere 25 K reduziert, die Temperaturrampe ist dabei wieder erhöht und die Haltezeit bei der Endtemperatur auf wenige Minuten beschränkt. Dieser letzte Grundoperationsabschnitt dient der Ausfällung eventuell noch vorhandener Wertkomponenten in dem Lösemittelgemisch. Anschließend wird die Lösung aus Produktkristallen und Lösemitteln in die nächste TAN überführt.

Die Stoffstromnetzmodellierung in Verbindung mit der 3-Ebenen-Struktur ermöglicht neben der detaillierten Abbildung die Ermittlung der Verbrauchsdaten einzelner GO sowie der übergeordneten betrieblichen Infrastruktur. Dies gewährleistet, dass alle durch die GO verursachten Aufwendungen erfasst werden und somit bei der ökologischen Bewertung zuordenbar sind. Die Modellierung ermöglicht eine Abbildung der Prozessführung und damit die Bewertung der Prozessgestaltung im Detail, in der hier gezeigten GO die Verfahren der Kühlungs- und Vakuumbildung, deren Ausführung (u. a. die Temperaturrampen) einen unmittelbaren Einfluss auf Reinheit und Größe der Kristalle hat und somit auf die weitere Gestaltung der Aufreinigung. Informationen wie Geschwindigkeit, Reinheit, Ausbeute oder Prozessierbarkeit sind für die verfahrenstechnische Bewertung der GO notwendig.

### 5.3 Festlegung der Ziele und des Untersuchungsrahmens

Die Untersuchung umfasst einen Produktionsprozess aus dem Bereich Spezialchemie, der in einer MZA der Firma Merck KGaA, Standort Darmstadt, Deutschland, betrieben wird. Anhand dieses Beispielprozesses soll in dieser Arbeit die Anwendung der entwickelten Methode demonstriert werden. In diesem Zusammenhang sollen sowohl die Integration der Produktionsanlage in die ökologische Bewertung als

auch die Möglichkeiten der Bilanzierung und Durchführung von Analysen, die die Modellierung in der entwickelten 3-Ebenen-Struktur zulassen, veranschaulicht werden.

Die Ergebnisse der Untersuchungen dienen vorrangig der internen Anwendung, u. a. um ökologische Aufwendungen zu ermitteln und zu analysieren, die durch die Prozessrealisierung in der MZA verursacht werden. Die Feststellung von Einflussgrößen auf die ökologische Performance und die Identifizierung von kritischen Einsatzstoffen sowie Prozessabschnitten bzw. GO dienen den Betriebsingenieuren und der Betriebsleitung als Basis zur Ableitung von Handlungsempfehlungen in Bezug auf den Betrieb in der MZA und Identifizierung von Kennzahlen, die die Berücksichtigung von Umweltaspekten in der Produktion unterstützen. Ingenieuren aus dem Bereich Forschung und Entwicklung (F&E) dienen die Ergebnisse als Basis einer Prozessanalyse bzgl. möglichen Verfahrensalternativen für GO oder Prozessabschnitte, die aufgrund ihrer Performance einen besonders hohen Anteil an den ökologischen Gesamtaufwendungen verursachen.

### Untersuchungseinheit und Referenzfluss

Als Untersuchungseinheit und damit funktionelle Einheit (fE) dient ein Batchansatz mit 592 kg Produkt als Referenzfluss, der die geforderte Spezifikation in vollem Umfang erreicht. Da die Daten sowohl für Betriebsingenieure als auch Ingenieure in der F&E und somit verschiedenen Bereichen im Unternehmen bereitgestellt werden, wird die fE für die ökologische Bewertung so gewählt, dass diese in Kombination mit dem gewählten Modellierungsansatz Aussagen ermöglichen, die u.a. die Produktverluste je GO darstellen und so Bewertungen zur Ressourcen- und Energieeffizienz erlauben. Außerdem sind mittels Schwerpunktanalysen konkrete Aussagen zu den ökologischen Aufwendungen möglich, die durch die Betriebsweise bedingt werden. Die erhaltenen Ergebnisse können am Ende bei Bedarf auf ein kg Produkt herunter gebrochen werden.

### Systemgrenzen

Die ökologische Bewertung des Produktionsprozesses erfolgt nach dem „cradle-to-gate“-Ansatz. Dabei umfassen die in Abb. 5.6 gezeigten Systemgrenzen den Produktionsprozess, die Vor- und Nachbereitung der belegten TAn und den Basisbetrieb, die Bereitstellung und Entsorgung sowie die mit der Instandhaltung verbundenen Aufwendungen der TAn und den zentralen Elementen der MZA.

In die Bewertung gehen die ökologischen Aufwendungen, die durch die Bereitstellung der Betriebsstoffe und Hilfsstoffe sowie der elektrischen Energie, die in der MZA verbauten Materialien als auch die Entsorgung der Reststoffe verbunden sind, mit ein. Sowohl die Distribution als auch die Nutzungsphase sowie die Entsorgung am Ende des Lebensweges werden nicht betrachtet. Dies ist vor allem darin begründet, dass das aus dem Produktionsprozess resultierende Produkt eine Spezialchemikalie darstellt, die sich in verschiedensten Endprodukten wiederfindet. Daraus resultieren zum einen verschiedenste Szenarien bzgl. der Endproduktherstellung, Nutzungsphase als auch End-of-Life-Betrachtungen, die nicht Bestandteil der Untersuchungen sind.

Zu den Edukten liegen keine Daten bzgl. der Aufwendungen vor, die mit deren Herstellung verbunden sind. Daher werden die Edukte in der eigentlichen Prozessbewertung nicht berücksichtigt. Ebenfalls nicht eingebunden in den Betrachtungen sind die ökologischen Aufwendungen verursacht durch die Transporte der Edukte, Hilfsstoffe, Betriebsstoffe oder Abfälle, da ebenfalls keine belastbaren Daten zur Verfügung stehen. Allerdings zeigen die Untersuchungen der Autoren Wernet et al. [94], dass der Anteil der durch die Transporte verursachten ökologischen Aufwendungen in der organischen Chemie bei 2...4 % bzw. in der anorganischen Chemie bei 4...5 %<sup>20</sup> liegen und damit eine untergeordnete Rolle spielen. Ähnliches

---

<sup>20</sup> Die Autoren betrachten neben der Midpointansatz Klimaänderung, mit dem EcoIndicator99 und der Ökologischen Knappheit 2006 (ES – Ecological Scarcity) vorrangig Endpointansätze, sowie den Kumulierten Energieaufwand (CED).

präsentieren Jiménez-González et al. [55], deren Untersuchung zur API-Synthese den transportabhängigen Aufwendungen weniger als 8 %<sup>21</sup> der Aufwendungen zuweisen, als auch Gasafí et al. [35], bei denen der Transport in drei von vier untersuchten WK einen Anteil von deutlich weniger als 5 %<sup>22</sup> aufweist. Ebenfalls ausgenommen von der Betrachtung sind die Herstellprozesse der einzelnen Apparate und Equipments der MZA sowie die Bereitstellung des Produktionsgebäudes und damit verbunden die Verbräuche der nicht-produktionsbedingten Infrastruktur. Auch in diesem Fall ist dies begründet durch die nicht vorhandene Datenbasis. In Bezug auf die nicht-produktionsbezogene Gebäudeinfrastruktur zeigen allerdings die Autoren Bieler et al. [67, 65], dass diese in Mehrprozess- und Mehrzweckanlagen aus energetischer Sicht ähnlich hoch ausfallen wie der Verbrauch der produktionsabhängigen Infrastruktur. Dies könnte bei Bedarf als erste Orientierung herangezogen werden.

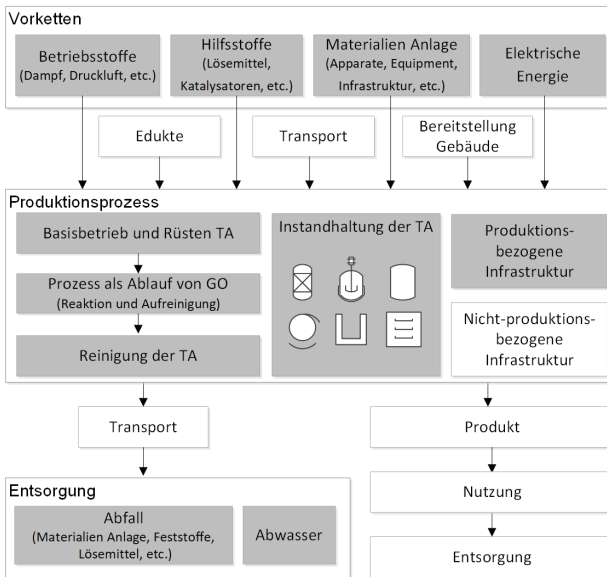


Abb. 5.6: Darstellung der Systemgrenzen für die ökologische Bewertung des Produktionsprozesses: Die grau hinterlegten Felder kennzeichnen die in der Bewertung berücksichtigten Lebenswegabschnitte.

Für die Bewertung werden die in der MZA verbauten Materialien mengenmäßig erfasst und deren Bereitstellung und Entsorgung berücksichtigt. Dabei handelt es sich um einmalig anfallende Aufwendungen, die nach der Empfehlung in der Leitlinie der EU [5] über die Lebensdauer der MZA ökologische abzu-schreiben sind. Um dies zu berücksichtigen, wird der in Kapitel 4.2.2. beschriebene Ansatz zur Ermittlung der jährlichen anlagenbedingten ökologischen Aufwendungen angewandt. In diesem Zusammenhang erfolgt auch die Erfassung der Aufwendungen zur Instandhaltung, deren Höhe in Abhängigkeit von der Lebensdauer variiert, vgl. auch hier Kapitel 4.2.2.

Das Abschneiden von einzelnen Inputs oder Outputs, hier der Prozessabschnitt Reaktion, Transporte und Herstellung der Apparate sowie Equipment, kann die Ergebnisse ökologischer Bewertungen beeinflussen

<sup>21</sup> In der Untersuchung sind mit der Eutrophierung, Versauerung, Klimaänderung und Photochemische Oxidation verschiedenen Wirkungskategorien berücksichtigt. Ebenfalls Bestandteil der Betrachtung ist der Energiebedarf.

<sup>22</sup> Die untersuchten WK umfassen: Klimaänderung, Eutrophierung, Ressourcenverbrauch und Versauerung. Die durch den Transport anfallenden Stick- und Schwefeloxide verursachen in der WK Versauerung einen Anteil von ca. 20 % der SO<sub>2</sub>-Äq.

und ist daher, wie bereits in Kapitel 2.2 dargestellt, in den aktuelleren Handlungsempfehlungen und Leitlinien zu vermeiden bzw. nicht zulässig [5, 30]. Die aufgeführten Inputs, die nicht in die Systemgrenzen integriert sind, sollten daher im Rahmen weiterführender Arbeiten erfasst und ergänzt bzw. getroffene Annahmen z. B. in Form von Sensitivitätsanalysen im Hinblick auf ihren Einfluss auf das Gesamtergebnis überprüft werden.

In dem betrachteten Produktionsprozess entstehen keine Nebenprodukte bzw. Koppelprodukte, sodass eine Allokation der ökologischen Aufwendungen nicht notwendig ist, sondern diese vollständig dem Referenzfluss zugeordnet werden.

### Datenquellen

Als Betrachtungsjahr ist 2011 festgelegt. Der Anteil des zu bewertenden Produktionsprozesses in diesem Betrachtungszeitraum betrug ca. 4 % des Gesamtproduktionsvolumens in der MZA und repräsentiert einen Prozess mit einem höheren Produktionsumfang. Die verwendeten Daten entstammen verschiedenen Quellen. Die Basis zur Ermittlung der Verbrauchsdaten des Produktionsprozesses mittels Modells (siehe Kapitel 5.2) stellen die Vorgaben in der Rezeptur dar. Hier sind die Mengen an eingesetzten Edukten und Hilfsstoffen sowie austretenden Reststoffen angegeben. Hinzu kommen Informationen zur Prozessführung, wie Temperaturrampen, Haltezeiten, Rührerdrehzahlen, Drücke und Temperaturen, die für die Berechnung der eingesetzten Betriebsstoffmengen notwendig sind. Ergänzt werden diese Angaben durch Betriebsdaten, aus denen Verrechnungsfaktoren generiert werden. Informationen zu den verbauten Apparaten und Equipment (Materialart, Materialmengen, Nennvolumen, Ausstattung, etc.), der Verrohrung und verbauter MSR-Technik sowie der zentralen und dezentralen Versorgung sind Projektierungsunterlagen und unternehmensinternen Datenbanken entnommen. Als weitere Informationsquelle dienten außerdem eine Vielzahl an Gesprächen mit Ingenieuren direkt an der MZA, Ingenieuren aus der Anlagenplanung sowie der Forschung und Entwicklung.

Im Anhang A.2.2 und A.2.3 werden die einzelnen Klassen der Inputs und Outputs und die entsprechende Datenbasis sowie getroffene Annahmen dargestellt. Zudem werden die genutzten generischen Datensätze zur Erstellung der Sachbilanz aufgeführt. Zur Erfassung der Vorketten dienen Datensätze aus der Datenbank ecoinvent v2.2. Für nicht vorhandene Datensätze einzelner Stoffe oder Materialien werden entweder die Vorstufen ermittelt, denen Datensätze soweit vorhanden zugeordnet werden oder strukturell ähnliche Moleküle bzw. Materialien ausgewählt, deren Bereitstellung der eigentlichen möglichst nahekommen. Bei der Wahl der Datensätze wird sich möglichst regional, bezogen auf den Standort Deutschland, orientiert. Sollten dazu keine Datensätze verfügbar sein, wird der geographische Raum jeweils erweitert – zunächst auf europäisches Umfeld, anschließend wird auf globale Datensätze zurückgegriffen.

### Wirkungskategorien, -modelle und -indikatoren

Die ökologische Bewertung erfolgt mittels den in der ReCiPe-Bewertungsmethode [111] hinterlegten Charakterisierungsmodellen. Die verwendeten Charakterisierungsfaktoren entsprechen der Perspektive Individualist (I). Diese Perspektive entstammt der Kulturtheorie von Thompson et al. [148] und orientiert sich an einer eher kurzfristigen, lokalen Sichtweise darauf vertrauend, dass technologische Entwicklungen Probleme in der Zukunft lösen können. Es werden Erfahrungswerte berücksichtigt, in denen nur bewiesenen Effekte integriert sind [149], die sich in den Betrachtungshorizonten einzelner Wirkungskategorien widerspiegelt, siehe Tab. A.2.1 im Anhang, und damit einen unmittelbaren Einfluss auf die Charakterisierungsfaktoren haben. So umfasst der Betrachtungshorizont in der Wirkungskategorie Klimaänderung 20 a, im vgl. zu 100 a (Hierarchist, H) und 500 a (Egalitarian, E). Dadurch weisen die einzelnen Elementarflüsse signifikante Unterschiede in der Gewichtung auf. Beträgt der Charakterisierungsfaktor für Methan in der Individualist-Perspektive 72 kg CO<sub>2</sub>-Äq./kg, ist dieser beim Hierarchist mit 25 kg CO<sub>2</sub>-Äq./kg

nur knapp ein Drittel und in der Perspektive Egalitarian mit 7,6 kg CO<sub>2</sub>-Äq./kg etwas mehr als ein Zehntel so groß (ReCiPe 2008, V1.11, Stand 12/2014). Bei anderen Elementarflüssen, wie z. B. Stickstofftrifluorid, kann sich dies genau anders herum darstellen, immer abhängig von den potentiellen Auswirkungen in dem betrachteten Zeithorizont.

Die Wirkungskategorien und Charakterisierungsmodelle der ReCiPe 2008 Bewertungsmethode entsprechen nicht den Vorgaben in der EU-Leitlinie, orientieren sich allerdings an diesen. Dies ist vor allem darin begründet, dass nicht alle Charakterisierungsmodelle und zugehörigen Charakterisierungsfaktoren, die in der EU-Leitlinie benannt sind, zur Bewertung der Elementarflüsse zur Verfügung stehen. Die Auswahl der ReCiPe 2008 Methode stellte dazu eine Alternative dar, da sich einige der in der Leitlinie angegebenen Modelle und Datenquellen wiederfinden. Die in der ReCiPe 2008 Methode hinterlegten Charakterisierungsfaktoren werden seit ihrer Veröffentlichung fortlaufend aktualisiert. Im Rahmen dieser Bewertung wird auf die Version von 2008 zurückgegriffen, da die Bewertung auf Produktionsdaten aus dem Jahr 2011 basiert.

### Normierung

Die Bewertung des Produktionsprozesses umfasst zunächst alle 18 Wirkungskategorien der ReCiPe 2008 Methode. Für die Schwerpunktanalysen werden zur Darstellung der Ergebnisse einzelne Wirkungskategorien ausgewählt, um die Übersichtlichkeit zu gewährleisten. Die Auswahl der Kategorien erfolgt auf Basis einer Normierung der Ergebnisse der Prozessbewertung. Eine Normierung bietet die Möglichkeit, die erhaltenen Ergebnisse in den einzelnen Wirkungskategorien zu den ökologischen Gesamtaufwendungen z. B. einer Region oder einer Branche zu beziehen. Die Normierungsfaktoren stellen Werte dar, die aus verschiedenen Datenquellen stammen und deren Ermittlung darauf abzielt, den gesamten Einfluss eines geographischen Raums abzubilden. Die Normierung erlaubt einen Vergleich zwischen den WK bzgl. des Einflusses des untersuchten Prozesses in dem einzelnen Umweltproblemfeld. Außerdem kann abgeschätzt werden, wie stark das Ergebnis zu der Gesamtbelastung für die Region beiträgt. Für die hier durchgeführten Betrachtungen wird auf Normierungsfaktoren für Europa aus dem Jahr 2000 (wie in ReCiPe 2008 V1.11, überarbeitet 2014, hinterlegt) zurückgegriffen, die auf der ReCiPe Website [150] zur Verfügung stehen.

Die Normierung mit externen geographischen Faktoren liefert laut den Untersuchungen von Prado et al. [151] für ein einzelnes Produktsystem eine klare Tendenz zu bestimmten Wirkungskategorien. Begründet sei dies in der Qualität der zugrunde liegenden Daten. Je schlechter diese ist, desto größer sind die erhaltenen Werte. Nach Benini et al. [152] ist die Datenlage bei den Wirkungskategorien mit toxikologischem Bezug (Humantoxizität und Ökotoxizität) am geringsten, was sich in den Ergebnissen der Autoren Prado [ebd.] widerspiegelt. Besser geeignet wäre eine direkte Gegenüberstellung mit einem vergleichbaren Produktsystem, die an dieser Stelle allerdings aufgrund fehlender Daten und Informationen von ähnlichen chemischen Prozessen nicht realisierbar ist.

## 5.4 Stoff- und Energiebilanz als Basis der Sachbilanzerstellung

Die Bilanzierung des Produktionsprozesses bildet die Grundlage zur Erstellung der Sachbilanz und erfolgt auf Basis der in Kapitel 5.2 vorgestellten Modellierung. Die Erfassung der Verbrauchsdaten umfasst, wie in Abb. 5.6 dargestellt, neben dem Produktionsprozess auch das Rüsten und Reinigen sowie den Basisbetrieb der belegten TAn. Im Nachfolgenden werden die Datenbasis und getroffene Annahmen zu den erhobenen Daten sowie genutzte Datenquellen beschrieben. Anschließend erfolgen die Darstellung der Bilanz und eine Übersicht zu den nachträglichen Umrechnungen, um die generischen Datensätze zur Ermittlung der Elementarflüsse zu integrieren.

### 5.4.1 Datenerhebung

Wie bereits beschrieben, stammen die Art und Menge der im Produktionsprozess eingesetzten Edukte und Hilfsstoffe sowie die anfallenden Reststoffe aus der Rezeptur. Um die Verbrauchsdaten, also die Menge an eingesetzten Betriebsstoffen, elektrische Energie und Emissionen zu ermitteln, wird auf die Prozessmodellierung zurückgegriffen. Das Prinzip der Bausteine sowie deren Anwendung sind in den Kapiteln 3.2 und 5.2 beschrieben. Weitere getroffene Annahmen sowie die Einbindung von Produktionsdaten sind im Anhang (Kapitel A2.2 und A2.3) zu finden.

### 5.4.2 Stoff- und Energiebilanz

Zur Erstellung einer Bilanz werden die Daten der Modellebene 2 herangezogen, um sämtliche Inputs und Outputs des Produktionsprozesses bereitzustellen. Tab. 5.2 zeigt die Bilanz des Produktionsprozesses, wobei die Inputs und Outputs entsprechend der genutzten Klassifizierung zugeordnet sind.

Den Betriebsstoffen ist das Thermalöl auf verschiedenen Temperaturniveaus zugeordnet. Die Aufstellung umfasst die im Verlauf des Produktionsprozesses, des Basisbetriebes sowie dem Rüsten und Reinigen umgewälzten Massen dieses Betriebsstoffs. Die angegebenen Massen spiegeln dabei nicht die benötigten Wärmemengen wider, da die einzelnen Temperaturschienen bzgl. der Primärkreisläufe unterschiedliche Vorlauf- und Rücklauftemperaturen aufweisen. Die Differenzen betragen 2 K bei den Heiß-, 10 K bei den Kalt- und 5 K bei den Tiefkaltschienen. Für die Erstellung der Sachbilanz müssen die Thermalölmassen in Wärmemengen umgerechnet werden. Anhand dieser Wärmemengen erfolgt die Ermittlung der mit der Aufbereitung der Temperaturschienen verbundenen Verbräuche in den Betriebsnetzen.

Die Verrechnung der Verbräuche für die Kältebereitstellung der Temperaturniveaus TK(T2), K(T2), TK(T1) und K(T1) erfolgt über die in Tab. 5.3 angegebenen Verrechnungsfaktoren, deren Ermittlung im Anhang A2.2 gezeigt ist. Zur Bereitstellung der anderen beiden Temperaturniveaus wird für das Temperaturniveau H(T1) das Dampfnetz auf einem Druckniveau von 4 bar(Ü) bzw. für das Temperaturniveau H(T2) ein Erdgasbrenner direkt im Gebäude der MZA eingesetzt. Zur Berechnung wurden die Mengen an Dampf zur Aufbereitung ermittelt, unter der Annahme, dass es sich um Sattdampf handelt und nur die Kondensationswärme genutzt wird. Die Ermittlung der Erdgasmenge erfolgt mittels Verbrennungsrechnung, die sowohl die Höhenlage des Betriebsstandortes als auch die vorliegenden Anschlussbedingungen (z. B. Effektivdruck) und den Brennwert des genutzten Erdgases laut Anbieter berücksichtigt.

Die angegebenen Mengen an Löse- sowie Reinigungsmittel und VE-Wasser werden hauptsächlich beim Rüsten und Reinigen eingesetzt. An Hilfsstoffen werden in Summe 23,4 t zur Realisierung aller GO benötigt, wobei es sich sowohl um anorganische als auch organische Stoffe handelt. Die angegebenen Mengen an elektrischer Energie resultieren aus dem Betrieb der Rührer, Pumpen, Vakuumpumpen und Feststoffeintragssysteme. In den angegebenen 55.923 MJ sind die zur Aufbereitung der Kalt- und Tiefkaltschienen aufgewandten Mengen an Strom nicht enthalten, da diese den Betriebsstoffen zugeordnet werden. Ebenfalls inputseitig angegeben ist die Menge an Produktgemisch, welche in die erste GO des betrachteten Abschnittes des Produktionsprozesses, der EX02, eintritt. Weitere 100 kg Produkt werden als Recyclingstrom in der DE02 zugeführt.

Tab. 5.2: Stoff- und Energiebilanz des Produktionsprozesses, basierend auf den Daten der Modellebene 2

Klassifizierung	Stoff/Energie (nicht elementar)	
<b>INPUT</b>		
<b>Betriebsstoffe [kg]</b>	Thermalöl H (T1)	2.075.975
	Thermalöl H (T2)	2.343.017
	Thermalöl K (T1)	2.061.977
	Thermalöl K (T2)	4.543.161
	Thermalöl TK (T1)	459.930
	Thermalöl TK (T2)	105.919
	Regelluft	20.000
	Inertgas	7.872
	Wasserdampf	5.103
	Lösemittel 1	2.132
	Lösemittel 2	1.703
	Lösemittel 3	1.200
	Reinigungsmittel	10
	VE-Wasser	22.749
<b>Hilfsstoffe [kg]</b>	Lösemittel A	1.602
	Lösemittel B	2.980
	Lösemittel C	22
	Lösemittel D	2.853
	Lösemittel E	3.640
	Lösemittel F	9.215
	Säulenmaterial	840
<b>Energie [MJ]</b>	elektrisch, Strom	55.923
<b>Sonstiges [kg]</b>	Produktgemisch	2.839
	Produkt	100
	<b>kg</b>	<b>11.674.738</b>
	<b>MJ</b>	<b>55.923</b>
<b>OUTPUT</b>		
<b>Betriebsstoffe [kg]</b>	Thermalöl H (T1)	2.075.975
	Thermalöl H (T2)	2.343.017
	Thermalöl K (T1)	2.061.977
	Thermalöl K (T2)	4.543.161
	Thermalöl TK (T1)	459.930
	Thermalöl TK (T2)	105.919
	Kondensat	5.103
<b>Reststoffe [kg]</b>	Feststoff, Entsorgung	840
	Lösemittel, Verbrennung	30.706
	Abwasser, Behandlung	22.388
<b>Sonstiges [kg]</b>	Abluft	27.936
	Produkt	592
<b>Emissionen [MJ]</b>	Abwärme	17.188
	<b>kg</b>	<b>11.677.543</b>
	<b>MJ</b>	<b>17.188</b>

Outputseitig weist die Bilanz ein Abfallaufkommen von 53,9 t je Batch-Ansatz auf, wobei dies hauptsächlich die Entsorgung von Lösemitteln und Abwasser umfasst. Die unter den direkten Emissionen aufgeführte Abwärme resultiert aus Verlusten beim Wärmeeintrag sowie aus den Wirkungsgraden der Maschinen. Dieser Outputstrom dient lediglich der Bilanzierung und wird im Rahmen der ökologischen Bewertung nicht berücksichtigt.

Tab. 5.3 Verrechnungsfaktoren für die Bereitstellung von Wärme auf den verschiedenen T-Niveaus zur Ermittlung der energetischen Aufwendungen bei der Aufbereitung eingesetzter Betriebsstoffe

Temperaturschiene	Verrechnungsfaktor	Einheit	Anmerkung
TK (T2)	1,43	kW <sub>Strom</sub> /kW <sub>Kälte</sub>	Berücksichtigt die Verbrauchskennzahlen von den Verdichtern (Kaskade), deren Kühlung und den Ventilatoren des Kühlturms
K (T2)	0,39	kW <sub>Strom</sub> /kW <sub>Kälte</sub>	Berücksichtigt die Verbrauchskennzahlen vom Verdichter, dessen Kühlung und den Ventilatoren des Kühlturms
TK (T1)	0,99	kW <sub>Strom</sub> /kW <sub>Kälte</sub>	Berücksichtigt die Verbrauchskennzahlen vom Verdichter, dessen Kühlung und den Ventilatoren des Kühlturms
K (T1)	0,15	kW <sub>Strom</sub> /kW <sub>Kälte</sub>	Berücksichtigt die Verbrauchskennzahl der Ventilatoren des Kühlturms

Für die in der Bilanz aufgeführten Stoffe und Energien werden zur Ermittlung der Elementarflüsse, die der Erstellung der Sachbilanz dienen, generische Datensätze verwendet, die im Anhang Kapitel A2.2 beschrieben sind. Die erhaltenen Elementarflüsse werden anschließend für die Wirkungsabschätzung mit den Charakterisierungsfaktoren, die in den gewählten Charakterisierungsmodellen für die betrachteten Wirkungskategorien hinterlegt sind, verrechnet.

## 5.5 Wirkungsabschätzung

In diesem Kapitel sind die Resultate der ökologischen Bewertung des Produktionsprozesses dargestellt. Diese umfassen die Wirkungsabschätzung für den Prozess als auch detaillierte Betrachtungen, in denen die ökologischen Aufwendungen auf die einzelnen GO heruntergebrochen werden. Hinzu kommen die Ergebnisse der detaillierten Prozessanalysen, die auf den Bilanzen der unterschiedlichen Ebenen der Modellierung und den Erkenntnissen der Schwerpunktanalysen und Sensitivitätsstudien aufbauen.

### 5.5.1 Bewertung des Produktionsprozesses

Die Tab. 5.4. zeigt die Ergebnisse der ökologischen Bewertung des Produktionsprozesses in den betrachteten 18 Wirkungskategorien (WK) bezogen auf die funktionelle Einheit von einem Batch-Ansatz. Ein direkter Vergleich zwischen den WK ist aufgrund der unterschiedlichen Referenzsubstanzen und unterschiedlichen betrachteten Umweltproblemfeldern nicht möglich. Eine erste Einordnung der Ergebnisse erfolgt mittels Normierung.

Tab. 5.4: Ergebnisse der ökologischen Bewertung des Produktionsprozesses in 18 WK (Charakterisierungsmodelle der ReCiPe 2008 Methode; Perspektive: Individualist [111])

Wirkungskategorie	<b>PMF</b>	<b>FET</b>	<b>HT</b>	<b>IR</b>	<b>CC</b>	<b>ALO</b>
Einheit	kg PM10-Äq.	kg 1,4-DCB-Äq.	kg 1,4-DCB-Äq.	kg U235-Äq.	kg CO <sub>2</sub> -Äq.	m <sup>2</sup> a
Wert	94	3.417	6.437	13.028	145.493	943
Wirkungskategorie	<b>NLT</b>	<b>OD</b>	<b>POF</b>	<b>MET</b>	<b>TA</b>	<b>TET</b>
Einheit	m <sup>2</sup>	kg CFC-11-Äq.	kg NMVOC	kg 1,4-DCB-Äq.	kg SO <sub>2</sub> -Äq.	kg 1,4-DCB-Äq.
Wert	28	0,08	290	1.296	255	48
Wirkungskategorie	<b>ULO</b>	<b>WD</b>	<b>FD</b>	<b>MD</b>	<b>FE</b>	<b>ME</b>
Einheit	m <sup>2</sup> a	m <sup>3</sup>	kg Öl-Äq.	kg Fe-Äq.	kg P-Äq.	kg N-Äq.
Wert	302	739	47.718	14.539	47	63



In Abb. 5.7 sind die aus einem Batch-Ansatz resultierenden ökologischen Aufwendungen in einem Balkendiagramm, normiert auf 100 %, dargestellt. Für die verschiedenen WK ist der Einfluss der verschiedenen Input- und Outputklassen gezeigt. Die detaillierte Quantifizierung der Aufwendung in den einzelnen Klassen ist im Anhang in Tab. A.2.2 zusammengefasst.

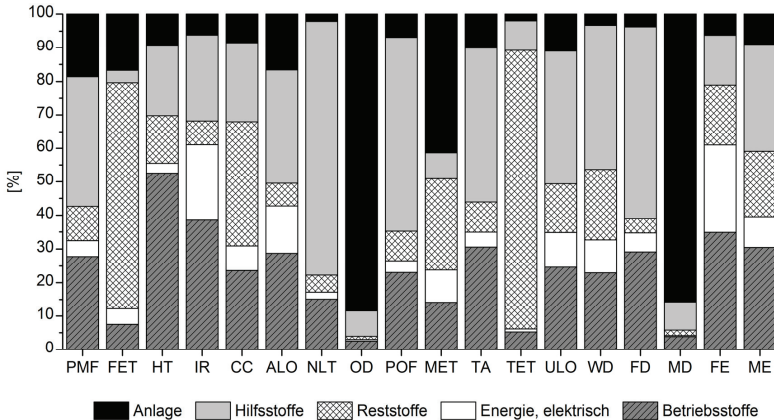


Abb. 5.7: Ergebnisse der Wirkungsabschätzung für den Produktionsprozess, normiert auf 100 % zur Darstellung des Einflusses der Inputs und Outputs entsprechend der vorgenommenen Klassifizierung (Charakterisierungsmodelle der ReCiPe 2008 Methode [111])

Der Anteil der **Hilfsstoffe** an den potentiellen ökologischen Aufwendungen schwankt zwischen 4...76 %, wobei die drei WK *Natürliche Landumformung* (NLT), *Verbrauch fossiler Rohstoffe* (FD) und *Photochemische Oxidation* (POF) mit einem Anteil von über 50 % deutlich hervortreten. Die durch den Verbrauch an **elektrischer Energie** verursachten ökologischen Aufwendungen liegen zwischen 0,5...27 %. Vorrangig in den WK *Ionisierende Strahlung* (IR) und *Überdüngung Frischwasser* (FE) nimmt diese Inputklasse mit einem Beitrag von über 20 % einen relativ großen Anteil ein, wohin gegen dieser in den anderen WK mit Werten zwischen 0,5...15 % vergleichsweise gering ausfällt. Der Anteil der **Betriebsstoffe** an den ökologischen Gesamtaufwendungen variiert zwischen 3...53 %. In den WK *Feinstaubbildung* (PMF), *Landwirtschaftliche Landnutzung* (ALO), *IR*, *Terrestrische Versauerung* (TA), *Humantoxizität* (HT), *Urbane Landnutzung* (ULO), *FD*, *FE* und *Überdüngung Salzwasser* (ME) beträgt der Anteil mehr als 25 % und stellt einen der Inputs dar, die den größten bzw. zweitgrößten prozentualen Beitrag repräsentieren. Im Vergleich der WK untereinander schwankt der prozentuale Anteil der **Reststoffe** an den ökologischen Aufwendungen zwischen 1...83 % und zeigt damit die zweithöchste Bandbreite der sechs Input- und Outputklassen auf. Vor allem die Ökotoxizitätswirkungskategorien *Süßwasser* (FET) und *Terrestrisch* (TET) weisen mit über 50 % einen sehr hohen Anteil auf. Noch deutlicher variiert die Inputklasse **Anlage** im Vergleich der Anteile in den WK mit einer Schwankungsbreite von 86 Prozentpunkten. In fünf WK liegt der Beitrag über 40 %, in weiteren fünf WK zwischen 10...39 %. Den größten Anteil verzeichnen die WK *Verbrauch an Metallen* (MD) mit 86 % und *Ozonabbau* (OD) mit 88 %. Prozessbedingte **Emissionen und Edukte** werden nicht bewertet, da wie in der Datenerhebung (Kapitel A2.2) und den Annahmen (Kapitel A2.3) beschrieben, die Berücksichtigung der Abluft und der Reaktion aufgrund der Datenlage nicht möglich war.

Diese Ergebnisse belegen, dass die Inputgröße Anlage bei der Bewertung von Produktionsprozessen, die in MZA betrieben werden, nicht vernachlässigbar ist und das Ergebnis in einzelnen WK signifikant beein-

flussen kann. Die in der Literatur zu findenden Hinweise (siehe Kapitel 2.4), dass der Beitrag der Apparate bzw. der Anlage vernachlässigbar gering ist, können nicht bestätigt werden. Basierend auf den erhaltenen Daten wird empfohlen, den Vorgaben im ILCD-Handbook [29] und der EU-Leitlinie [5] zu folgen, nach denen Anlagen in den Betrachtungen zu berücksichtigen sind. Der Überblick über die verschiedenen WK zeigt auch, dass keine einheitlichen Tendenzen zwischen diesen erkennbar sind. Dies bestätigt die Forderung der Europäischen Kommission [5] alle WK zu betrachten, da die unterschiedlichen Umweltproblemfelder unterschiedliche Schwerpunkte bei der Bewertung berücksichtigen.

Die Untersuchungen zeigen, dass bei der ökologischen Bewertung des Produktionsprozesses verschiedenste Größen Einfluss auf das Ergebnis nehmen können. Diese Größen sind teilweise abhängig von der betrachteten WK und resultieren in unterschiedlichen Aussagen bzgl. der Auswirkungen. Daraus kann rückgeschlossen werden, dass die Betrachtung lediglich einzelner Umweltproblemfelder der multi-dimensionalen Problematik der Umweltbewertung nicht gerecht wird. Dies birgt das Risiko, Produktionsprozesse hinsichtlich einzelner WK auf Kosten anderer WK zu verbessern. Dies zeigen auch die Autoren Henderson et al. [153] am Beispiel biokatalytischer Prozesse im direkten Vergleich zur chemischen Route in den pharmazeutischen Produktionen. In den Betrachtungen werden daher nicht nur einzelne WK herangezogen, sondern möglichst eine Vielzahl von Umweltproblemfeldern abgedeckt. Für detailliertere Untersuchungen, wie in Kapitel 5.5 und 5.6 gezeigt, wird die Anzahl der betrachteten WK in der Darstellung allerdings aus Gründen der Übersicht und des Umfangs reduziert.

### Normierung

Die Abb. 5.8 zeigt die relative Größenordnung der Ergebnisse der ökologischen Bewertung in den einzelnen WK an den europäischen Gesamtaufwendungen Europas bezogen auf das Betrachtungsjahr 2000. Die Einordnung bezogen auf Europa erfolgt aufgrund des betrachteten Produktionsstandortes Darmstadt sowie des vorrangig gewählten räumlichen Maßstabs Europa, auf den sich ein Großteil der verwendeten generischen Datensätze zur Erstellung der Sachbilanz bezieht. Als Referenzwerte dienen die verursachten Auswirkungen der Bevölkerung, die eine Population von 464.815.432 Menschen umfasst.

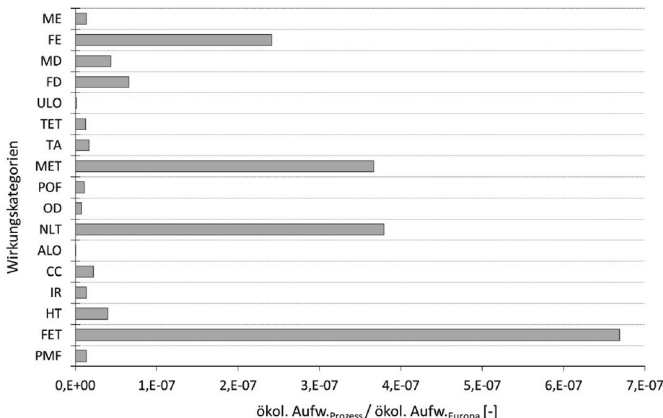


Abb. 5.8: Normierung der erhaltenen Ergebnisse der ökologischen Bewertung, bezogen auf den durch die europäische Bevölkerung verursachten Aufwendungen (Bezugsjahr 2000, ReCiPe 2008 V1.11)

Die Normierung zeigt, dass die WK *Frischwasser Ökotoxizität* (FET), *Natürliche Landumformung* (NLT), *Seewasser Ökotoxizität* (MET) und *Überdüngung Frischwasser* (FE) im Vergleich zu den anderen WK deutlich hervortreten. Die durch den untersuchten Produktionsprozess verursachten Auswir-

kungen sind in diesen WK im Verhältnis zu denen durch die europäische Bevölkerung hervorgerufenen Effekten wesentlich größer. In den WK *Landwirtschaftliche Landnutzung* (ALO) und *Urbane Landnutzung* (ULO) zeigen sich im Vergleich deutlich geringere Auswirkungen. Die anderen acht WK ordnen sich in diesem Vergleich im Mittelfeld an. In der WK *Verbrauch von Wasser* (WD) liegen keine Normierungsfaktoren vor, sodass diese hier nicht betrachtet werden kann.

Für die Auswahl der WK, welche für die detaillierteren Prozessbewertungen und die ebenfalls vorgesehenen Prozessanalysen zur Darstellung der ökologischen Aufwendungen genutzt werden, wird zum einen die Relevanz der normierten Werte herangezogen – je größer der Wert, desto größer ist im Vergleich die relative Belastung des Umweltproblemfeldes. Da dies, wie in Kapitel 5.3 beschrieben, kritisch zu hinterfragen ist, werden zum anderen die für den Sektor chemische Industrie typischen Umweltwirkungen, wie Toxizitäten für Umwelt und Mensch resultierend aus dem Einsatz von einer Vielzahl an Lösemitteln als auch bedingt durch die Heiz- und Kühlvorgänge hohen Verbräuche an fossilen Ressourcen berücksichtigt. Anhand dieser Kriterien werden für die nachfolgenden Analysen die WK *Seewasser Ökotoxizität* (MET), *Überdüngung Frischwasser* (FE), *Humantoxizität* (HT), *Verbrauch fossiler Rohstoffe* (FD) und *Natürliche Landumformung* (NLT) ausgewählt. Aufgrund der aktuellen politischen Diskussionen und der sowohl nationalen als auch internationalen Bedeutsamkeit wird außerdem das Umweltproblemfeld *Klimaänderung* (CC) in die Betrachtungen mit einbezogen.

### 5.5.2 Bewertung der Grundoperationen des Produktionsprozesses

Die Bewertung der Grundoperationen, siehe Abb. 5.9, erfolgt in den ausgewählten sechs WK basierend auf den Daten der Modellebene 2. In der Bewertung werden auch hier die Inputs und Outputs der Klassifizierung Hilfsstoffe, Betriebsstoffe, elektrische Energie, Anlage und Reststoffe berücksichtigt. Die Anteile der zentralen Elemente in der Inputklasse Anlage sind dabei nicht dargestellt, da diese nach dem gewählten Ansatz (vgl. Kapitel 4.2.3.) pauschal auf die Produktionsprozesse umgelegt werden und an dieser Stelle keine Aussagekraft besitzen bzw. keinen informativen Mehrwert generieren.

Die Diagramme in der Abb. 5.9 a-f zeigen die Verteilung der ökologischen Aufwendungen des Produktionsprozesses auf die einzelnen GO, deren Abkürzungen der Darstellung in Abb. 5.1 entsprechen. Die Zuordnung zu den einzelnen Inputs und Outputs stellt eine Schwerpunktanalyse dar, die die stoffliche bzw. energetische Abhängigkeit der Gesamtaufwendungen widerspiegelt. Ein Vergleich der Ergebnisse der Schwerpunktanalyse zwischen den WK zeigt, dass abhängig vom betrachteten Umweltproblemfeld der Anteil der einzelnen GO sowie der Inputs und Outputs an den Gesamtaufwendungen stark variieren kann, siehe dazu auch die Abb. A2.3 im Anhang.

Über alle WK werden der GO CR01 mit 18...46 % der größte bzw. der zweitgrößte Anteil der gesamtökologischen Aufwendungen des Produktionsprozesses zugeordnet. Ähnliches zeigt sich bei der GO DE04, die quantitativ der CR01 nachgeordnet ist. Eine Ausnahme stellt hier die WK NLT dar, bei der lediglich 4 % der ökologischen Aufwendungen auf diese GO entfallen. Genau gegensätzlich verhalten sich die Ergebnisse der GO EX02, deren Anteil in allen WK mit 1...4 % am geringsten ausfällt. Die GO, die in der Aufreinigung nach der EX02 und vor der CR01 angesiedelt sind, tragen zwischen 1...15 % an den Gesamtaufwendungen bei. Die Anteile der GO, die auf der CR01 folgen, zeigen keine klaren Tendenzen und variieren deutlich zwischen den WK.

Der Anteil der durch die belegten TAn (**Anlage**) verursachten ökologischen Aufwendungen ist für die GO TR01 mit Werten zwischen 34...89 % über alle WK auffällig, siehe auch Abb. A2.3 im Anhang. Dies ist begründet in den Materialarten und der Komplexität der TAn, siehe dazu die Detailanalysen zur MZA in Kapitel 4.3.1. Aufeinanderfolgenden GO, betrieben in der gleichen TAn, werden die ökologischen Aufwendungen nur anteilig zugeordnet. Dieser Einflussfaktor spiegelt sich in den zugeordneten Umwelt-

## 5 Ökologische Bewertung eines Produktionsprozesses in einer Mehrzweckanlage

wirkungen der Inputgröße Anlage in den GO EX02, DE01 und KR01 sowie den GO DE02 und KR02 wider. Die Absolutwerte der beiden Kristallisationen KR01 und KR02 weisen aufgrund der zusätzlichen Belegung einer Drucknutsche, einen im Vergleich zu den anderen in den TAN betriebenen GO, erhöhten Betrag auf. Ebenfalls in der gleichen TAN betrieben werden die GO DE04 und KR03, wobei die Aufarbeitung wie in Kapitel 5.1 beschrieben, parallel in zwei Strängen und damit zwei TAN erfolgt. Daher fällt der ökologische Aufwand, der durch den apparativen Input generiert wird, höher aus. Die Ergebnisse zeigen, dass anhand der eindeutigen Zuordnung zu den einzelnen GO auch der Einfluss der Produktionsplanung auf die ökologische Bewertung durch die Zuweisung der TAN abgebildet werden kann.

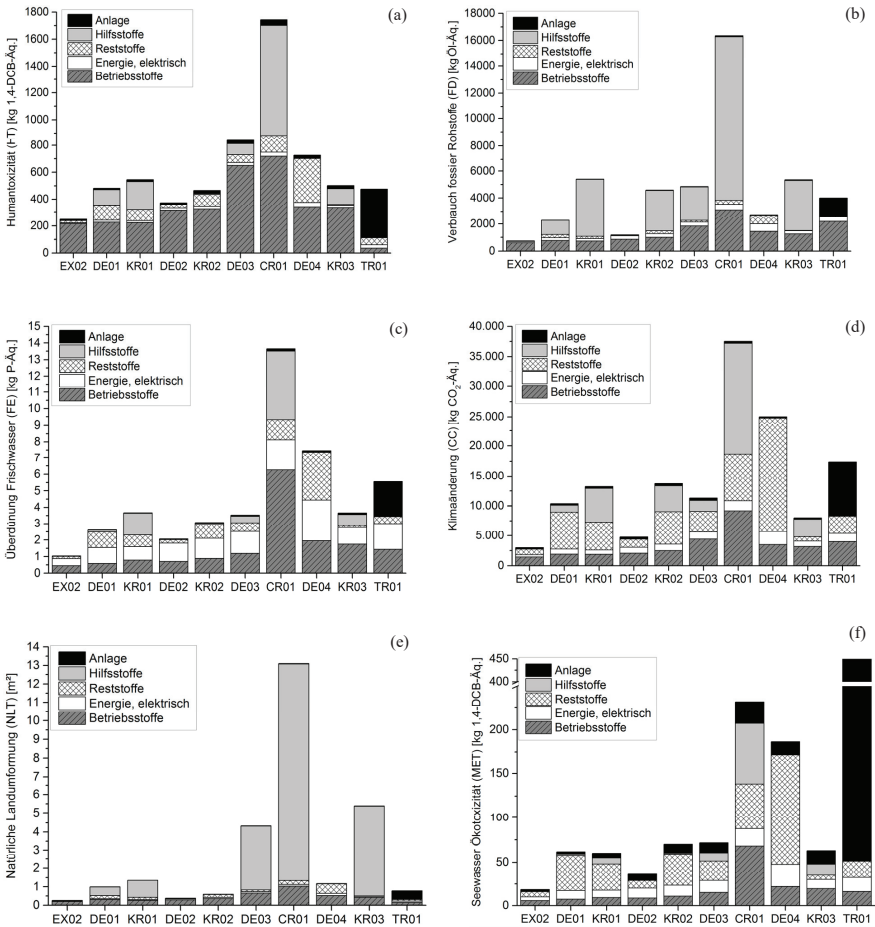


Abb. 5.9: Verteilung der ökologischen Aufwendungen auf die Grundoperationen in den WK HT (a), FD (b), FE (c), CC (d), NLT (e) und MET (f), bewertet mittels Charakterisierungsmodellen der ReCiPe 2008 Methode [111]

Sowohl die Hilfs- als auch die Betriebsstoffe verursachen, mit Ausnahme der WK MET, in den verschiedenen GO anteilig die höchsten ökologischen Aufwendungen. Dies zeigt sich quantitativ besonders deutlich in den Ergebnissen zur GO CR01. In der WK HT (Abb. 5.9 a) zeigt die GO DE03 für die Inputgröße **Betriebsstoffe** ähnlich hohe Werte, wie die darauffolgende CR01. Auffällig ist außerdem der stark variierende Einfluss der Inputgröße Betriebsstoffe für die GO TR01. Dieser zeigt für die WK HT, verglichen mit den anderen GO, deutlich geringere Absolutwerte. Über alle WK zeigen die Ergebnisse für die GO EX02, DE01 und KR01 sowie DE02 und KR02 als auch DE04 und KR03 quantitativ ähnlich hohe Werte. Dabei sind die oben beschriebenen Belegung der TAn sowie die in dieser Inputklasse zusammengefassten Stoffe und Energien, vgl. Kapitel 2.3.2, zu berücksichtigen. Hinzukommt, dass in der Modellebene 2 sämtliche mit dem Betrieb einhergehenden Aufwendungen erfasst werden und die Annahme gilt, dass die eingesetzten Mengen an Löse- und Reinigungsmitteln unmittelbar mit dem Nennvolumen der Hauptapparate korrelieren. Basierend darauf lassen die Tendenzen vermuten, dass die Reinigung der TAn einen großen Einfluss auf die Ergebnisse in Bezug auf die Betriebsstoffe hat, da die GO, die in den gleichen TAn betrieben werden, quasi gleiche Aufwendungen zeigen. Eine konkrete Aussage bzgl. des Einsatzes der Betriebsstoffe, z. B. auch in Bezug auf die verwendeten Temperaturniveaus in den einzelnen GO, ist auf diesem Detaillierungsgrad nicht möglich und bedarf eingehender Prozessanalysen. In Bezug auf die ökologischen Aufwendungen, die durch die **Hilfsstoffe** verursacht werden, sind keine einheitlichen Tendenzen im Vergleich der WK untereinander erkennbar. In den GO DE04, DE02 und TR01 werden keine Hilfsstoffe eingesetzt. Für die anderen GO gilt, dass scheinbar der ökologische Aufwand keine bzw. nur bedingt Rückschlüsse auf die Einsatzmengen zulässt. Ein Vergleich der Anteile einzelner GO zwischen verschiedenen WK zeigt deutlich abweichende Tendenzen. So beträgt für die GO KR03 der durch die Hilfsstoffe bedingte Anteil an den ökologischen Aufwendungen 23 %, in den WK CC, HT oder FE liegt dieser allerdings mit einem Anteil von < 10 % deutlich niedriger. Dagegen bedingen die in der GO KR01 eingesetzten Hilfsstoffe in diesen WK deutlich über 15 % der Umweltwirkungen, in der WK NLT allerdings < 4 %. Die Ergebnisse lassen darauf schließen, dass die Höhe der ökologischen Auswirkungen stark abhängig ist von der Art der eingesetzten Hilfsstoffe. Die eigentliche Einsatzmenge lässt scheinbar keine bzw. nur bedingt Rückschlüsse auf den ökologischen Aufwand zu, sodass auf Basis einer reinen Massenbilanz keine verlässlichen Aussagen möglich sind.

Die ökologischen Aufwendungen, die durch die anfallenden **Reststoffe** verursacht werden, weisen für die GO DE04 in allen WK den höchsten Beitrag auf, gefolgt von der CR01. In der grafischen Darstellung ist erkennbar, dass in den verschiedenen WK die Absolutwerte der GO DE01 und KR02 in einer ähnlichen Größenordnung liegen, ebenso jene der GO KR01 und DE03, deren Absolutwerte im Vergleich etwas geringer ausfallen. Die niedrigsten Beiträge zu den Gesamtaufwendungen der Reststoffe des Produktionsprozesses tragen die GO EX02, KR02 und KR03 bei. Ähnlich wie bei den Betriebsstoffen und bedingt durch deren Einsatz kann hier von einem größeren Einfluss der Reinigung ausgegangen werden. Ebenfalls lässt sich ein Zusammenhang zwischen den Reststoffaufwendungen und dem Hilfsstoffeinsatz vermuten. Allerdings sind für solche spezifischeren Aussagen auch hier detailliertere Betrachtungen unter Nutzung der Daten aus der Modellebene 1 notwendig.

Die während des Betriebes der GO verbrauchte **elektrische Energie** an den TAn nimmt in den WK HT, CC und NLT mit Anteilen zwischen 1...16 % eine eher untergeordnete Rolle ein. Deutlich höhere Anteile weisen die GO in den WK FE, FD und MET auf. Dabei zeigen sich für die GO CR01, DE04 und TR01 deutlich höhere Aufwendungen als in den anderen GO. Bei der WK FD tritt dies vor allem in den GO DE02 und DE04 auf. Die anderen GO zeigen ähnlich hohe Absolutwerte. Der Aufwand resultiert entsprechend der Definition der Inputklasse aus dem Einsatz der Pumpen, die das Thermalöl befördern, und dem Basis- als auch aktiven Betrieb der Vakuumpumpen sowie der Überdruckerzeugung und den Rührern. Eine genaue Zuordnung ist basierend auf den Bilanzierungsdaten der GO nicht möglich. An dieser Stelle ist auch hier eine Betrachtung auf apparativer Ebene und damit der Modellebene 1 erforderlich.

Die Ergebnisse der ökologischen Bewertung auf Prozessebene zeigen, dass vorrangig Hilfsstoffe, Betriebsstoffe und die anfallenden Reststoffe einen großen Einfluss auf die Umweltperformance des Produktionsprozesses ausüben. Zu ähnlichen Erkenntnissen gelangen andere Autoren, die Produktionsprozesse in der chemischen Industrie bewerten. So zeigen Jiménez-Gonzalez et al. [55], dass ca. 50 % aller ökologischen Auswirkungen auf den Einsatz der Lösemittel zurückzuführen sind (WK Klimaänderung). Ähnliche Aussagen treffen die Autoren Tufvesson et al. [113], die häufig Lösemittel als einen der kritischsten Einflussfaktoren auf die ökologische Performance einstufen. Ebenfalls als einflussreich im Bereich der Spezialchemie werden die energiebezogenen Aufwendungen gewertet. So zeigen u. a. die Autoren Bieler et al. [67], Grundemann und Scholl [41] sowie Paschetag et al. [42], dass in der chemischen Industrie, besonders Spezialchemie, der Bedarf an elektrischer Energie und Wärme mehr als 80 % der Gesamtaufwendungen verursachen können. Ebenfalls als wesentlicher Einflussfaktor wird von Grundemann und Scholl [41] sowie Paschetag [42] die Produktionsanlage selbst angegeben.

Die gezeigte Prozessbewertung unter Berücksichtigung der einzelnen GO des Produktionsprozesses liefert einen ersten Eindruck wie sich die ökologischen Aufwendungen verteilen. Im Hinblick auf das Ziel, Ansatzpunkte für mögliche Verbesserungen zu finden, besteht basierend auf solchen Daten die Möglichkeit, GO mit hohem ökologischem Aufwand zu identifizieren. Diese GO können anschließend im Rahmen einer detaillierten Analyse auf Verbesserungspotentiale untersucht werden. Um dies zu realisieren sind allerdings Daten in einem deutlich höheren Detaillierungsgrad notwendig. Nachfolgend wird beispielhaft dargestellt, welche Informationen eine Prozessanalyse unter Berücksichtigung von Daten aus der Modellierungsebene 1 liefern kann.

### 5.6 Analyse des Produktionsprozesses

Auf Grundlage des in Kapitel 3.1 vorgestellten 3-Ebenen-Modells können Prozessanalysen in unterschiedlichen Detaillierungsgraden durchgeführt werden. Dies soll an dieser Stelle demonstriert werden. Die Prozessanalysen dienen bei der Bewertung von Prozessabschnitten, die eine verfahrenstechnische Trennaufgabe erfüllen, bzw. einzelner GO der Identifizierung kritischer Einsatzstoffe und Einflussgrößen hinsichtlich der Prozessführung. In diesem Kapitel werden sechs verschiedene Analysen in Form von Schwerpunkt- und Sensitivitätsstudien gezeigt, die im Folgenden kurz beschrieben sind.

#### Schwerpunktanalyse I: Untersuchung der Betriebsweise in der MZA

In dieser Untersuchung wird der aus dem Batchbetrieb der MZA resultierende Einfluss auf die ermittelten Umweltwirkungen des Produktionsprozesses untersucht. Dazu erfolgt basierend auf den Bilanzdaten der Modellierungsebene 1 eine Zuordnung der Massen und Energiebedarfe zum Rüsten und Reinigen der TAn, dem Basisbetrieb der TAn und dem Betrieb der GO in den TAn.

Eine Besonderheit beim Betrieb der GO in der MZA stellen die Haltezeiten dar, die zeitweise auftreten bis die nächste TAn verfügbar ist. Dies bedeutet z. B., dass ein Produktgemisch auf Temperatur gehalten und gerührt oder im Rückfluss verdampft wird. Um die daraus resultierenden Mehraufwendungen zumindest anteilig zu erfassen, werden die durchschnittliche Betriebsdauer der verschiedenen GO in den TAn der MZA über ein Jahr gemittelt und u. a. die Verbräuche der Vakuumpumpen sowie der Gleitringdichtungen etc. daran orientiert. Diese Aufwendungen fließen in den Basisbetrieb mit ein, der nicht zwingend in allen Batchbetrieben anzutreffen ist, allerdings in der hier betrachteten MZA einen wesentlichen Bestandteil darstellt. Das Rüsten und Reinigen nimmt in dem hier betrachteten Produktionsumfeld der Spezialchemikalien einen sehr hohen Stellenwert ein, da die Produktionen im MZA-Umfeld die Gefahr einer Querkontamination bergen. Daher ist eine gründliche Reinigung zwingend erforderlich um eine möglichst hohe, reproduktive Produktqualität sicherstellen zu können. Für den Batchbetrieb in der MZA ist daher in

der ökologischen Bewertung neben dem reinen Betrieb der GO von einem nicht vernachlässigbaren Aufwand für das Rüsten und Reinigen der TAn sowie dem Basisbetrieb auszugehen. Dies soll im Rahmen dieser Schwerpunktanalyse untersucht werden.

### **Schwerpunktanalyse II: Energie- und Ressourceneinsatz**

Diese Schwerpunktanalyse erfolgt auf der Prozessebene (Modellebene 2) und betrachtet nur die mit der Durchführung der GO einhergehenden Aufwendungen, also den Hilfsstoffeinsatz sowie die im Betrieb der GO anfallenden Reststoffmengen und auftretende Produktverluste. Anhand der Daten wird zur Einordnung des Prozesses die Effizienz in Bezug auf die eingesetzten Materialmengen mittels der outputbezogenen Kennzahl *E-Faktor* (Environmental Factor, [154]) und der inputbezogenen Kennzahl *Bilanzausbeute* [155] ermittelt.

Der E-Faktor setzt die Menge an Lösemittelabfällen in der Produktion ins Verhältnis zur Produktmenge. Nicht berücksichtigt wird der Wasseranteil in wässrigen Strömen, da dieser zu einem hohen E-Faktor und damit zu einer Verfälschung der Ergebnisse führen kann. Ein hoher E-Faktor weist auf hohe Abfallmengen und somit auf negative Umweltwirkung hin. [154] Mit dieser Kennzahl kann basierend auf einer einfachen, rezepturbasierten Prozessbilanz eine erste Einschätzung hinsichtlich der Materialeffizienz in Bezug auf die Nutzung der eingesetzten Hilfsstoffe erfolgen. Für Prozesse, die nur geringe Mengen oder keine organischen Lösemittel verwenden dafür aber z. B. große Abwassermengen produzieren, ist der E-Faktor zur Bewertung nicht geeignet. Hier müssen andere Kennzahlen oder Indikatoren wie z. B. der Wasserfußabdruck zur Bewertung herangezogen werden.

Ebenfalls basierend auf den Daten einer Prozessbilanz kann die Bilanzausbeute [155] als eine Kennzahl zur Bewertung der Materialeffizienz ermittelt werden. Die Materialeffizienz in der industriellen Produktion beschreibt unter Berücksichtigung des industriellen Produktions- und Verbrauchskreislaufs, welche Mengen Material eingesetzt werden, um eine bestimmte Produktmenge zu produzieren<sup>23</sup> [156].

Durch eine Verknüpfung mit den ökologischen Aufwendungen der Grundoperationen sollen die Umweltauswirkungen, ermittelt werden, die durch das Reststoffaufkommen verursacht und in den Produktverlusten gebunden sind. Orientiert an dem Ansatz der Materialflusskostenrechnung (MFKR) werden die Aufwendungen, die resultierend aus dem Prozess dem Produkt zugeordnet werden können, gegenübergestellt. So können ökologische Aufwendungen herausgestellt werden, die durch den nicht wertschöpfenden Anteil des Prozesses verursacht sind.

Ebenfalls Bestandteil der Schwerpunktanalyse sind die im Betrieb aufgewandten Wärmemengen je GO zum Heizen, Kühlen, Verdampfen und Kondensieren, die als Betriebsstoffe erfasst werden. Dies umfasst sowohl die einzelnen Prozessschritte, als auch den Betrieb der Apparate, wie z. B. das Kühlen von Vakuumpumpen. Die Verbräuche beziehen sich dabei auf die verschiedenen Temperaturniveaus, die in der MZA zur Verfügung stehen, vgl. Kapitel 5.1. Für die einzelnen Temperaturschienen werden die potentiellen ökologischen Aufwendungen je MJ eingetragene bzw. abgeführte Wärme ermittelt, die mit der Bereitstellung der Betriebsstoffschiene auf den verschiedenen Temperaturniveaus einhergehen.

### **Schwerpunktanalyse III: Untersuchungen zum Betrieb der Grundoperationen**

Diese Schwerpunktanalyse betrachtet die ökologische Bewertung des Betriebes aller GO des Produktionsprozesses. Die ökologischen Aufwendungen werden den GO zugeordnet und der Einfluss der Inputs und Outputs dargestellt. Auch in dieser Analyse werden sowohl das Rüsten und Reinigen als auch der Basisbetrieb nicht erfasst. Anhand der Ergebnisse der vorangegangenen Untersuchungen, werden die GO

<sup>23</sup> Nicht zu verwechseln mit der relativen Ausbeute, die die erhaltene Produktmenge auf einen bestimmten Einsatzstoff bezieht.

mit hohem ökologischem Aufwand identifiziert. Durch die Einbindung der Daten aus der ersten Modell-ebene werden diese einer detaillierteren Betrachtung unterzogen.

### Schwerpunktanalyse IV: Untersuchungen zu den Rüst- und Reinigungsvorgängen

In dieser Schwerpunktanalyse stehen die Rüst- und Reinigungsvorgänge im Vordergrund. Wie bereits beschrieben, stehen dazu Standardreinigungsprotokolle abhängig vom Hauptapparatetyp der TAN zur Verfügung. Ziel ist es zum einen, den Aufwand der den einzelnen GO zugeschlagen wird, zu erfassen und zum anderen, die eingesetzten Betriebsstoffe genauer hinsichtlich ökologischer Aufwendungen zu untersuchen. Außerdem werden zwei unterschiedliche Reinigungsstrategien verglichen, die aus den Standardreinigungsprotokollen für einen RWA und einen Trockner resultieren.

### Sensitivitätsstudie I: Recycling von Lösemittel

Die Studie wird durchgeführt, da im Produktionsprozess sehr große Mengen an Lösemitteln in Form von Hilfs- oder Betriebsstoffen vorrangig zur Reinigung eingesetzt werden. Aus dem Einsatz resultierende Reststoffmengen werden i. d. R. dem Entsorgungsweg „*Thermische Verwertung*“ zugeführt. Anhand dieser Studie wird abgeschätzt, welchen Einfluss das Recycling und Wiederverwenden auf die gesamt-ökologischen Aufwendungen des Produktionsprozesses haben. Die Daten werden mittels dem Freeware Tool *ecosolvent* der ETH Zürich [100] generiert. Mittels dieses Tools kann u. a. ein Vergleich zwischen der Rückgewinnung eines Lösemittels mittels Destillation und dessen Verbrennung zur Entsorgung durchgeführt werden.

### Sensitivitätsstudie II: Einfluss der Faktoren „Apparat“, „Betrieb“ und „Prozess“

In dieser Studie werden verschiedene Einflussparameter im Hinblick auf, die durch die Bereitstellung der Wärmeleistung an den Apparaten verursachten die Aufwendungen, näher untersucht. Der Schwerpunkt liegt dabei auf den Einflüssen durch apparative Ausführungen, den im Betrieb zur Verfügung stehenden Temperaturschienen und deren Regelung sowie den durch den Prozess diktierten Randbedingungen. Verfahrenstechnische Verbesserungen in Produktionsprozessen resultieren u. a. aus der Anpassung eben solcher Parameter. Ziel dieser Sensitivitätsbetrachtung ist es, zu prüfen, ob diese Größen Einfluss auf die Ergebnisse einer ökologischen Bewertung ausüben und ob eine Variation der Parameter in signifikanten Veränderungen der ökologischen Aufwendungen resultiert.

Diese Analysen unterstützen das Verständnis zu den Ergebnissen der ökologischen Bewertung und ermöglichen durch die gezielte Betrachtung in den drei im Modell bereitgestellten Detaillierungsgraden GO, Prozess und Infrastruktur die Identifikation von Verbesserungsansätzen. Vor allem im Hinblick auf die Identifizierung von verfahrenstechnischen Verbesserungsansätzen sind Aussagen bzgl. dem Auflösungsgrad der Modellierung relevant und der damit verbundenen Möglichkeit, Verbesserungen sowohl an Apparaten als auch im Prozess oder Betrieb zu berücksichtigen sowie deren Auswirkungen zu quantifizieren.

## 5.6.1 Schwerpunktanalyse I: Untersuchung der Betriebsweise der MZA

Für diese Untersuchung dienen die Daten aus Modellebene 1 und 2 als Basis. Die Inputs und Outputs der einzelnen GO werden den drei Bereichen Rüsten und Reinigen, Basisbetrieb und Betrieb GO zugeordnet. Der jeweilige prozentuale Anteil an den ökologischen Gesamtaufwendungen des Produktionsprozesses, zeigt die Abb. 5.10.

In den für die Prozessanalysen betrachteten WK *Verbrauch fossiler Ressourcen* (FD), *Klimaänderung* (CC), *Seewasser Ökotoxizität* (MET) und *Natürliche Landumformung* (NLT) beträgt der Anteil des Betriebs der GO mehr als 50 %. Lediglich in den WK *Humantoxizität* (HT) und *Überdüngung Frischwasser*



(FE) liegt dieser unter 40 %. Das Rüsten und Reinigen weist in der WK HT mit 61 % den größten Anteil an den ökologischen Auswirkungen auf. In den anderen fünf WK liegt dieser zwischen 14...36 % und trägt somit bis zu einem Drittel an den Gesamtaufwendungen bei. Der Basisbetrieb verursacht mit 2...17 % den geringsten Anteil an den ökologischen Aufwendungen in den verschiedenen WK. Die Ergebnisse bestätigen die Aussage von Wesche et al. [61], dass der Einfluss der absatzweisen Prozessführung auf die ökologische Bewertung des Produktionsprozesses signifikant ist.

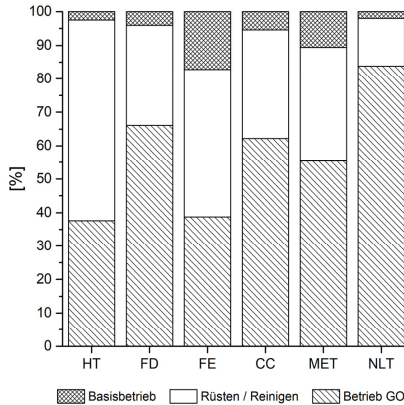


Abb. 5.10: Verteilung der ökologischen Aufwendungen des Produktionsprozesses im Hinblick auf den Batchbetrieb in der MZA (Charakterisierungsmodelle der ReCiPe 2008 Methode [111])

Die Ergebnisse der Analyse I belegen, dass neben dem Betrieb der GO auch das Rüsten und Reinigen wesentlich zu den ökologischen Aufwendungen des Produktionsprozesses beiträgt, vorrangig die eingesetzten Betriebsstoffe und anfallenden Reststoffe. Für die weiterführenden Analysen werden daher die drei Bereiche Betrieb der GO, Rüsten und Reinigen sowie Basisbetrieb getrennt voneinander betrachtet. In der Schwerpunktanalyse IV werden aufgrund ihres hohen Anteils an den Gesamtaufwendungen das Rüsten und Reinigen im Detail untersucht. Im Hinblick auf die Zielsetzung Daten zur Prozessevaluierung und als Basis zur Identifizierung von Verbesserungsansätzen mit Fokus auf die verfahrenstechnische Realisierung der GO bereitzustellen, ist diese Trennung zwingend erforderlich.

## 5.6.2 Schwerpunktanalyse II: Ressourcen- und Energieeinsatz

Im Folgenden ist der Produktionsprozess, strukturiert in GO, als Sankey-Diagramme des Ressourcen- und Energieeinsatzes dargestellt. Sankey-Diagramme werden u. a. genutzt um Material- und Energieströme zu visualisieren, wobei die Ströme i. d. R. als Pfeile abgebildet sind, deren Breite sich proportional zu ihrem Mengenstrom verhält. Sankey-Diagramme zeigen Ströme innerhalb des Produktionsprozesses deutlicher auf als eine Beschreibung mittels Zahlen [157] und liefern einen ersten Überblick über die Verläufe der Stoffe und Energien im Prozess.

### Ressourceneinsatz

Die Abb. 5.11 zeigt die bilanzierten Mengen an eingesetzten Hilfsstoffe (HS, grau), erhaltenem und eingesetztem Produkt (PR, rot) und den Reststoffen, die aus dem Betrieb der GO resultieren (RS, orange) sowie dem im Prozess zwischen den GO weitergeleiteten Produktgemisch (PG, rosa). Die hier gewählte Darstellung des Produktgemisches enthält lediglich die Hilfsstoffe und Verunreinigungen, da das Produkt

## 5 Ökologische Bewertung eines Produktionsprozesses in einer Mehrzweckanlage

extra ausgewiesen wird und daher in den angegebenen Mengen zum Produktgemisch nicht enthalten ist. Außerdem sind die in den einzelnen GO zu verzeichnenden Produktverluste (PrV, blau) zugeordnet. Nicht in der Darstellung enthalten sind die Verbräuche an elektrischer Energie sowie die aufgewandten Betriebsstoffmengen. Dies ist in der Übersichtlichkeit des Diagramms begründet, da Energien aufgrund der abweichenden Einheit nicht proportional ins Verhältnis zu den Stoffmengen gesetzt werden können. Vor allem in Bezug auf die Temperierung liegen die Betriebsstoffmengen in einer Größenordnung von  $10^2$  über denen der im Produktionsprozess benötigten Hilfs- und Reststoffe, siehe Bilanz in Tab. 5.2. Die Abbildung der Wärmemengen erfolgt daher separat in Abb. 5.13.

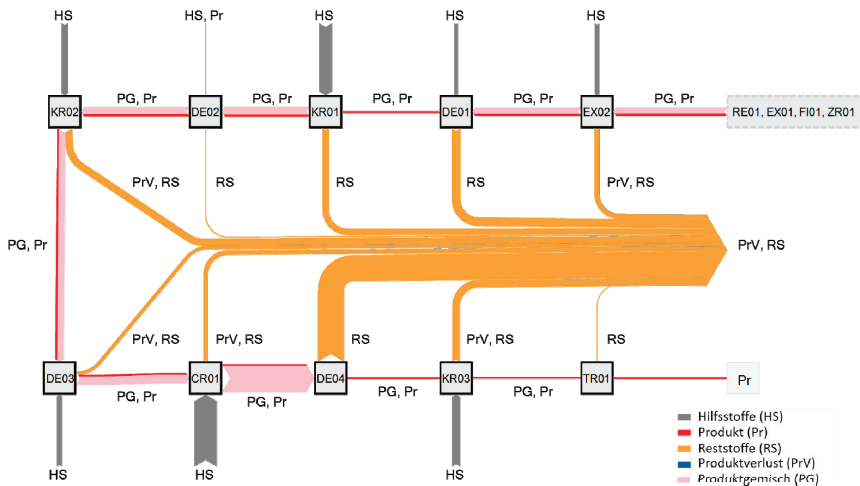


Abb. 5.11: Sankey-Darstellung des in GO strukturierten Produktionsprozesses mit Schwerpunkt auf den Hilfsstoffeinsatz und dem Reststoffaufkommen, erstellt mit der Software e!Sankey® (v4) der ifu Hamburg GmbH

Die Bilanzdaten weisen eine eingesetzte Hilfsstoffmenge von 21.152 kg aus. Das aus dem Betrieb der GO resultierende Reststoffaufkommen beträgt 23.387 kg, von denen etwas mehr als 1 % den Produktverlust über das Downstream Processing ausmachen. Die Darstellung zeigt, dass der Betrieb der GO CR01 und KR01 mit einem hohen Hilfsstoffeinsatz verbunden ist. Ebenfalls einen höheren Hilfsstoffverbrauch weisen die anderen Kristallisationen KR02 und KR03 sowie die DE03 im Prozess auf. Das mit Abstand höchste Reststoffaufkommen zeigt die DE04, welches unmittelbar aus dem Hilfsstoffeinsatz der CR01 resultiert. Ebenso auffällig sind die Destillationen DE01 und DE04 sowie die drei Kristallisationen, deren Reststoffaufkommen im Vergleich erhöht ist. Die Mengen liegen in einer ähnlichen Größenordnung.

In dem Sankey-Diagramm spiegelt sich außerdem wider, dass bei einigen GO das Reststoffaufkommen im Betrieb deutlich höher ist als die Menge an eingesetzten Hilfsstoffen oder umgekehrt. So weist die DE01 outputseitig das ca. 2,5-fache an Reststoffen auf, verglichen mit den in der Rezeptur vorgegebenen Hilfsstoffmengen auf der Inputseite. Dies resultiert aus den vorangegangenen GO und den im Produktgemisch mitgeführten Mengen an Lösemitteln, die dort als Hilfsstoffe eingesetzt und durch den Betrieb der DE01 zum großen Teil aus dem Prozess entfernt werden. Ähnlich verhält es sich bei der DE04, deren hohes Reststoffaufkommen aus dem hohem Hilfsstoffeinsatz der vorgeschalteten Chromatographie resultiert. Hier zeigt sich ein unmittelbarer Zusammenhang zwischen der verfahrenstechnischen Realisierung der GO CR01 und dem damit verbundenen Aufreinigungsaufwand, der in der nachgeschalteten Destillati-



on anfällt. Ebenfalls bilanziert sind die Produktverluste, die in den GO EX02, KR02, DE03, CR01 und KR03 auftreten, wobei die GO EX02 die höchste Menge verzeichnet.

Basierend auf den Angaben in der Bilanz (vgl. Tab. 5.2) und den Informationen des Sankey-Diagramms kann der **E-Faktor** als outputseitig bezogene Kennzahl angegeben werden. In Tab. 5.5 ist der E-Faktor für die einzelnen GO dargestellt, ermittelt aus den jeweiligen Produktmengen und den austretenden Reststoffaufkommen, die nicht über den Prozess aufsummiert werden können, da die Bezugsgröße Produktmenge in den einzelnen GO variiert. Die DE04 hat mit ca. 15 kg LM/kg Produkt den mit Abstand höchsten Wert aufgrund der abgetrennten Lösemittelmengen. Die GO DE02 und TR01 hingegen weisen mit Werten  $< 0,5$  kg LM/kg Produkt einen sehr geringen E-Faktor auf. Für alle anderen GO liegen die Werte zwischen ca. 2...5 kg LM/kg Produkt.

Tab. 5.5: Ermittelte E-Faktoren über die einzelnen GO sowie dem Produktionsprozess im Ganzen

	EX02	DE01	KR01	DE02	KR02	DE03	CR01	DE04	KR03	TR01	$\Sigma$
E-Faktor [kg LM-Abfall/kg Produkt]	-	4,7	3,4	0,4	3,3	1,7	2,5	14,2	4,1	0,4	36,6

Zur Berechnung des E-Faktors über den Produktionsprozess wird eine Abfallmenge an Lösemitteln von 21.690 kg berücksichtigt, da die in der EX02 wässrigen Extraktionsmittel an dieser Stelle heraus gerechnet werden. Damit beträgt der E-Faktor für den hier betrachteten Prozess bezogen auf den Betrieb der GO 36,6 kg Lösemittelabfall/kg Produkt und liegt damit im typischen Korridor der Feinchemie, für die in Sheldon [154] Werten zwischen 5...50 kg/kg angegeben sind. Es kann davon ausgegangen werden, dass dieser Wert aufgrund ähnlicher Produktionsmethoden und Anlagenkonfiguration bzw. -typen auf den Bereich der Spezialchemie übertragbar ist.

Um die inputseitig bezogene Kennzahl **Bilanzausbeute** (BA) zu ermitteln, wird der Hilfsstoffeinsatz im Prozess auf die Produktmenge bezogen. Aus der eingesetzten Hilfsstoffmenge von 21.152 kg (siehe Bilanz in Tab. 5.2) und einer Produktmenge von 592 kg, resultiert eine BA von 3 %. Für die diskontinuierlichen Verfahren der Spezialchemie liegt der von Steinbach [155] ermittelte Durchschnittswert bei 61 %. Diese Angabe entstammt einer Analyse von 115 Prozessen mit einer Produktionsmenge von durchschnittlich 1.457 t/a. Die Berechnungen dieser BA basieren auf Stoffbilanzen und beziehen sich auf das isolierte, zu 100 % bereinigte Hauptprodukt. Entsprechend dieser und weiterer Angaben kann davon ausgegangen werden, dass die Aufreinigung in diesen Zahlen nicht enthalten ist, sondern lediglich die Synthesestufen einbezogen sind und damit die reale BA deutlich unter der Einzelverfahren (Synthesen) liegt. [155] Die hohe Abweichung zwischen der ermittelten BA in dieser Untersuchung und den in der Literatur aufgeführten Angaben ist daher wahrscheinlich auf diesen unterschiedlichen Betrachtungsrahmen zurückzuführen. Der hier untersuchte Produktionsprozess weist eine sehr geringe Materialeffizienz auf. Dies ist darin begründet, dass für das Produktmolekül eine Reinheit von  $> 99,9$  % gefordert ist, um die Spezifikation zu erfüllen und daher ein aufwändiges Downstream Processing der Reaktion nachgeschaltet wird.

Um den Ressourceneinsatzes ökologisch zu bewerten, wird der Ansatz der Materialflusskostenrechnung (MFKR) [81] angewandt. Dieser Ansatz ermöglicht eine anteilige Zuordnung der Aufwendungen zum Produkt sowie zu den Abfallströmen und dient ursprünglich der Verteilung monetärer Werte. Diese monetären Aufwendungen setzen sich zusammen aus Kosten für Einsatzstoffe, Energie, Systemkosten und Abfallkosten. Für diese Schwerpunktanalyse wird das Prinzip auf die ökologische Bewertung angewandt, mit Fokus auf den im Produktionsprozess zwischen den GO weitergeleiteten Produktmengen (wertschöpfender Anteil) und den Produktverlusten sowie Reststoffen, zusammengefasst als Materialverluste (nicht wertschöpfender Anteil). In Bezug auf die ökologische Bewertung werden die Edukte, Hilfsstoffe und Betriebsstoffe den Einsatzstoffen zugeordnet. Die Systemkosten umfassen die Inputklasse An-

lage (jährliche Abschreibung und Instandhaltung) und dem aus dem Basisbetrieb resultierender Aufwand. Die Energie wird repräsentiert durch den Input elektrische Energie. Die Zuordnung der Aufwendungen für die Reststoffe erfolgt direkt und zu 100 % dem austretenden, zu entsorgenden Output. Die durch die Inputklassen Edukte, Hilfsstoffe, Betriebsstoffe, elektrische Energie und Anlage sowie den Emissionen verursachten ökologischen Aufwendungen werden anteilig auf die weitergeleitete Produktmenge und Materialverluste verteilt. Diese Verteilung kann über verschiedene Allokationsansätze erfolgen, wie z. B. nach Masse, Geldwert, etc.

In dieser Schwerpunktanalyse sind sowohl Edukte, als auch Emissionen und die Anlage, wie beschrieben, nicht Bestandteil der Untersuchungen. Daher werden inputseitig nur die Hilfsstoffe, Betriebsstoffe sowie die elektrische Energie berücksichtigt und die „ökologischen Systemkosten“ entfallen. Die Verknüpfung der Daten aus der Sankey-Darstellung und der ökologischen Bewertung des Betriebes der GO zeigt den Anteil der ökologischen Aufwendungen auf, die in den Materialverlusten gebunden sind. So können die um die Reststoffe bereinigten ökologischen Auswirkungen, lediglich bedingt durch die Rezeptur, ermittelt werden. Die Bewertung erfolgt ohne evtl. „verschleppten“ Aufwand, wie z. B. durch Abtrennung von Hilfsstoffen aus den vorangegangenen GO, da diese separat durch den nicht-wertschöpfenden Anteil abgebildet sind. In der hier durchgeführten Bewertung wird eine Allokation nach Masse angewandt. Die Tab. 5.6 zeigt die Ergebnisse für die betrachteten sechs WK.

Tab. 5.6: Zuordnung der ökologischen Aufwendungen des Betriebs der GO zu den Materialverlusten sowie dem Produkt nach dem Ansatz der MFKR [81]

Wirkungskategorie	HT	FD	FE	CC	MET	NLT
Einheit	kg 1,4-DCB-Äq.	kg Öl-Äq.	kg P-Äq.	kg CO <sub>2</sub> -Äq.	kg 1,4-DCB-Äq.	m <sup>2</sup>
Gesamtwert	2.201	30.371	17	82.861	422	23
nicht wertschöpfender Anteil	800	2.727	7	45.237	290	2
wertschöpfender Anteil	1.401	27.644	10	37.624	132	21

Die Resultate weisen bezogen auf die Höhe der den Materialverlusten zugeordnet ökologischen Aufwendungen mit Anteilen zwischen 11...92 % große Variationen zwischen den WK auf. In den WK *Klimaänderung* (CC) und *Seewasser Ökotoxizität* (MET) ist der Anteil, der den Materialverlusten zugeschlagen wird, deutlich höher als der Produktanteil. In den anderen vier betrachteten WK liegt der Anteil unter 50 %.

In der Abb. 5.12 sind die ökologischen Aufwendungen zugeordnet zu den einzelnen GO in den WK CC (a) und FD (b) dargestellt. Die Auswertung zeigt die Verteilung des wertschöpfenden und nicht wertschöpfenden Anteils der ökologischen Aufwendungen auf die verschiedenen GO. In der WK CC haben die Reststoffe einen signifikanten Einfluss auf das Ergebnis der ökologischen Bewertung, wohingegen in der WK FD die Hilfs- und Betriebsstoffe einen deutlich größeren Einfluss ausüben, als die Reststoffe. Daher ist bei letztgenannter der wertschöpfende Anteil an den ökologischen Auswirkungen deutlich höher. Die GO CR01 und die Kristallisationen (KR01, KR02, KR03) weisen in beiden WK den höchsten um den nicht wertschöpfenden Part bereinigten Anteil an den potentiellen Umweltwirkungen auf.

Unter Berücksichtigung der Daten aus der Sankey-Darstellung in Abb. 5.11 lassen sich die höheren Umweltwirkungen der CR01 und der Kristallisationen mit dem höheren Hilfsstoffeinsatz begründen. In den Destillationen DE01 und DE03 werden weniger Hilfsstoffe eingesetzt. Dies resultiert in einer Reduzierung der Aufwendungen. Der Einfluss der Hilfsstoffe zeigt sich besonders deutlich in den GO DE02 und DE04, in denen nur wenige bzw. keine Hilfsstoffe eingesetzt werden, sodass der vergleichsweise geringe Anteil von < 3 % die Aufwendungen durch die eingesetzten Betriebsstoffe und elektrische Energie widerspiegelt. Die anderen WK zeigen eine ähnliche Verteilung der produktbezogenen Aufwendungen. Im Anhang Tab. A2.3 sind die Daten zu den einzelnen GO im Überblick dargestellt. In Bezug auf die einzelnen GO wird in dieser Darstellung deutlich, dass die Aufwendungen aus dem Betrieb der GO DE04 vor-

rangig aus dem nicht wertschöpfenden Anteil resultieren. Diese Aufwendungen müssen aus der vorangegangenen CR01 stammen und auf die DE04 übertragen sein, da in eben dieser GO keine Hilfsstoffe eingesetzt werden, siehe Abb. 5.11, und der Anteil der Betriebsstoffe sowie des elektrischen Stroms gering ist. In der Schwerpunktanalyse III werden die ökologischen Auswirkungen dieses „Shiftings“ von Umweltwirkungen detaillierter untersucht.

Aus der Auswertung der WK FD geht außerdem hervor, dass die Betriebsstoffe in Bezug auf die Wärmebereitstellung in diesem Umweltproblemfeld eine untergeordnete Rolle einnehmen. Anderenfalls müssten die Reststoffströme nach der Darstellung im Sankeydiagramm Abb. 5.11 bei der hier angewandten Methode mit einem deutlich höheren ökologischen Aufwand belastet sein. Genauere Untersuchungen bzgl. der Zusammensetzung der ökologischen Aufwendungen erfolgen in Schwerpunktanalyse III.

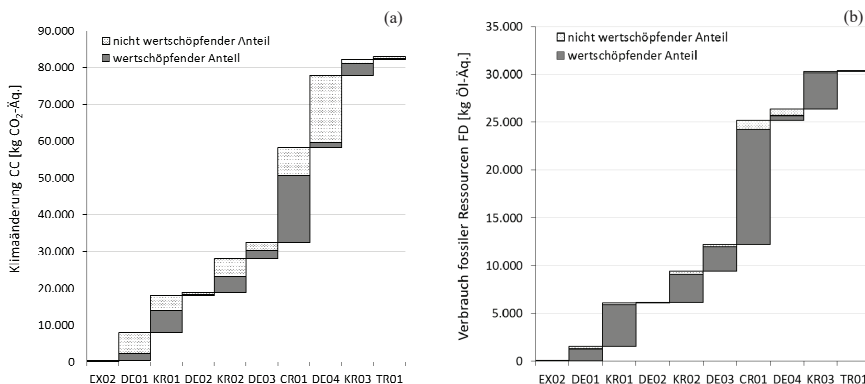


Abb. 5.12: Verteilung der ökologischen Aufwendungen auf die einzelnen GO in den WK CC (a) und FD (b) mittels den Charakterisierungsmodellen der ReCiPe 2008 Methode [111]; Hier die Aufwendungen die dem Produkt zugeordnet werden, bereinigt um die Materialverluste nach dem Ansatz der MFKR [81]

Der E-Faktor belegt, dass der untersuchte Produktionsprozess in einem typischen Korridor dieser Produktionsart und des Anlagentyps, orientiert an den Angaben für die Feinchemie, eingeordnet werden kann. Die BA als weitere hinzugezogene Kennzahl weicht hingegen deutlich von den publizierten Werten ab. Auch wenn anhand der Angaben in der Literatur vermutet werden kann, dass die Aufreinigung in diesen dort gezeigten Werten nicht berücksichtigt ist, weist die ermittelte BA auf eine unterdurchschnittliche Materialeffizienz hin. Dies wird teilweise von der ökologischen Bewertung mittels des Ansatzes der MFKR bestätigt. In einzelnen der hier betrachteten WK liegt der Anteil der nicht wertschöpfenden Aufwendungen deutlich höher, als der Anteil der wertschöpfenden Aufwendungen. Ein effizienterer Materialeinsatz der Hilfsstoffe kann daher die ökologische Performance des Prozesses deutlich verbessern, da eine Reduzierung der eingesetzten Hilfsstoffmengen unmittelbar zur Verringerung des Reststoffaufkommens führt. Die Verringerung der Produktverluste, z. B. durch höhere Ausbeute oder dem Austausch von verfahrenstechnischen GO oder Hilfsstoffen, würde sowohl zur Herstellung der Produktmenge je Batch eine Senkung des Edukts- und Hilfsstoffeinsatzes als auch der anfallenden Reststoffe und der ggf. benötigten Wärmemengen ermöglichen. Im Umkehrschluss würde bei gleicher Menge an eingesetzten Edukten und Hilfsstoffen die ökologischen Aufwendungen je kg Produkt reduziert werden. Eine Reduzierung der eingesetzten Hilfsstoffmenge und damit auch der Reststoffmenge um z. B. 25 % in jeder GO würde die potentiellen Umweltauswirkungen in den untersuchten WK für den Betrieb der GO in Summe zwischen 19...24 % verringern. Ebenfalls eine Reduzierung der ökologischen Auswirkungen kann durch das Recycling der zu entsorgenden Lösemittel als Bestandteil der Reststoffmengen erreicht werden. Die recycelten Lösemittel könnten bei Erreichen der geforderten Reinheit erneut als Hilfsstoffe in der Produktion bzw. bei niedrigerer Qualität möglicherweise bei der Reinigung eingesetzt werden. Beides kann

abhängig vom Recyclingaufwand die ökologische Performance aufgrund der Kompensation von Umweltauswirkungen durch den Ersatz von „primären“ Lösemitteln deutlich verbessern. Diese Betrachtung ist Inhalt der Sensitivitätsstudie I.

**Energieeinsatz**

In Abb. 5.13 ist die Bilanzierung der zu- und abgeführten Wärme in den einzelnen GO ebenfalls als Sankey-Diagramm dargestellt. Die Temperierung wird durch Thermalöl auf verschiedenen Temperaturniveaus realisiert, welches nach der Klassifizierung zu den Betriebsstoffen gehört. Die GO CR01 wird bei Raumtemperatur betrieben, daher ist hier weder eine Wärmezufuhr noch -abfuhr bilanziert und zugeordnet. Aus der Darstellung wird deutlich, dass im Prozess ein deutlich höherer Verbrauch aus den Heißschienen als aus den Kalt- bzw. Tiefkaltschienen auftritt. Einen hohen Temperieraufwand weisen die Destillationen DE01, DE03 und DE04 auf, mit einem Energieeintrag aus den Heißschienen H(T1) und H(T2) für das Heizen und Verdampfen in den GO von > 2.000 MJ (DE01, DE03) bzw. > 4.000 MJ (DE04). Die Kaltschienen bedienen vorrangig die Kondensatoren und damit ebenfalls die Destillationen, wobei der Bedarf der DE04 mit ca. 3.900 MJ am höchsten ausfällt. Die Tiefkaltschienen dienen der Kühlung der Hauptapparate in den TAn. Dies ist vor allem bei den Kristallisationen notwendig, von denen die KR01 mit ca. 760 MJ den höchsten Verbrauch aufweist.

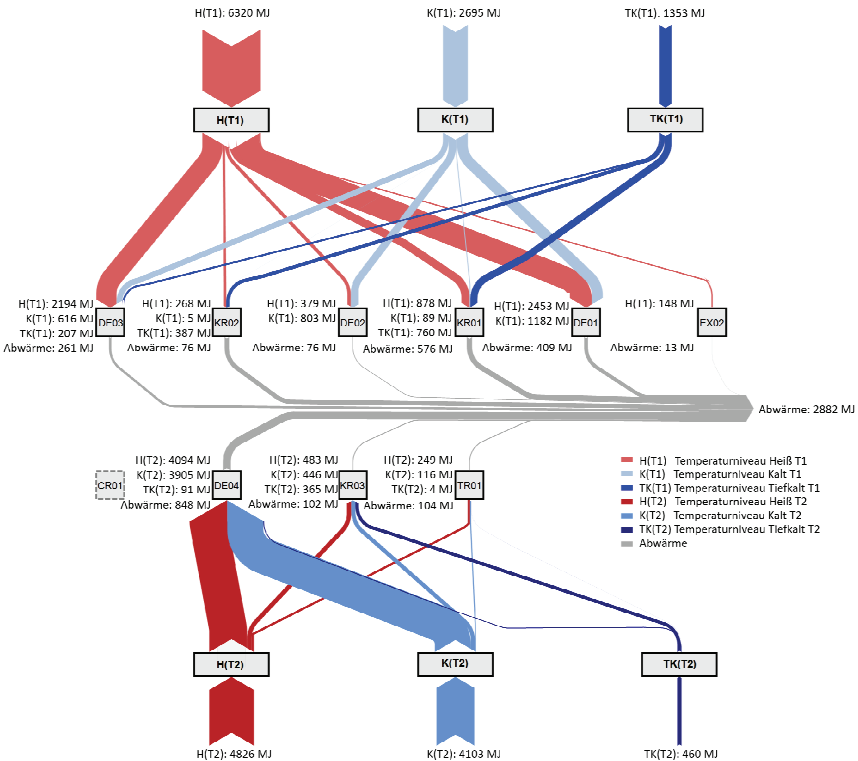


Abb. 5.13: Sankey-Darstellung des in GO strukturierten Produktionsprozesses mit Schwerpunkt auf den Energiebedarf; Gezeigt ist der Verbrauch aus den zur Verfügung stehenden Temperaturschienen, erstellt mit eISankey® (v4) der ifu Hamburg GmbH.

Unter Berücksichtigung der Daten aus Abb. 5.11 zeigt ein detaillierterer Vergleich der Destillationen untereinander, dass die benötigte Wärmemenge nicht unmittelbar mit den zu verdampfenden Lösemittelmengen korreliert. Werden in der DE04 mehr als die dreifache Menge der DE01 bzw. knapp die achtfache Menge der DE03 an Lösemittel bei einer Aufwendung von 4.094 MJ verdampft, liegen die Wärmebedarfe der DE01 bei 2.453 MJ und der DE03 bei 2.194 MJ. Unter Berücksichtigung der Informationen aus der Sankeydarstellung (Abb. 5.11), der eingesetzten Hauptapparate (Tab. 5.1) sowie der Rezeptur wird u. a. sowohl der Einfluss der Prozessführung der GO als auch der belegten TAN deutlich: Bei der DE01 handelt es sich um eine zweistufige Schleppe destillation, die in einem emaillierten Stahlbehälter mit einem NV von 4 m<sup>3</sup> betrieben wird. Die DE03 hingegen belegt einen 4 m<sup>3</sup> Edelstahlbehälter und zielt auf einen Lösemittelwechsel ab. Beide Destillationen sind im Vergleich zur DE04, die lediglich eine Lösemittelabtrennung in zwei parallel betriebenen 1,6 m<sup>3</sup> Edelstahlbehältern bedient, durch zusätzliche Heizschritte und Verdampfungen gekennzeichnet. Nicht zu vernachlässigen ist an dieser Stelle außerdem der Einfluss der Stoffeigenschaften der unterschiedlichen, abzutrennenden Lösemittel. Die Wärmeverluste, die bei allen Destillationen anfallen, sind im Vergleich zur Temperierleistung gering. Dies lässt sich neben der Berücksichtigung der Apparatedämmung u.a. mit den langen Laufzeiten bei niedrigen Temperaturen begründen, da diese GO im Vakuum mit Drücken zwischen 0,1...0,2 bar(a) betrieben werden.

Die genauere Betrachtung der Kristallisationen weist mit der TAN-Ausstattung und der Durchführung der GO dieselben Einflussfaktoren wie die Destillationen auf. Auch hier zeigt der Vergleich, dass bei ähnlicher Menge an Produktgemisch deutliche Unterschiede bei den benötigten Wärmemengen auftreten. Die Höhe der Verbräuche korreliert mit den vorgegebenen Betriebstemperaturen bzw. den in der Rezeptur vorgegeben Beschränkungen zur Temperaturdifferenz zwischen Produkt- und Betriebsstoffseite. Die angegebenen Wärmemengen der Heischienen resultieren i. d. R. aus Lösevorgängen, die Wärmemengen der Kalt- und Tiefkaltschienen aus der Kühlung des Produktgemisches zur Durchführung der Kühlungskristallisation. Abhängig von der Starttemperatur des Kühschritts wird in Abhängigkeit von den zulässigen Temperaturdifferenzen zwischen Produkt- und Betriebsstoff, sowohl in Bezug auf die Stabilität des Produktgemisches als auch auf die Apparatmaterialien, zunächst die Kaltschiene verwendet, bevor auf die Tiefkaltschiene umgeschaltet wird. So wird die KR01 in einem emaillierten Stahlbehälter betrieben. Diese Materialkombination ist in Bezug auf Temperaturdifferenzen zwischen Produkt- und Betriebsstoffseite empfindlich und kann daher nur mit geringeren Temperaturdifferenzen, verglichen mit den unbeschichteten Edelstahlbehältern, welche von den KR02 und KR03 belegten sind, betrieben werden. Auch variieren mit je 4 m<sup>3</sup> die KR01 und KR02 sowie 1,6 m<sup>3</sup> für die KR03 die Nennvolumen der RWA. Die KR03 wird dabei in zwei parallelen TAN betrieben.

Die beschriebenen Zusammenhänge und Daten der Wärmestromanalyse lassen vermuten, dass neben Prozessparametern wie Druck, Temperaturrampen oder max. Temperaturdifferenzen, auch apparative Größen, wie Nennvolumen oder Apparatmaterialien einen Einfluss auf den Betriebsstoffverbrauch bei energieintensiven Prozessschritten ausüben. Dieser Sachverhalt wird in der Sensitivitätsstudie II (Kapitel 5.6.6) aufgegriffen und detaillierter untersucht.

Die Analyse der Wärmeströme wird ergänzt durch die ökologischen Aufwendungen, die mit der Bereitstellung der verschiedenen Temperaturniveaus im Primärkreislauf der MZA einhergehen, siehe Abb. 5.2. In der Tab. 5.7 sind diese für die drei WK *Klimaänderung (CC)*, *Überdüngung Frischwasser (FE)* und *Verbrauch fossiler Ressourcen (FD)* im Überblick zusammengefasst. Ein Vergleich der Temperaturschienen zeigt, dass die ökologischen Aufwendungen abhängig von den Temperaturen der einzelnen Niveaus *heiß (H)*, *kalt (K)* und *tiefkalt (TK)* deutlich variieren. Die Bereitstellung der beiden heißen Temperaturschienen verursacht für die T1 bezogen auf die wärmere T2 einen zwischen 56...404 %-Punkte höheren Aufwand. Anders verhält es sich bei den Kalt- und Tiefkaltschienen, bei denen die ökologischen Aufwendungen des Temperaturniveaus T1 im Vergleich zu den kälteren T2-Niveaus um 38...69 %-Punkten reduziert sind.

Die ermittelten Aufwendungen zeigen, abhängig von den WK, unterschiedliche Tendenzen zwischen den einzelnen T1- bzw. T2-Niveaus. In der WK FD ist z. B. der Aufwand je MJ aus der Heißschiene H (T2) mehr als 1/4 höher als die ökologischen Aufwendungen je MJ aus der Kaltschiene K (T2), bei dem T1-Niveau ist dieser um mehr als das Fünffache höher. Auf diese Tendenz weist auch Mersmann [158] hin, der aus ökonomischer Sicht die „Wärmeleistung“ als teurer einstuft als die „Kälteleistung“. Zum Teil lässt sich dies hier, auch aus ökologischer Sicht für die WK FD bestätigen, ohne den Tiefkaltbereich zu berücksichtigen. In den beiden anderen aufgeführten WK CC und FE zeigt sich allerdings eine gegenläufige Tendenz – sowohl in Bezug auf die ökologischen Aufwendungen in der WK CC für das T2-Niveau, als auch in der WK FE für das T1- und T2-Niveau sind die Auswirkungen je MJ aus den Kaltschienen mehr als doppelt so hoch, verglichen mit den Heißschienen. In allen drei WK zeigt sich deutlich, dass die Bereitstellung der Tiefkaltschienen aus ökologischer Sicht am „teuersten“ eingekauft werden muss.

Tab. 5.7: Ökologische Aufwendungen je MJ Wärmeeintrag bzw. -abfuhr bezogen auf die verschiedenen, im Primärkreislauf bereitgestellten Temperaturschienen in den Wirkungskategorien FD, CC und FE, bewertet mittels Charakterisierungsmodellen der ReCiPe 2008 Methode [111]

Temperatur-niveau	Ökologische Aufwendungen Bereitstellung T-Schiene		
	FD [kg Öl-Äq./MJ]	CC [kg CO <sub>2</sub> -Äq./MJ]	FE [kg P-Äq./MJ]
H (T1)	0,056	0,154	2,92E-06
K (T1)	0,011	0,043	4,90E-05
TK (T1)	0,071	0,285	3,23E-04
H (T2)	0,036	0,031	8,80E-07
K (T2)	0,028	0,112	1,27E-04
TK (T2)	0,102	0,412	4,67E-04

Die ökologische Bewertung der verschiedenen T-Niveaus ermöglicht eine erste Abschätzung der Aufwendungen, bezogen auf die benötigten Wärmemengen, direkt zugeordnet zu den GO. Dies zeigen die Daten in Tab. A2.4 im Anhang. Die Ergebnisse zeigen in den drei untersuchten WK, dass die DE04 die höchsten ökologischen Aufwendungen durch die Bereitstellung der Wärme bzw. der Wärmeabfuhr verursacht. Die geringsten Beiträge zu den ökologischen Aufwendungen des Gesamtprozesses werden in den WK *Klimaänderung* (CC) und *Verbrauch fossiler Ressourcen* (FD) durch die GO TR01 sowie in der WK *Überdüngung Frischwasser* (FE) durch die GO EX02 ausgewiesen. Die Daten in Tab. 5.7 zeigen, dass u. a. die Auswahl der Temperaturschienen als betrieblicher Parameter einen wesentlichen Einfluss auf das Ergebnis der ökologischen Bewertung des Betriebes einer GO haben kann. So würde z. B. eine Umstellung der Versorgung der TAn der GO DE04 von K(T2) auf K(T1) in der WK CC eine Reduzierung der ökologischen Aufwendungen von 62 % ermöglichen. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass dies auf den ersten Blick ein Potenzial vermuten lässt, aus verfahrenstechnischer Sicht allerdings basierend auf den Daten der hier gezeigten Bilanzierung keine belastbare Aussage möglich ist. Bezogen auf die Erfüllung der verfahrenstechnischen Aufgabe, der hier beispielhaft genannten GO, spielen diverse weitere Faktoren eine Rolle. So sind neben den notwendigen Temperaturdifferenzen zwischen Betriebsstoff- und Produktseite auch Einflussfaktoren wie z. B. Stromführung, Strömungsart des Wärmeträgermediums oder der verbauten Materialien und den damit einhergehenden Kenngrößen zu beachten. Diese Aspekte stehen bei dem hier als Basis verwendeten Detaillierungsgrad der Modellebene 2 allerdings nicht zur Verfügung. Eine solche Aussage ist nur in Verbindung mit den Daten aus der Modellebene 1 und den Kenngrößen der in der Modellierung eingesetzten Bausteine möglich.



### 5.6.3 Schwerpunktanalyse III: Untersuchungen zu den Grundoperationen

In der nachfolgenden Schwerpunktanalyse werden der Betrieb der GO und die damit verbundenen potentiellen ökologischen Mindestauswirkungen untersucht, d. h. der Prozess ohne Einfluss sowohl des Rüstens und Reinigens als auch des Basisbetriebs. Die Ergebnisse berücksichtigen die Inputs Hilfsstoffe, Betriebsstoffe und elektrische Energie sowie den Output Reststoffe. Ein Auszug der ökologischen Bewertung für die Aufwendungen in den WK *Verbrauch fossiler Rohstoffe* (FD) und *Überdüngung Frischwasser* (FE) zeigt die Abb. 5.14. Die Daten der anderen vier WK sowie eine detaillierte Auswertung der einzelnen WK finden sich im Anhang, Abb. A3.1.

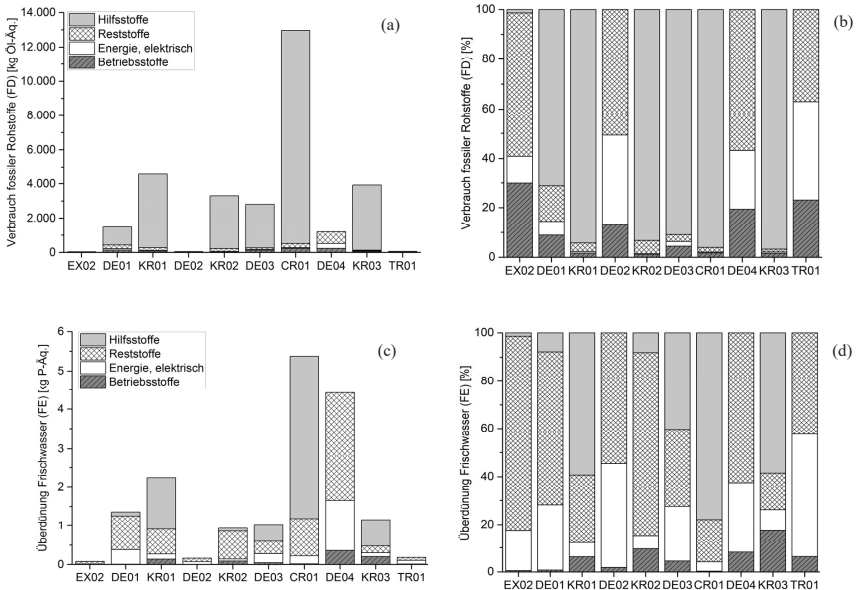


Abb. 5.14: Ökologischen Aufwendungen des Betriebes der GO, in den WK FD (a, b) und FE (c, d), bewertet mittels Charakterisierungsmodellen der ReCiPe 2008 Methode [111]

Dominiert werden die Ergebnisse in den WK entweder durch die Hilfsstoffe, wie in den WK *Humantoxizität* (HT), *Verbrauch fossiler Ressourcen* (FD) und *Natürliche Landumformung* (NLT) mit Anteilen zwischen 63...92 % oder durch die Reststoffe, wie in den WK *Klimaänderung* (CC) und *Seewasser Ökotoxizität* (MET) mit Anteilen zwischen 53...67 %. Lediglich die WK *Überdüngung Frischwasser* (FE) zeigt wie auch schon in der Gesamtbewertung der GO, siehe Abb. 5.14 c, keinen eindeutigen Schwerpunkt.

Der direkte Vergleich der Ergebnisse der beiden WK FD und FE mit den Ergebnissen der Prozessbewertung (siehe Abb. 5.9) zeigt Abweichungen, bedingt durch die Bereinigung der Bilanzdaten. Der Anteil der Betriebsstoffe und der elektrischen Energie ist über alle GO deutlich reduziert. Daraus resultierend, variiert auch die Verteilung der ökologischen Aufwendungen zwischen den GO. So weist die DE03 in der Gesamtbewertung (Abb. 5.9) für die WK FD einen höheren Anteil aus als die GO KR02. Die Bewertung des Betriebes der GO präsentiert die GO DE03 dagegen mit einem deutlich niedrigeren Anteil im Vergleich zur GO KR02. Auch der Anteil der GO TR01 reduziert sich deutlich. Dominiert werden die Ergebnisse in der WK FD durch die Hilfsstoffe (Vergleich Abb. 5.9b und Abb. 5.14(a,b)), wodurch sich die

sehr ähnliche Verteilung der ökologischen Aufwendungen auf die GO erklären. Allerdings ist, wie bereits bei der Bewertung des Gesamtprozesses beschrieben, kein linearer Zusammenhang zwischen den eingesetzten Hilfsstoffmengen und der Höhe der ökologischen Aufwendungen ableitbar. So werden in der KR01 mehr als die doppelte Menge an Hilfsstoffen als in der DE03 eingesetzt. Die Aufwendungen für die KR01 betragen hingegen ca. 4,3 t Öl-Äq./Batch und für die DE03 ca. 2,6 t Öl-Äq./Batch. Wie schon ausgeführt, führt dies zu dem Rückschluss, dass die ökologischen Auswirkungen nicht mit den Einsatzmengen korrelieren, sondern die Art des Hilfsstoffes eine entscheidende Rolle spielt. Ähnliches gilt für die Outputklasse der Reststoffe, die in der WK FE deutlich mehr ins Gewicht fällt. Wie bei der Beschreibung der Inputs und Outputs (vgl. Anhang, Kapitel A.2.2) angeführt, werden die Reststoffe für die Bewertung in drei verschiedenen Entsorgungswegen eingegliedert, deren Aufwand je kg unterschiedlich hoch ausfällt. Wesentlich deutlicher fällt die Verschiebung der Anteile an den ökologischen Aufwendungen zwischen den GO in der WK FE (Vergleich Abb. 5.9 c und Abb. 5.14 c) aus. Auch in dieser WK stellt sich der Anteil der GO TR01 deutlich reduziert dar. Die GO KR01 hingegen weist einen höheren Anteil auf, der Anteil der GO DE04 liegt in einer ähnlichen Größenordnung wie jener der CR01. Anders als bei der WK FD ist dieses Umweltproblemfeld vorrangig durch mehr als eine Input- bzw. Outputgrößen beeinflusst, nämlich Hilfsstoffe, Energie und Reststoffe.

Auch die direkten Vergleiche der vier anderen betrachteten WK weisen diese Abweichungen auf (siehe Abb. 5.9 vs. Abb. A3.1 im Anhang). Besonders deutlich treten diese in den WK Seewasser Ökotoxizität (MET) auf, in der die WK DE04 für den Betrieb der GO den höchsten ökologischen Beitrag liefert. Die detaillierten Betrachtungen zeigen, dass der große Anteil der Betriebsstoffe an der ökologischen Performance in den verschiedenen WK durch das Rüsten und Reinigen und nicht durch den Betrieb der GO verursacht wird. Die Ergebnisse über alle betrachteten sechs WK zeigen, dass der hohe ökologische Aufwand in den GO CR01 und DE04 vorrangig aus den eingesetzten Hilfsstoffen (CR01) und den anfallenden Reststoffen (DE04) resultiert. In Summe ergeben die ökologischen Aufwendungen dieser beiden GO im Betrieb in allen WK mehr als 50 % der ermittelten Gesamtaufwendungen. Ausnahme stellt die WK FD dar in der der Anteil der beiden GO lediglich 47 % beträgt.

Anhand dieser beiden GO wird deutlich, dass die Bewertung eines Produktionsprozesses herunter gebrochen auf die einzelnen GO, vor allem im Hinblick auf die Identifizierung von Ansätzen im Rahmen der Verfahrensverbesserung, die Gefahr birgt, Ergebnisse zu verzerren. Die GO DE04 ist aus ökologischer Sicht zwar einer der Hauptverursacher an den potentiellen Umweltauswirkungen, aus verfahrenstechnischer Sicht kann ihr Betrieb allerdings nicht als per se schlecht bezeichnet werden. Wie gezeigt, resultiert der Großteil der ökologischen Aufwendungen aus dem Betrieb der vorgelagerten GO CR01. In der DE04 werden die eingesetzten Mengen an Elutionsmittel eingedampft, um das stark verdünnte Produkt wieder aufzukonzentrieren. Dieses Phänomen des „Problem shifting“ bedeutet für die Analyse von Produktionsprozessen nach dem vorgeschlagenen Ansatz des 3-Ebenen-Modells, dass standardisierte Auswertungsverfahren wie z. B. der Ansatz nach Pareto [159], der davon ausgeht, dass der größte Verursacher auch das größte Verbesserungspotential birgt, nur bedingt geeignet sind. Vor- und nachgeschaltete Grundoperationen müssen bei den Betrachtungen eingebunden werden. Der Prozessabschnitt, der die GO CR01 und DE04 umfasst, wird daher nachfolgend detaillierter untersucht.

### Detaillierte Analyse der Grundoperationen CR01 und DE04

Für diese Betrachtungen werden die Informationen und Daten der Modellebene 1 („einzelne Grundoperationen“) herangezogen. In diesem Detaillierungsgrad können sowohl die Prozessschritte als auch der Betrieb einzelner Apparate analysiert und bewertet werden. Die Untersuchungen in dieser Arbeit fokussieren die Analyse bezogen auf einzelne Apparate. In Tab. 5.8 sind die beiden GO schematisch in einzelne Prozessschritte unterteilt dargestellt und kurz beschrieben.

Tab. 5.8: Überblick über die Durchführung der Prozessschritte der GO CR01 und DE04

GO	Hauptapparat	Beschreibung Prozessschritte	Prozessbedingungen	Anmerkungen
Chromatographie CR01	RWA	<b>Anschlätzen Säulenmaterial</b> Einpumpen Elutionsmittel Eintrag Säulenmaterial Übertrag auf Säule	RT, p=1,013 bar(a)  p=2 bar(a)	direkt aus Tanklager über PV Powder-Transfer-System (PTS) Beaufschlagung mit Stickstoff
	Chromatographiesäule	<b>Vorbereiten Säule</b> Einpumpen Produktgemisch Säule starten	  Säulenausgang: V-Strom = 500l/h, 3 bar(a)	mittels Pumpe aus IBC Auffangen Fraktionen in IBC
	RWA	<b>Mischen Elutionsmittel</b> Einpumpen Elutionsmittel Übertrag auf Säule	RT, p=1,013 bar(a)  p=2 bar(a)	direkt aus Tanklager über PV Beaufschlagung mit Stickstoff
	Chromatographiesäule	<b>Säule eluieren</b>		Auffangen Fraktionen in IBC
	Chromatographiesäule	<b>Abbruch Chromatographie</b>		Detektion reines Elutionsmittel
	Chromatographiesäule	<b>Dampfstrippen Säulenmaterial</b>	T=75 °C, p=1,5 bar(a)	Stickstoffspülung zum Abkühlen; Säulenmaterial und Kondensat zur Entsorgung
	Destillation DE04	RWA	<b>Vorbereitung RWA</b> Inbetriebnahme Kondensator Einpumpen Fraktionen	T <sub>Vorlauf</sub> =20 °C RT, p=1,013 bar(a)
RWA		<b>Vakuumdestillation I</b> Destillation  Abpumpen konz. PG	p=0,1 bar(a) T <sub>Gradient</sub> =1,5 K/min ΔT <sub>max</sub> =20 K	1. Abtrennung Elutionsmittel  mittels Pumpe in IBC
RWA		<b>Vakuumdestillation II</b> Einpumpen konz. PG Destillation	p=0,1 bar(a) T <sub>Gradient</sub> =1,5 K/min ΔT <sub>max</sub> =30 K	Aufkonzentrierung PG mittels Pumpe aus IBC bis kein Destillatstrom mehr erkennbar
RWA		<b>Temperieren</b>	T=20 °C T <sub>Gradient</sub> =1,5 K/min ΔT <sub>max</sub> =30 K	

PV Produktverteiler  
PG Produktgemisch  
RT Raumtemperatur  
V-Strom Volumenstrom  
IBC Intermediated bulk container

Beide GO werden in zwei identischen TAN parallel betrieben (vgl. Abb.5.1). Die TAN der GO CR01 sind jeweils mit zwei Chromatographiesäulen und je einem RWA als Hauptapparate ausgestattet. Sowohl die Vorbereitung des Säulenmaterials und Elutionsmittels in den 1 m<sup>3</sup> RWA als auch das Eluieren der 0,6 m<sup>3</sup> Säulen erfolgt bei Raumtemperatur. Für den Übertrag des Säulenmaterials und Elutionsmittels wird ein Druck von 2 bar(a) auf den jeweiligen RWA beaufschlagt. Die Elution erfolgt in den Säulen bei einem Druck von 3 bar(a) sowie einem Volumenstrom von 500 l/h am Austritt. Die Fraktionen werden in mehreren IBC aufgefangen. Der Chromatographievorgang endet, wenn am Ausgang nur noch Elutionsmittel detektiert wird. Über die Chromatographiesäulen laufen je Tonne Produktgemisch ca. 2,4 t Elutionsmittel. Im Nachgang erfolgt ein Dampfstrippen des Säulenmaterials mit anschließender Stickstoffspülung zur Kühlung. Das Strippdampfcondensat und das gestrippte Säulenmaterial werden entsorgt.

## 5 Ökologische Bewertung eines Produktionsprozesses in einer Mehrzweckanlage

In der GO DE04 wird zunächst in einer Vakuumdestillation bei 0,1 bar(a) der Hauptteil des Elutionsmittels abgetrennt. Dabei sind konkrete Prozessbedingungen hinsichtlich der Temperaturgradienten  $T_{\text{Gradient}}$  beim Heizen und Kühlen sowie die maximalen Temperaturdifferenzen  $\Delta T_{\text{max}}$  zwischen Betriebsstoff- und Produktseite vorgegeben. Das verbliebene, aufkonzentrierte Produktgemisch wird in IBCs zur Qualitätskontrolle abgepumpt und anschließend wieder in die RWA zurückbefördert, um eine weitere Vakuumdestillation zu starten. Diese dient der weiteren Aufkonzentrierung des Produktgemisches. Anschließend erfolgt eine Temperierung des noch in den RWA verbliebenen Produktgemisches auf 20 °C. Das Kondensat wird in einem Behälter aufgefangen, anschließend in IBC abgefüllt und der Entsorgung zugeführt. In dem Modell wird für die Destillationsschritte ein Volumenstrom von 200 kg/h angenommen, um den Betriebsstoffbedarf zu ermitteln.

Die Ergebnisse der Schwerpunktanalyse II (Kapitel 5.6.2) zeigen für die sechs betrachteten WK bereits die Hotspots für die beiden GO auf. Im Hinblick auf die Chromatographie sind dies die eingesetzten Hilfsstoffe und anfallenden Reststoffe. Daher werden diese Input- und Outputklassen bei der nachfolgenden ökologischen Bewertung im Vordergrund stehen. Anschließend erfolgt die Analyse der GO DE04 mit dem Schwerpunkt auf dem Betriebsstoffverbrauch der einzelnen Prozessschritte sowie einer Analyse der ökologischen Aufwendungen, die durch den Betrieb der einzelnen Apparate verursacht werden. Nachfolgend werden zunächst die GO CR01 näher betrachtet und die Ergebnisse bewertet.

In der Abb. 5.15 sind die Verteilungen der ökologischen Aufwendungen in den verschiedenen Klassifizierungen, gekoppelt an den eingesetzten Stoffen bzw. den genutzten Entsorgungswegen in den WK *Klimaänderung (CC)*, *Überdüngung Frischwasser (FE)* und *Seewasser Ökotoxizität (MET)*, dargestellt. Aufgeführt sind die Hilfs-, Betriebs- und Reststoffe.

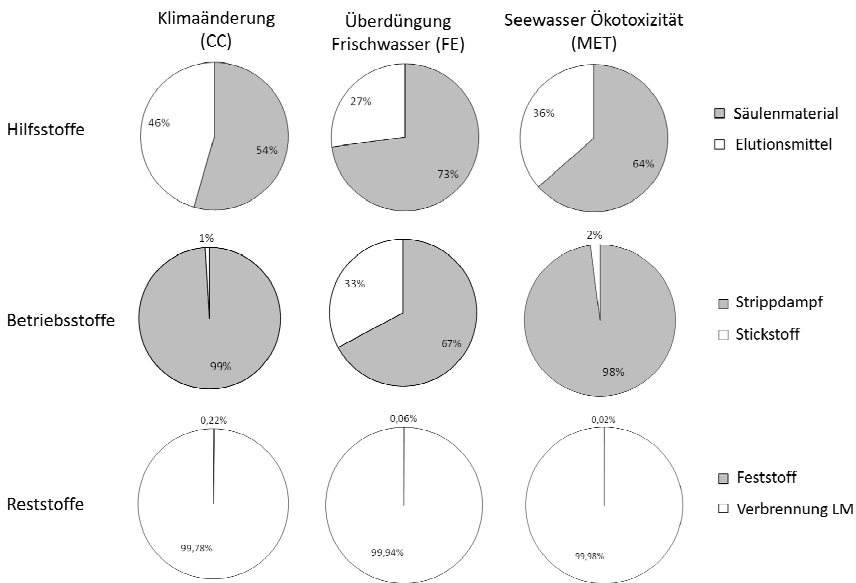


Abb. 5.15: Ergebnisse der Analyse zu den ökologischen Aufwendungen der GO CR01 in Bezug auf die verschiedenen Klassifizierungen Hilfsstoffe, Betriebsstoffe und Reststoffe in den WK *Klimaänderung (CC)*, *Überdüngung Frischwasser (FE)* und *Seewasser Ökotoxizität (MET)* mittels den Charakterisierungsmodellen der ReCiPe 2008 Methode [111]



Die Ergebnisse zeigen bei den Hilfsstoffen die Dominanz des Säulenmaterials mit einem Anteil zwischen 54...73 % an den Aufwendungen, die durch diese Inputklasse verursacht werden. In Summe werden 840 kg dieses Materials je Batch-Ansatz eingesetzt. Dem gegenüber stehen ca. 6,6 t Lösemittel für die Elution. Das eingesetzte Säulenmaterial besitzt somit einen deutlich schlechteren ökologischen Fußabdruck je kg. Dabei ist zu berücksichtigen, dass für dieses Material kein generischer Datensatz in der ecoinvent Datenbank zur Verfügung steht. Daher werden, wie zu den Datenquellen im Anhang A2.2 beschrieben, die zur Herstellung benötigten Vorstufen zur Abschätzung der ökologischen Aufwendungen herangezogen. Nicht berücksichtigt sind die mit der Herstellung des Säulenmaterials verbundene Aufwendungen, wie der Verbrauch an Betriebsstoffen und elektrischer Energie, Bedarf an Hilfsstoffen, die Anlage oder Transporte, anfallende Reststoffe sowie Emissionen. Es ist daher davon auszugehen, dass der ökologische Aufwand deutlich höher ausfällt als in der Bewertung des Produktionsprozesses berücksichtigt.

Die eingesetzten Betriebsstoffe in der CR01 umfassen Stripddampf und Stickstoff. Stripddampf wird zur Nachbehandlung des Säulenmaterials eingesetzt und macht in den betrachteten WK den Hauptanteil am potentiellen ökologischen Aufwand der Betriebsstoffe aus. Der eingesetzte Stickstoff dient dem Übertrag des Elutionsmittels auf die Säule sowie der Spülung des Säulenmaterials zur Abkühlung nach dem Strippen, der Inertisierung der Apparate und der Überlagerung während der Produktion u. a. um explosive Atmosphären zu verhindern. Das Inertgas weist in den WK CC und MET mit 1 % bzw. 2 % einen deutlich geringeren Anteil auf. In der WK FE trägt der Stickstoffbedarf der GO CR01 33 % an den ökologischen Aufwendungen bei. Bei der Betrachtung der Reststoffe zeigt sich hingegen, dass die Entsorgung der Lösemittel in allen drei WK deutlich stärker als die Entsorgung des Säulenmaterials ins Gewicht fällt. Der Anteil der Feststoffentsorgung beträgt jeweils weniger als 1 % der ökologischen Aufwendungen. Für die Entsorgung des Feststoffs wird angenommen, dass dieser einer Verbrennungsanlage für Sondermüll zugeführt wird. Die Elutionsmittel werden energetisch verwertet.

Die Verteilung der ökologischen Aufwendungen, die durch den Verbrauch der elektrischen Energie verursacht werden, sind nicht dargestellt, zeigen allerdings in allen betrachteten WK eine identische Zuordnung. Dies ist darin begründet, dass die Verbräuche prinzipiell unabhängig von den WK sind und die Bewertung mit ein und demselben generischen Datensatz erfolgt, dessen Charakterisierungsfaktor wiederum mit dem Verbrauch direkt verrechnet wird. Für diese Inputklasse sind lediglich die Verbraucher ausschlaggebend, hier: Rührer, Pumpen und PTS (Powder-Transfer-System). Den größten Beitrag leistet die Rührer in den RWA zum Anschlammern des Säulenmaterials und der Mischung der Elutionsmittel mit ca. 95 % der Gesamtaufwendungen. Sowohl der Feststoffeintrag mittels PTS als auch die Verbräuche der Pumpen zur Beförderung der Hilfsstoffe aus dem Tanklager tragen in Summe lediglich 5 % zu den ökologischen Auswirkungen bei.

Im Hinblick auf die potentiellen gesamtökologischen Aufwendungen des Betriebes der GO Chromatographie am untersuchten Produktionsprozess sollte die GO verfahrenstechnisch zur Diskussion gestellt werden. Der Austausch der Elutionsmittel durch in der Bereitstellung potentiell ökologisch weniger aufwendige Lösemittel und deren Reduzierung in der GO würde die ökologische Performance des Produktionsprozesses deutlich verbessern. Gleiches gilt für das aktuell eingesetzte Säulenmaterial. Auch wenn dessen Entsorgung eine deutlich untergeordnete Rolle einnimmt, ist allein die Bereitstellung der Edukte mit hohen Aufwendungen verbunden. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass davon ausgegangen werden kann, dass die Herstellung von Säulenmaterialien aufgrund ihrer spezifischen Eigenschaften im Bereich der Spezialchemie prinzipiell mit einem hohen ökologischen Aufwand einhergeht. Der Einsatz großer Mengen an Elutionsmitteln ist i. d. R. bei der chromatographischen Aufreinigung aufgrund des verfahrenstechnischen Prinzips unabdingbar. Neu entwickelte Technologien, die aus Sicht des Ressourceneinsatzes eine effizientere Prozessführung versprechen, wie z. B. das MCSGP-Verfahren für Biomoleküle (multi column counter current solvent gradient purification), sind auf dem Markt noch nicht etabliert.

## 5 Ökologische Bewertung eines Produktionsprozesses in einer Mehrzweckanlage

Daher ist die Eignung anderer GO im Rahmen des Prozessdesigns denkbar, die einem abweichenden verfahrenstechnischen Trennmechanismus folgen, wie z. B. Filtration oder Membranverfahren. Um eine Vorteilhaftigkeit zu prüfen, ist dazu eine vergleichende Bewertung durchzuführen.

In der GO DE04 werden hingegen keine weiteren Hilfsstoffe eingesetzt, da die GO dazu dient, das Elutionsmittel aus dem chromatographischen Trennprozess thermisch abzutrennen. Dieses bereits beschriebene Phänomen des „Problem-Shifting“ verursacht in dieser GO ein hohes Reststoffaufkommen und erfordert in diesem Zusammenhang, trotz Betrieb im Vakuum, in Summe einen deutlich höheren Wärmeeintrag aus den Temperaturschienen, als die anderen GO des Produktionsprozesses. Aus dem niedrigen Betriebsdruck resultiert, bedingt durch die Vakuumpumpen, außerdem ein höherer elektrischer Energiebedarf.

In den untersuchten WK, siehe Abb. 5.14 und A.3.1, verursachen die Reststoffe in der GO DE04 mit einem Anteil von 57...92 % die höchsten Umweltauswirkungen. Der Einfluss der elektrischen Energie fällt zumeist mit 2...10 % gering aus, lediglich in den WK FE und FD liegen die Anteile mit 29 bzw. 24 % höher. Ähnlich verhält es sich mit den Aufwendungen, die durch den Bedarf an Betriebsstoffen verursacht werden. Lediglich in den WK NLT und FD beträgt der Anteil deutlich mehr als 10 % an den Gesamtaufwendungen der GO. Ein großer Einflussfaktor in diesem Zusammenhang sind die Verbräuche aus den Betriebsstoffschienen zur Bereitstellung der Wärmeleistung. In Bezug auf die eingesetzten Wärmemengen zeigt die Bilanzierung in Abb. 5.13 für die GO DE04, verglichen mit den anderen GO, einen deutlich höheren Verbrauch, bedingt durch die große Menge an abzutrennenden Lösemitteln (Abb. 5.11).

Aus der Heißschiene H(T2) werden für den Betrieb der GO 4.094 MJ entnommen. Diese Mengen dienen dem Heizen und Verdampfen, Prozessschritte die ausschließlich im RWA realisiert werden. Die Kaltschiene K(T2) weist mit 3.905 MJ einen ähnlichen hohen Energiebedarf auf, der zum größten Teil für den Betrieb des Kondensators aufgewandt wird, siehe Abb. 5.16. Einen deutlich geringeren Anteil benötigt hingegen der Betrieb der Vakuumpumpe, die im Betrieb gekühlt werden muss. Für den RWA werden keine Wärmemengen aus dieser Schiene aufgewandt. Dies ist begründet in dem niedrigen Betriebsdruck, der für das Temperieren zum Ende trotz Beschränkung der maximalen Temperaturdifferenz von 30 K ein direktes Zuschalten der Tiefkaltschiene TK(T2) erlaubt. Die aus dieser Temperaturschiene zugeführten Wärmemengen sind deutlich geringer und werden ausschließlich für die Temperierung des RWA benötigt.

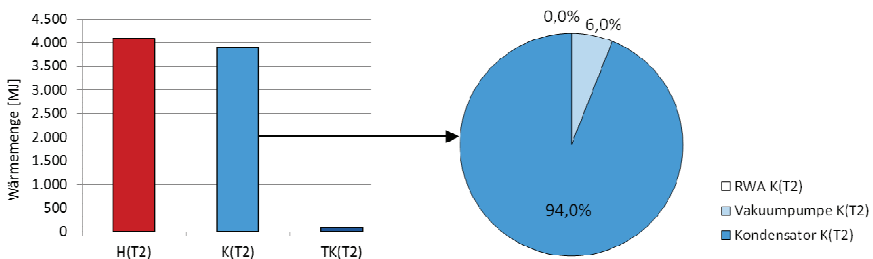


Abb. 5.16: Zuordnung der Wärmemengen zu den drei an der TAN verfügbaren Temperaturniveaus sowie die Anteile der an der TAN angeschlossenen Verbrauchern bezogen auf den Verbräuchen der Kaltschiene K(T2) aus dem Betrieb der GO DE04.

Bezogen auf den Betrieb der Apparate und des Equipments mit eigenen, sekundären Wärmeträgerkreisläufen zeigt Tab. 5.9 die potentiellen ökologischen Aufwendungen in den WK FD, CC und FE. Dargestellt sind die Aufwendungen, die mit der Bereitstellung je MJ Wärmeeintrag bzw. -abfuhr aus dem Se-

kundärkreislauf (vgl. Abb. 5.2) direkt am Verbraucher einhergehen. Im Vergleich dazu sind in den Klammern grau die Aufwendungen je MJ Wärmezufuhr bzw. -abfuhr gezeigt, die sich aus der Bereitstellung des Temperaturniveaus im Primärkreislauf ergeben, vgl. Tab. 5.7. Der deutliche Mehraufwand resultiert zum einen aus den Verlusten, die bis zur Bereitstellung der Wärme am bzw. Abfuhr der Wärme vom Produktgemisch auftreten. Zum anderen treten durch den Betrieb der Pumpen in den Kreisläufen zusätzliche potentielle Umweltwirkungen auf, die ebenfalls mitberücksichtigt werden. Außerdem sind die Aufwendungen je Batch-Ansatz bezogen auf die RWA, die Kondensatoren und die Vakuumpumpen sowie weitere Kennzahlen mit direktem Bezug zur Produktmenge bzw. abgetrennter Reststoffmenge dargestellt.

Tab. 5.9: Ökologische Aufwendungen je MJ Wärmeeintrag bzw. -abfuhr bezogen auf die verschiedenen Temperaturschienen sowie die Aufwendungen als Apparatenummern, die sich direkt an der von der GO DE04 belegten T-An ergeben; Werte in Klammern weisen die ökologischen Aufwendungen für die Bereitstellung des T-Niveaus im Primärkreislauf aus (siehe Tab. 5.7)

Ökologische Aufwendungen DE04					
Wirkungskategorie		Verbrauch fossiler Ressourcen (FD)	Klimaänderung (CC)	Überdüngung Frischwasser (FE)	
		[kg Öl-Äq./MJ]	[kg CO <sub>2</sub> -Äq./MJ]	[kg P-Äq./MJ]	
Temperaturniveaus	H (T2)	0,076 (0,036)	0,064 (0,031)	1,853E-06 (8,80E-07)	
	K (T2)	0,036 (0,028)	0,143 (0,112)	1,618E-04 (1,27E-04)	
	TK (T2)	0,203 (0,102)	0,814 (0,412)	9,226E-04 (4,67E-04)	
		[kg Öl-Äq./Batch]	[kg CO <sub>2</sub> -Äq./Batch]	[kg P-Äq./Batch]	
Apparatenummern	RWA	267,83	585,90	0,52	
	Vakuumpumpe	121,78	489,69	0,55	
	Kondensator	127,00	510,69	0,58	
			[kg Öl-Äq./kg Produkt]	[kg CO <sub>2</sub> -Äq./kg Produkt]	[kg P-Äq./kg Produkt]
	RWA	0,45	0,99	8,76E-04	
	Vakuumpumpe	0,21	0,83	9,37E-04	
	Kondensator	0,21	0,86	9,77E-04	
			[kg Öl-Äq./kg Reststoff]	[kg CO <sub>2</sub> -Äq./kg Reststoff]	[kg P-Äq./kg Reststoff]
	RWA	0,030	0,065	5,72E-05	
Vakuumpumpe	0,013	0,054	6,12E-05		
Kondensator	0,014	0,056	6,38E-05		

Die Ergebnisse zeigen eine deutliche Abweichung zwischen den ökologischen Aufwendungen je MJ-Wärmeeintrag, die aus der Nutzung der Heißschiene (H(T2)) und deren Bereitstellung resultieren. Ähnliches zeigt der Vergleich der Aufwendungen je MJ-Wärmeabfuhr am Verbraucher, der bezogen auf die Bereitstellung der Tiefkaltschiene (TK(T2)) um ca. 98 % erhöht ist. Deutlich geringer fallen die Abweichungen mit ca. 27 % für die Kaltschiene (K(T2)) aus. In der Ermittlung der ökologischen Aufwendungen je MJ Wärmeeintrag bzw. -abfuhr aus den Temperaturschienen während des Betriebs der GO DE04 werden weitere Aufwendungen, die unmittelbar mit der Temperierung einhergehen, berücksichtigt. Dazu zählen der Bedarf an elektrischer Energie der Pumpen zur Beförderung der Wärmeträgermedien in den Primär- und Sekundärkreisläufen sowie apparative als auch prozessliche Parameter, die den Wärmeeintrag beeinflussen. Die geringsten Abweichungen weisen die Kaltschienen auf. Dies ist auf die Annahme eines idealen Kondensators zurückzuführen, sodass keine Einflüsse durch Apparatenummern in die Aufwendungen einfließen. An dieser Stelle werden lediglich die Aufwendungen der Pumpen zur Beförderung des Wärmeträgers angerechnet. Ähnlich sind die Einflüsse durch die Vakuumpumpe anzusehen – auch hier ist das Umwälzen in den Primär- und Sekundärkreisläufen integriert. Hinzu kommt außerdem der Einfluss des Wirkungsgrades der Vakuumpumpe, siehe Annahmen in Kapitel A2.3, und die daraus resultierenden Verluste. Die Ermittlung der ökologischen Aufwendungen je MJ Wärmeeintrag und -

abfuhr in den RWA erfolgt sowohl unter Beachtung von Wärmeverlusten an die Umgebung, apparativen Parametern wie u.a. der Bauform des Apparates, dessen Nennvolumen, das verbaute Material und das Wärmeübertragungskonzept sowie Prozessparameter wie Temperaturrampe oder max. Temperaturdifferenz zwischen Produkt- und Betriebsstoffseite. In Summe resultieren diese Einflussgrößen in scheinbar deutlichen Abweichungen zu den Aufwendungen je MJ Wärmeeintrag bzw. -abfuhr im Primärkreislauf bezogen auf die Bereitstellung der verschiedenen Temperaturniveaus. Dies lassen die Ergebnisse der Untersuchung in Kapitel 3.3 bereits vermuten. Der daraus resultierende Einfluss auf die ökologische Bewertung wird in der Sensitivitätsstudie II Kapitel 5.6.6 näher untersucht.

Basierend auf der ökologischen Bewertung der Verbräuche können Kennzahlen generiert werden, die den Betrieb eines einzelnen Apparates beschreiben. Die in Tab. 5.9 beispielhaft gezeigten Apparatkennzahlen sind bezogen auf einen Batch-Ansatz, der Endprodukt- und der Reststoffmenge. Anhand solcher Größen lassen sich gezielt Aussagen ableiten, die den Betrieb der einzelnen Hauptapparate beschreiben.

Die Hauptapparate der einzelnen TAn in der die GO DE04 betrieben wird, umfassen je einen RWA, einen Kondensator und eine Vakuumpumpe. In den betrachteten drei WK zeigen sich unterschiedliche Tendenzen. So weist der einzelne Kondensator in der WK FE einen höheren Aufwand aus, als die anderen Hauptapparate. Dies zeigt sich in den WK FD und CC nicht. Für diese Umweltproblemfelder repräsentiert die Temperierung des RWA den größten Verursacher.

Die Ergebnisse zeigen, dass sich auf Basis der Daten aus der Modellebene 1 sowie dem damit einhergehenden Detaillierungsgrad der Betrieb von einzelnen Apparaten in einer MZA retrospektiv bewerten lässt. Ebenfalls denkbar ist der Bezug der ökologischen Aufwendungen auf eine Betriebsstunde der einzelnen Apparate wie von Wesche et al. [98] gezeigt. Diese Herangehensweise bietet die Möglichkeit, den Einsatz von verschiedenen Apparaten in den TAn untereinander zu vergleichen. So sind Aussagen bzgl. der Energiebedarfe in Abhängigkeit von den Stoffdaten der Produkt- und der Betriebsstoffseite sowie insbesondere der hier genutzten Temperaturschienen möglich. Außerdem besteht basierend auf dem Gerüst der für die Modellierung definierten Bausteine prospektiv die Möglichkeit, verschiedene Apparatkonfigurationen für eine verfahrenstechnische Aufgabe zu vergleichen und Empfehlungen individuell für jede GO hinsichtlich eines geeigneten Apparates bzw. einer TAn auszusprechen. Dies ist für MZA ein möglicher Ansatz, um die Effizienz der Ausrüstungsgegenstände einzuordnen und zu bewerten. Ebenfalls integrierbar sind in solchen Untersuchungen, der aus ökologischer Sicht relevante apparative Aspekt in Form von Bereitstellung und Entsorgung der Apparate sowie die Aufwendungen für die Instandhaltung [98]. Anhand dieser Daten können die Belegung der einzelnen TAn durch den Prozess bewertet und Routen identifiziert werden, die im Hinblick auf den Ressourceneinsatz verbesserte Belegungsabfolge in der Produktionsplanung ermöglichen. Anhand solcher Betrachtungen ist die Erarbeitung von Ansatzpunkten realisierbar, um die ökologische Performance eines Produktionsprozesses gezielt zu verbessern.

Mit dem 3-Ebenen-Modell ist ebenfalls die Bewertung einzelner Prozessschritte möglich. Dies wird in dieser Arbeit nicht ausführlich gezeigt, soll allerdings nicht unerwähnt bleiben. Die Abb. 5.5 zeigt die GO KR03 des untersuchten Produktionsprozesses, die strukturiert nach den Prozessschritten Rückstand lösen, Temperieren 1, Temperieren 2, Vakuumkristallisation und Kühlungskristallisation, modelliert ist. Die Bewertung mit Fokus auf die Prozessschritte ermöglicht die Identifizierung von Hotspots in der Prozessführung, die die Umweltperformance der GO beeinflussen. Auch an dieser Stelle spielen sowohl prozessliche, als auch betriebliche und apparative Aspekte eine Rolle. Basierend auf den Bilanz- und Bewertungsdaten können gezielt Verbesserungsvorschläge für die verfahrenstechnischen Ausführung der GO aufgezeigt werden, um z. B. den Energie- und Ressourceneinsatz oder die Umweltwirkungen zu reduzieren.



### 5.6.4 Schwerpunktanalyse IV: Untersuchungen zu den Rüst- und Reinigungsvorgängen

Wie bereits beschrieben, kommen bei der Reinigung der TAN in der MZA Standardreinigungsprotokolle abhängig vom Hauptapparatyp zum Einsatz. Standardreinigungsprotokolle sind i. d. R. nicht abgestimmt auf den Grad und Art der Verschmutzung, sondern an der höchstmöglichen Verunreinigungsstufe orientiert. In Summe werden für die durch den betrachteten Prozess belegten TAN drei verschiedene Reinigungsprotokolle angewandt: für die RWA, die Chromatographiesäulen und den Trockner.

Die nachfolgende Abb. 5.17 zeigt die, zu den einzelnen Grundoperationen zugeordneten ökologischen Aufwendungen in der WK *Verbrauch fossiler Rohstoffe* (FD), die durch das Rüsten und Reinigen der durch den untersuchten Produktionsprozess belegten TAN verursacht werden. In der Darstellung sind außerdem die Art der Hauptapparate der betriebenen TAN gezeigt sowie die Zuordnung der GO, da einige GO nacheinander in den gleichen TAN betrieben werden, siehe Tab. 5.1. Für die ökologische Bewertung bedeutet dies, dass die ermittelten Aufwendungen für diese TAN auf die jeweiligen GO allokiert werden. Dies betrifft die GO EX02, DE01 und KR01, die GO DE02 und KR02 sowie die GO DE04 und KR03.

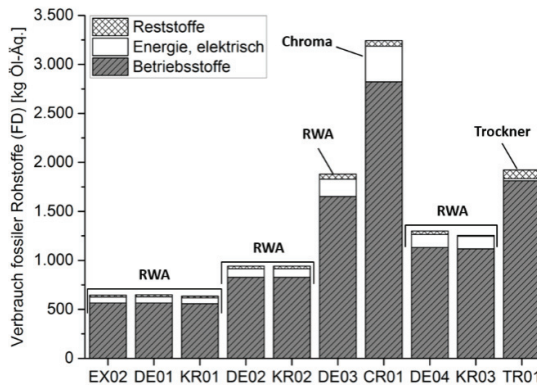


Abb. 5.17: Ergebnisse der Schwerpunktanalyse zu den ökologischen Aufwendungen, die durch das Rüsten und Reinigen der TAN verursacht werden in der WK FD, bewertet mittels Charakterisierungsmodellen der ReCiPe 2008 Methode [111] und Kennzeichnung der Hauptapparatetypen der durch die GO belegten TAN

Die den GO DE03, CR01 und TR01 zugeordneten Aufwendungen sind deutlich höher, als die der anderen GO. Dies ist darin begründet, dass in den belegten TAN nur diese jeweiligen GO betrieben werden und somit keine Allokation der Aufwendungen erfolgt. Der ökologische Aufwand in Bezug auf das Rüsten und Reinigen ist bei der Chromatographie CR01 mit 3.244 kg Öl-Äq. mit Abstand am höchsten. Dies ist vorrangig dem Umfang der beiden durch die GO belegten TAN geschuldet, die jeweils einen RWA und zwei Chromatographiesäulen umfassen. Hinzu kommen zehn IBC zum Auffangen der Fraktionen, die ebenfalls mit berücksichtigt werden. Das Reinigungsprotokoll der zwei RWA entspricht jenen der RWA allgemein. Die Chromatographiesäulen werden nach einem eigenen Protokoll gereinigt, welches vergleichsweise geringe Mengen an Reinigungsfluiden sowie Aufheiz-, Verdampfen- und Abkühlschritte vorsieht. Ebenfalls deutlich erhöht sind außerdem die ökologischen Aufwendungen mit 1.924 kg Öl-Äq. für die GO TR01. Auch bei dieser GO sind mit vier Trockner mehr als ein Hauptapparat belegt, deren Reinigung mittels CIP (Cleaning in Place) erfolgt. Die anderen acht Grundoperationen werden in TAN mit einem RWA als Hauptapparat betrieben. Die Ergebnisse der Bewertung zeigen, dass durch die Allokation der ökologischen Aufwendungen der Anteil für die einzelnen GO deutlich geringer ausfällt, als für die

GO CR01 und TR01. Den höchsten Aufwand bezogen auf die RWA-TAN weist aufgrund der alleinigen Belegung die GO DE03 mit 1.880 kg Öl-Äq. auf. Im Umkehrschluss bedeutet dies, dass je länger eine Kampagne betrieben wird, desto geringer ist der Reinigungsaufwand. In diesem Fall sind veränderte Reinigungsregime möglich, da die Reinigungen zwischen den Batchansätzen deutlich weniger umfangreich sind, als die Standardreinigungsprotokolle.

Der Vergleich der ökologischen Aufwendungen der GO EX02, DE01 und KR01 mit denen der DE02 und KR02 zeigen in Summe etwa gleiche Mengen an kg Öl-Äq. Die RWA der beiden TAN sind mit einem NV von 4 m<sup>3</sup> sowie einer Rührwerksnutsche als zusätzlichem apparativem Aufwand ausgeführt. Aufgrund des höheren apparativen Umfangs sind im Vergleich dazu die Aufwendungen der TAN ohne Nutsche, in der die GO DE03 bei gleichem Nennvolumen betrieben wird, geringer. Auch die GO DE04 und KR03 werden nacheinander in einer TAN betrieben (NV von 1,6 m<sup>3</sup>). Allerdings erfolgt der Betrieb der GO parallel in zwei Strängen, siehe Tab. 5.1. Den GO sind daher die Aufwendungen von zwei TAN zuzuordnen. Der direkte Vergleich mit den GO DE02 und KR02 (NV 4,0 m<sup>3</sup>) weist einen um 670 kg Öl-Äq., u. a. aus dem parallelen Betrieb resultierenden, höheren Umweltaufwand auf. Trotz in Summe niedrigerem NV sind die Reinigungsaufwendungen höher, da zwei Apparate temperiert und die Reinigungsfluide über einen festen Zeitraum im Rücklauf verdampft werden. Dieser Unterschied weist auf einen Einfluss von apparativen Parametern u. a. in Bezug auf Temperierprozesse hin, die sich unmittelbar in den Verbrauchsdaten und damit ökologischen Auswirkungen widerspiegeln.

Auffällig ist zudem der Unterschied zwischen den ökologischen Aufwendungen, die der GO KR03 und DE04 zugeordnet werden, obwohl beide GO nacheinander in gleichen TAN betrieben werden. Der Mehraufwand resultiert aus dem zusätzlichen Reinigungsaufwand der für den Betrieb der GO DE04 ergänzend benötigten IBC, da das Produktgemisch zur Probenahme abgefüllt und anschließend wieder in den RWA gepumpt wird (siehe Überblick in Tab. 5.8).

In Abb. 5.18 sind die ökologischen Aufwendungen der Betriebsstoffe für die TAN der GO DE03 mit RWA (a) und der GO TR01 (b) mit einem Trockner als Hauptapparat für die WK *Verbrauch fossiler Ressourcen* (FD) dargestellt. Dabei repräsentiert das Inertisieren das Rüsten der TAN und die Aufwendungen der Temperaturschienen sowie der Reinigungsfluide die Reinigung der TAN.

In Summe kommen beim Rüsten und Reinigen einer TAN mit RWA (a) neun verschiedene Betriebsstoffe zum Einsatz, wohingegen für den Trockner (b) mit sechs Betriebsstoffen deutlich weniger benötigt werden. Die größten Verursacher von Umweltauswirkungen in der WK FD sind in beiden Fällen die eingesetzten Lösemittel. Aus der Reinigung des RWA resultieren 1.542 kg Öl-Äq. und aus den Trocknern 1.769 kg Öl-Äq. an ökologischen Aufwendungen. Einen deutlichen Unterschied zeigen die Auswirkungen, die aus den Verbräuchen der Temperaturniveaus hervorgehen. Durch die im Reinigungsprotokoll vorgegebenen Temperierprozesse in Form von Heizen, Kühlen, Verdampfen und Kondensieren werden je Batch-Ansatz für das Rüsten und Reinigen 113 kg Öl-Äq. generiert, wohin gegen beim Trockner ca. 3 kg Öl-Äq. anfallen. Die Auswirkungen, die durch das Inertisieren verursacht werden, liegen bei den GO in einer ähnlichen Größenordnung. Die mit Bereitstellung der Wärmeenergie verbundenen Aufwendungen spielen sowohl bei der Reinigung des RWA als auch des Trockners eine untergeordnete Rolle.

Der Vergleich des Rüstens und Reinigens bezieht sich auf einen Batch-Ansatz und ist den jeweiligen Grundoperationen zugeordnet. Wie in Tab. 5.1 im Überblick zusammengestellt, wird die GO TR01 allerdings parallel in vier TAN mit je einem NV von 0,6 m<sup>3</sup> je Trockner betrieben, wohingegen sich der gezeigte ökologische Aufwand für die DE03 auf eine TAN mit einem NV des Hauptapparates von 4 m<sup>3</sup> bezieht. Um das Rüsten und Reinigen der beiden TAN vergleichbarer zu machen, ist z. B. eine Gegenüberstellung der ökologischen Aufwendungen bezogen auf das NV der Hauptapparate möglich. Die hier für den Vergleich herangezogene TAN der GO DE03 ist mit einem RWA von 4 m<sup>3</sup> NV ausgestattet, die vier

TAN der GO TR01 mit je einem Trockner von  $0,6 \text{ m}^3 \text{ NV}$ , in Summe also  $2,4 \text{ m}^3 \text{ NV}$ . Damit ergeben sich für den RWA ca.  $470 \text{ kg Öl-Äq./m}^3 \text{ NV}$  und für die Trockner ca.  $802 \text{ kg Öl-Äq./m}^3 \text{ NV}$ . Aufgrund der höheren Menge an Lösemitteln/ $\text{m}^3 \text{ NV}$  resultieren für das CIP-Verfahren höhere Umweltwirkungen. Die Aussagen anderer Autoren [160] bzgl. der Vorteile der CIP-Verfahren aufgrund des geringen Ressourceneinsatzes lässt sich für die hier gezeigte Untersuchung nicht allumfassend bestätigen. Der RWA wird mit einer geringeren Lösemittelmenge gereinigt, die über einen längeren Zeitraum im Rückfluss verdampft wird („auskochen“). Zwar liegt der Energiebedarf pro  $\text{m}^3 \text{ NV}$  für die RWA-Reinigung um das 25-fache über dem der Trockner, allerdings sind die ökologischen Auswirkungen in der hier gezeigten WK im Vergleich zu den Lösemitteln deutlich geringer.

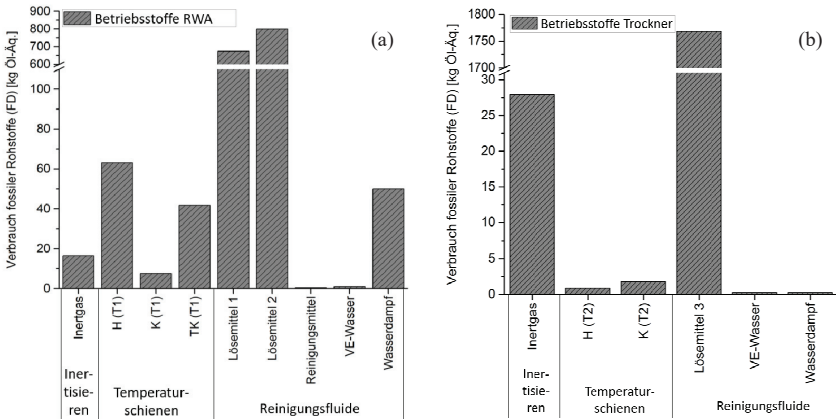


Abb. 5.18: Ökologische Aufwendungen der Betriebsstoffe in der WK *Verbrauch fossiler Ressourcen* (FD) mittels Charakterisierungsmodell der ReCiPe 2008 Methode [111], die durch das Rüsten und Reinigen einer TAN mit RWA (a) und einer TAN mit Trockner (b) als Hauptapparat verursacht werden

Werden allerdings die ökologischen Aufwendungen auf die einzelne TAN bezogen, ist der ökologische Aufwand zum Rüsten und Reinigen je TAN bei der GO TR01 mit  $481 \text{ kg Öl-Äq.}$  im Vergleich zu den  $1.880 \text{ kg Öl-Äq.}$  der GO DE03 deutlich geringer. Diese Reduzierung könnte erreicht werden, in dem nur noch eine TAN zur Trocknung im Produktionsprozess zum Einsatz kommt. Diese müsste in diesem Fall viermal nacheinander betrieben werden. Da die Trocknung je  $150 \text{ kg}$  Produkt eine durchschnittliche Dauer von ca.  $40 \text{ h}$  aufweist, ist dies allerdings aus wirtschaftlicher Sicht genau zu prüfen.

### 5.6.5 Sensitivitätsstudie I: Recycling von Lösemitteln

In dieser Sensitivitätsstudie wird anhand eines Fallbeispiels die Entsorgung und Neubeschaffung dem Recycling von Lösemitteln gegenübergestellt. Der Vergleich erfolgt mittels dem Tool *ecosolvent* v 1.0.1 [100]. Dazu werden in diesem Tool das Destillationsmodell und das Verbrennungsmodell genutzt. Das Destillationsmodell basiert auf den Verbrauchs- und Emissionsdaten von 150 Destillationsprozessen für Lösemittelabfälle, die in neun verschiedenen Mehrproduktanlagen und acht kontinuierlichen Destillationskolonnen betrieben werden sowie zwei absatzweise betriebenen Destillationskolonnen, die bei der Vorreinigung zum Einsatz kommen. Sowohl die Daten für die Verbrennung als auch für die Destillationen stammen vorrangig von Produktionsstandorten in der Schweiz. [161] Für das Destillationsmodell stehen im Tool drei verschiedene Datenebenen zur Verfügung. Die erste Datenebene umfasst vollständig generische Datensätze und bietet eine eher grobe Abschätzung basierend auf den hinterlegten Daten aus den aufgenommenen Beispielen. Für die zweite Datenebene wird nur ein Teil

## 5 Ökologische Bewertung eines Produktionsprozesses in einer Mehrzweckanlage

der hinterlegten Daten hinzugezogen, entsprechend der getroffenen Wahl, z. B. absatzweise oder kontinuierliche Destillation. In der dritten Datenebene können bei vorliegenden aller bzw. einzelner Daten diese statt der generischen oder hinterlegten Daten eingegeben werden. [51]

Nachfolgend zeigt Tab. 5.10 im Überblick die in den beiden Modellen hinterlegten Input- und Outputdaten. Die Inputs und Outputs sind bedingt durch die verschiedenen Verwertungs- bzw. Aufbereitungsprozesse, die von den Modellen abgebildet werden. Dabei umfassen die Hilfsstoffe Chemikalien zur pH-Wert-Regulierung, zur Reinigung des Equipments oder dienen als Schleppmittel. Berücksichtigt wird in der Bewertung durch das Tool auch die generierte Kompensation an Umweltwirkungen. Diese resultieren aus den aus ökologischer Sicht erzeugten „Mehrwerten“. So wird bei der Verbrennung der Lösemittel elektrische Energie produziert und in das Stromnetz eingespeist. Diese Energiemenge muss daher nicht mehr auf anderen Wegen bereitgestellt werden, sodass die daraus resultierenden ökologischen Aufwendungen nicht anfallen. Gleiches gilt für das rückgewonnene Lösemittel, welches eine Neuproduktion ersetzt.

Tab. 5.10: Zusammenstellung der berücksichtigten Inputs und Outputs im Destillationsmodell und Verbrennungsmodell des ecosolvent Tools [162]

	Destillationsmodell	Verbrennungsmodell
INPUT	Dampf	Heizöl
	Energie, elektrisch	Hilfsstoffe
	Stickstoff	
	Hilfsstoffe	
OUTPUT	Abluftbehandlung	CO <sub>2</sub> -Emissionen
	Abfallverbrennung	Andere Emissionen
	Abwasserbehandlung	
Gutschriften	Rückgewonnenes Lösemittel	Energiebereitstellung

Für diese Studie erfolgt die Bewertung in der WK Klimaänderung, Betrachtungshorizont 100 a, mit dem Charakterisierungsmodell der IPCC (Stand 2001)<sup>24</sup>. Untersucht wird das Recycling von zwei verschiedenen Lösemitteln, Toluol und Methanol. Die Wahl ist begründet in dem unterschiedlich hohen ökologischen Aufwand zur Bereitstellung dieser Chemikalien. Für den oben angegebenen Betrachtungshorizont werden diese, unter Verwendung der in der IPCC 2001 hinterlegten Charakterisierungsfaktoren (ecoinvent v2.2) mit 1,4744 kg CO<sub>2</sub>-Äq./kg für Toluol (#451, Toluol, flüssig, ab Werk) und 0,73628 kg CO<sub>2</sub>-Äq./kg für Methanol (#422, Methanol, ab Werk), bewertet.

In der Untersuchung wird jeweils 1.100 kg des verunreinigten Lösemittels aufgereinigt bzw. entsorgt und wiederbeschafft. Dabei wird angenommen, dass in dieser Menge 100 kg Verunreinigungen in Form anderer nicht weiter spezifizierter Lösemittel enthalten sind. Die Berechnung der ökologischen Aufwendungen erfolgt in der ersten Datenebene, für die in Tab. A3.1 im Anhang angegeben Inputs und Outputs. Eine Vorbehandlung wird sowohl bei der Destillation als auch bei der Verbrennung nicht berücksichtigt. Angenommen wird eine in der Software als Standard hinterlegte Reinheit von 90 %, die, laut der Aussage der Autoren, von Experten aus der chemischen Industrie als Durchschnittswert angegeben wird [51]. In der Betrachtung erfolgt keine Berücksichtigung von Transporten oder dem Einsatz von Stickstoff. Für die Nachbehandlung der bei der Destillation anfallenden Lösemittelreste wird ebenfalls eine thermische Verwertung angenommen.

<sup>24</sup> Für die Bewertung in der WK Klimaänderung ist für die Software kein Betrachtungszeitraum angegeben. Daher wird dieser mit dem in der Literatur häufig anzutreffenden Zeitraum von 100 a angenommen.

Für die ökologische Bewertung stehen die Aufwendungen, die mit dem Recycling bzw. der Verbrennung und der Wiederbeschaffung einhergehen im Vordergrund. Um die Wiederbeschaffung darzustellen, werden die oben aufgeführten Charakterisierungsfaktoren für Methanol und Toluol herangezogen. Dabei wird davon ausgegangen, dass 1.000 kg Lösemittel bereitgestellt werden müssen. Dies entspricht der Menge an aufzureinigendem Lösemittel ohne Verunreinigungen. Bei der Destillation werden die Mengen an rückgewonnenem Lösemittel als Gutschrift angerechnet. Lediglich die Differenz zu den 1.000 kg (in der Studie für Methanol 223,60 kg und für Toluol 219,63 kg) wird als primäre Bereitstellung erfasst. Die Ermittlung der ökologischen Aufwendungen basiert auf einer statistischen Datenanalyse der hinterlegten Prozessdaten, die den empirischen Mittelwert sowie ein Minimum und Maximum für jeden Sachbilanzwert ermittelt. Daraus resultieren die in der Tab. 5.11 angegebenen Ergebnisse der Wirkungsabschätzung, die neben dem Mittelwert auch die Perzentile 0,025 und 0,975 umfassen. Diese zeigen die Schwankungsbreite der Ergebnisse der ökologischen Bewertung auf, die aus den im Tool hinterlegten Verbrauchsdaten resultieren.

Tab. 5.11: Gegenüberstellung der Ergebnisse der ökologischen Bewertung bzgl. der Nachbehandlung von Lösemittelresten, erstellt mit dem Tool ecosolvent

Input/Output	Destillationsmodell		Verbrennungsmodell	
	Methanol [kg CO <sub>2</sub> -Äq.]	Toluol [kg CO <sub>2</sub> -Äq.]	Methanol [kg CO <sub>2</sub> -Äq.]	Toluol [kg CO <sub>2</sub> -Äq.]
eingesetzte Stoffe/Energie, Emissionen	2.261	2.104	2.011	3.619
gewonnene elektr. Energie	-8	-10	-13	-21
gewonnener Dampf	-1.000	-1.252	-1.557	-2.556
<b>Summe</b>	<b>1.252</b>	<b>842</b>	<b>441</b>	<b>1.042</b>
P 0,025	499	534	-161	56
P 0,975	2.320	2.660	934	1.831
Bereitstellung Lösemittel (1000 kg gesamt)	165	324	736	1.474
<b>Summe gesamt</b>	<b>1.417</b>	<b>1.166</b>	<b>1.177</b>	<b>2.516</b>

Für die betrachteten Lösemittel zeigen die Ergebnisse Unterschiede bzgl. der Vorteilhaftigkeit auf. Im Vergleich weist die Destillation, bezogen auf die Verbrennung von Methanol, einen um ca. 20 % erhöhten und für Toluol einen um ca. 54 % verringerten ökologischen Aufwand auf. Auch im Destillationsmodell ist die Kompensation für Dampf und Elektrizität angegeben, entgegen der Aufstellung in Tab. 5.10. Diese resultieren aus der Annahme einer thermischen Verwertung der Lösemittelreste, siehe Output Abfallverbrennung in der Bilanz Tab. A3.1 im Anhang, und wurde in ecosolvent für diese Sensitivitätsstudie ausgewählt. Die Annahme ist begründet in der Tatsache, dass in der Bewertung des Produktionsprozesses diese Abfallbehandlung für Reststoffgemische, vorrangig bestehend aus Lösemitteln, berücksichtigt ist.

Die ökologischen Aufwendungen für das Lösemittel Methanol, bezogen sowohl auf die eingesetzte Energie (hier: Dampf und Elektrizität), sowie Hilfsstoffe, Betriebsstoffe und Emissionen als auch auf die thermische Verwertung der Lösemittelreste, liegen in beiden Modellen in einer ähnlichen Größenordnung. In beiden Fällen resultieren diese vorrangig aus den direkten CO<sub>2</sub>-Emissionen. Der Unterschied von ca. 250 kg CO<sub>2</sub>-Äq. wird vorrangig durch den bei der Destillation eingesetzten Dampf verursacht. Die Kompensationen für Dampf und elektrische Energie weichen aufgrund der verbrannten Mengen an Lösemittel (hier: 323 kg als Lösemittelrest bei der Destillation und 1.100 kg bei der thermischen Verwertung) voneinander ab. Für das recycelte Methanol sind diese in der Position Bereitstellung Lösemittel verrechnet. Die angegebenen 164,6 kg CO<sub>2</sub>-Äq. für die Bereitstellung von 1.000 kg Methanol berechnen sich aus dem oben angegebenen Charakterisierungsfaktor von 0,73628 kg CO<sub>2</sub>/kg, vermindert um die recycelte Masse des Lösemittels von 776 kg. In Summe liegen die ökologischen Aufwendungen für die

Destillation über denen der thermischen Verwertung, sodass sich für dieses Lösemittel die Verbrennung aus ökologischer Sicht vorteilhafter darstellt.

Genau gegenteiliges zeigen die Ergebnisse der Bewertung für das Lösemittel Toluol. Der Unterschied in den ökologischen Aufwendungen bzgl. der eingesetzten Energie, Hilfsstoffe, Betriebsstoffe und Emissionen ist mit mehr als 1.500 kg CO<sub>2</sub>-Äq. deutlich größer als beim Methanol. Dies ist begründet in den höheren CO<sub>2</sub>-Emissionen bei der thermischen Verwertung im Vergleich zur Destillation. Die Unterschiede in den Kompensationen für erzeugten Dampf und elektrischer Energie sind, ebenso wie beim Methanol, auf die unterschiedlichen Mengen an verbranntem Lösemittel zurückzuführen betragen 320 kg Lösemittelreste bei dem Recycling mittels Destillation und 1.100 kg bei der thermischen Verwertung. Außerdem liegen die ökologischen Aufwendungen vor der Verrechnung der Kompensationen für das recycelte Lösemittel um 200 kg CO<sub>2</sub>-Äq. unter denen der thermischen Verwertung. Vor allem der Mehrwert, der durch das Recycling der Lösemittel in die Bewertung mit einfließt, ist für das deutlich bessere Abschneiden der Destillation im Vergleich ausschlaggebend. Bei dem Lösemittel Toluol sind die Aussagen allerdings als nicht so eindeutig anzusehen wie bei Methanol. In Summe weist das Verbrennungsmodell im Mittel 1.350 kg CO<sub>2</sub>-Äq. mehr als das Recycling durch Destillation aus, sodass für Toluol eine Wiederaufbereitung die scheinbar ökologisch günstigere Variante bezogen auf das Umweltproblemfeld Klimaänderung darstellt.

Die Spanne der ermittelten ökologischen Aufwendungen lässt allerdings auf eine relativ große Schnittmenge schließen. Eine zuverlässige Aussage bzgl. der Vorteilhaftigkeit der Destillation gegenüber der Verbrennung ist daher ohne zusätzliche Untersuchungen nicht möglich.

Aus ökologischer Sicht ist die Bereitstellung vieler organischer Lösemittel aufgrund ihrer Basis auf fossilen Rohstoffen wie Erdgas oder Erdöl [8] i. d. R. mit einem hohen Aufwand verbunden, sodass auch Kompensationen für die Energieerzeugung diesen nicht ausgleichen [163]. Auch die Ergebnisse der ökologischen Bewertung des untersuchten Produktionsprozesses, siehe Abb. 5.7, weisen in vielen WK einen signifikanten Einfluss durch die eingesetzten Lösemittel in Form von Hilfsstoffen (siehe Chromatographie, Kapitel 5.6.3) oder Betriebsstoffen (siehe Kapitel 5.6.4) auf.

Allgemein lässt sich als Resultat aus der hier durchgeführten Sensitivitätsstudie schließen, dass ein Recycling von Lösemitteln eine Option darstellen kann, um die ökologische Performance eines Produktionsprozesses zu verbessern. Dies sollte für die verschiedenen im Produktionsprozess anfallenden Lösemittelreste sowohl in ihrer Funktion als Hilfsstoffe als auch Betriebsstoffe bei der Reinigung geprüft werden. Ob und in welcher Größenordnung ein positiver Effekt mittels Recyclings erreicht werden kann, hängt dabei von der Art und von der Menge des jeweiligen Lösemittels ab [39]. Nicht untersucht ist an dieser Stelle der Einfluss der geforderten Reinheit auf das Ergebnis der ökologischen Bewertung. Bei der Verwendung von Lösemittel als Hilfsstoffe liegt die geforderte Reinheit i. d. R. deutlich über den hier angenommen 90 %. Dies muss bei Lösemitteln, die als Reinigungsfluide eingesetzt werden, nicht der Fall sein. Für den Einsatz als Hilfsstoff sind daher höhere Aufwendungen, als die hier gezeigten Werte zu erwarten.

Wird davon ausgegangen, dass ca. 75 % der eingesetzten Hilfsstoffe, die als Reststoffe anfallen, einer Rückgewinnung statt der Verbrennung zugeführt werden, lässt sich der potentielle ökologische Aufwand in der WK Klimaänderung je Batch-Ansatz um ca. 9.375 kg CO<sub>2</sub>-Äq. reduzieren. Dies entspricht auf das Jahr 2011 bezogen für den untersuchten Produktionsprozess etwa 141,6 t CO<sub>2</sub>-Äq. Diese erste Abschätzung basiert auf den Mittelwerten der in der Sensitivitätsstudie erhaltenen Ergebnisse für Destillation und Verbrennung, die Einsparungen in Höhe von 555 kg CO<sub>2</sub>-Äq./t Lösemittel ergeben. In Bezug auf den Betrieb der GO entspricht diese Reduzierung ca. 12 % der Aufwendungen in der WK Klimaänderung. Bezogen auf die Gesamtaufwendungen des Produktionsprozesses, wie in Tab. 5.4 aufgeführt, entspricht diese Einsparung noch ca. 6,4 %.

### 5.6.6 Sensitivitätsstudie II: Einfluss der Faktoren „Apparat“, „Betrieb“ und „Prozess“

Für diese Untersuchungen wird davon ausgegangen, dass in einer typischen TAN in der MZA, wie in der Abb. 4.4 beispielhaft dargestellt, ein Heizschritt realisiert wird. Der Untersuchungsgegenstand ist in Kapitel 3.3 ausführlich beschrieben, die dort aufgeführten energetischen Betrachtungen bilden die Basis für diese Sensitivitätsstudie. Bezogen auf die Darstellung der TAN in Abb. 4.4 berücksichtigen die energetischen Betrachtungen lediglich den RWA (B2). Für die hier durchgeführte ökologische Bewertung erfolgt eine Erweiterung des Betrachtungsrahmens, sodass sowohl das WT-Modul (M1) mit der Pumpe (P1), die den Sekundärkreislauf repräsentieren, als auch die Temperaturschienen des Primärkreislaufs mit den angenommenen Temperaturniveaus von 130 °C und 190 °C in die Betrachtung integriert werden. Diese Erweiterung ist notwendig, um alle mit dem Heizschritt verbundenen Verbräuche und Aufwendungen in der ökologischen Bewertung zu erfassen. Die funktionelle Einheit (fE) repräsentiert die Erwärmung von 900 kg n-Heptan von 20 °C auf 80 °C.

In Bezug auf die beiden Primärkreisläufe werden die Aufwendungen, die aus dem Betrieb der Pumpen sowie die Wiederaufbereitung der eingesetzten Thermalölmengen resultieren, berücksichtigt. Dazu wird in dieser Sensitivitätsstudie angenommen, dass die Temperaturschiene 130 °C durch Dampf auf einem Druckniveau von 5 bar(a) und die Temperaturschiene 190 °C mittels Erdgasbrenner aufbereitet werden. Die entsprechende Enthalpiedifferenz, die bei der Kondensation von Wasserdampf auf diesem Druckniveau zur Verfügung steht, ist dem VDI-Wärmeatlas [103] entnommen und beträgt 2.115 kJ/kg. Im Rahmen der ökologischen Bewertung werden außerdem die Aufwendungen der TAN, entsprechend dem in Kapitel 4.2.2 vorgestellten Ansatz berücksichtigt, da in dieser Studie mit Edelstahl, emailliertem Stahl und C22 unterschiedliche Materialien betrachtet werden. Für die TAN wird ein Komplexitätsfaktor von 0,75 angenommen sowie 3.000 Betriebsstunden pro Jahr. In die Bewertung fließt für den betrachteten Prozessschritt Heizen die TAN anteilig ein, resultierend aus der Prozessdauer nach Temperaturrampe.

Die ökologische Bewertung erfolgt in den drei WK *Verbrauch fossiler Rohstoffe* (FD), *Seewasser Ökotoxizität* (MET) und *Klimaänderung* (CC). Dabei repräsentiert die WK FD den Schwerpunkt Betriebsstoffe, also die Bereitstellung von Wärme, und die WK MET den Schwerpunkt Anlage, hier die in der TAN verbauten Materialien. Die WK CC weist hingegen keinen eindeutigen Schwerpunkt auf. In der Abb. 5.19 sind die Ergebnisse der Sensitivitätsstudie dargestellt. Die verschiedenen Parameterkonstellationen (siehe Tab. 3.3) sind sortiert nach den drei Nennvolumen (1,0 m<sup>3</sup>, 1,6 m<sup>3</sup>, 4,0 m<sup>3</sup>) und den drei Temperaturrampen (0,5 K/min, 1,0 K/min, 1,5 K/min) sowie im direkten Vergleich die Temperaturniveaus 130 °C und 190 °C. Innerhalb der Temperaturniveaus variieren in der Auftragung die verschiedenen Apparatmaterialien Edelstahl (ED), Hastelloy (C22) und emaillierter Stahl (St/em). In der Auswertung ebenfalls angegeben sind die ökologischen Aufwendungen zur Bereitstellung der zur Realisierung der Verfahrensaufgabe benötigten Wärmemenge. Diese ökologischen Aufwendungen repräsentieren den Benchmark, wobei Unterschiede aus den verschiedenen Bereitstellungen resultieren, namentlich Erdgas für das Temperaturniveau von 190 °C und Dampf für das Temperaturniveau von 130 °C. Diese Angabe findet sich in WK FD und CC; in der WK MET sind diese Aufwendungen im Vgl. so gering, dass sie in der graphischen Auswertung nahezu gleich der Abszisse liegen und daher in der Abbildung nicht eingezeichnet sind.

## 5 Ökologische Bewertung eines Produktionsprozesses in einer Mehrzweckanlage

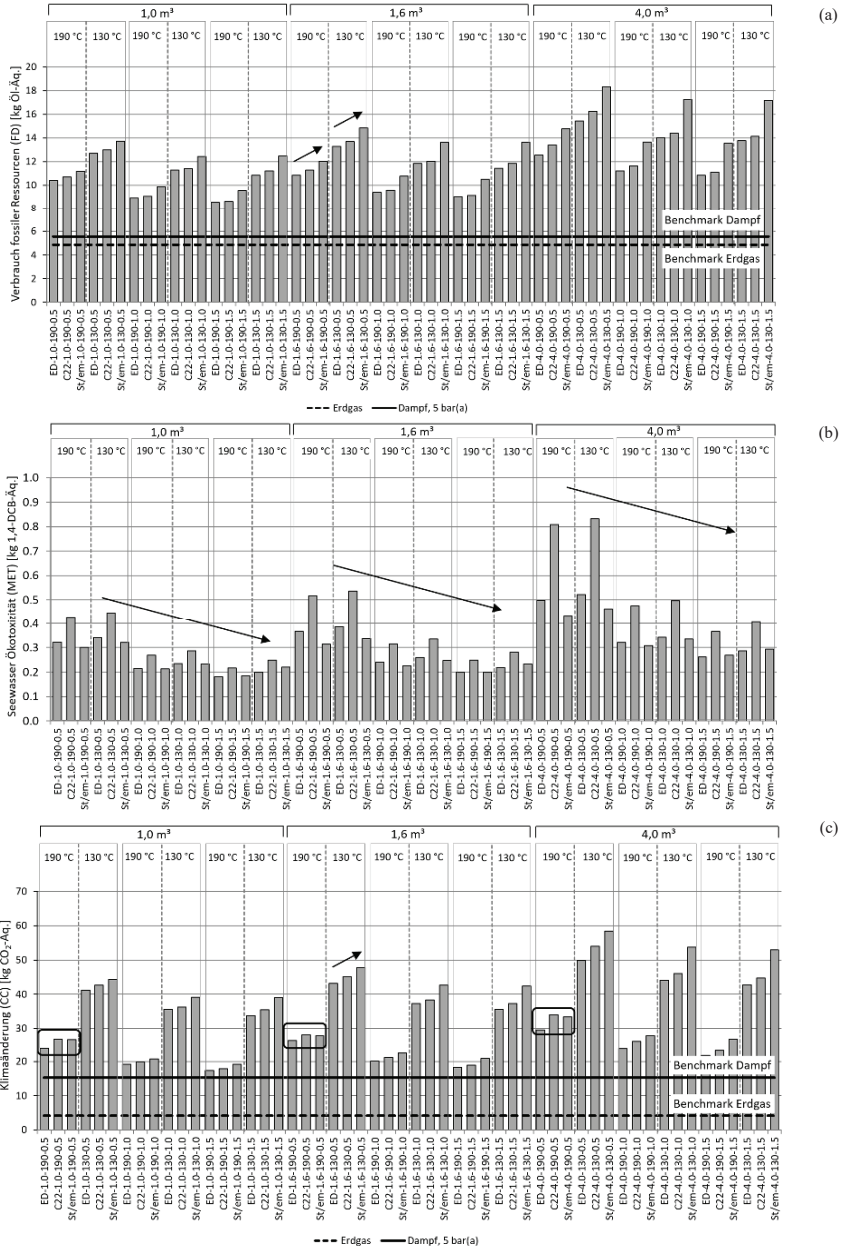


Abb. 5.19: Ergebnisse Sensitivitätsstudie II in den WK FD (a), MET (b) und CC (c), bezogen auf die IE „Erwärmen von 900 kg n-Heptan von 20 °C auf 80 °C“, bewertet mittels Charakterisierungsmodellen der ReCiPe 2008 Methode [111]



In der WK FD (Abb. 5.19 a) zeigt sich ein deutliches Muster bzgl. der in den RWA verbauten Materialien. Im direkten Vergleich für identisches NV, Temperaturniveau der Thermalölschiene und der Temperaturrampe sind die ökologischen Aufwendungen im Edelstahl-RWA geringer als im C22-RWA. Am höchsten liegen diese für die emaillierte Stahlapparatur, die aufgrund der Beschichtung deutlich schlechtere Wärmeübertragungseigenschaften als die beiden anderen Materialien aufweist. Daraus resultieren eine größere benötigte Wärmemenge und somit durch höhere Vorlauftemperaturen größere Mengen an Thermalöl, welches aufbereitet und gepumpt werden muss. Somit liegen die ökologischen Aufwendungen für die Bereitstellung des Temperaturniveaus und der Verbrauch an elektrischer Energie höher. Ebenfalls zeigt sich, dass das Temperaturniveau der Heizschiene als betrieblicher Parameter einen Einfluss ausübt. Dieser resultiert zum einen aus dem unterschiedlichen Aufwand zur Bereitstellung der Wärmemenge, wobei die Differenz bezogen auf die funktionelle Einheit ca. 0,7 kg Öl-Äq beträgt. Zum anderen resultiert dieser aus der höheren Menge an eingesetztem Thermalöl bei Nutzung der 130 °C Temperaturschiene und dem damit verbundenen gesteigerten Bedarf an elektrischer Energie für die Pumpen.

Die Ergebnisse zeigen deutlich höhere Unterschiede zwischen den Konstellationen, in denen lediglich der Parameter Temperaturschiene variiert. So liegt die Differenz zwischen ED-1,0-190-0,5 und ED-1,0-130-0,5 bei ca. 2,3 kg Öl-Äq. Diese Differenz lässt sich über alle Edelstahl-RWA beobachten, wobei sowohl mit steigendem Nennvolumen der Apparate als auch mit Zunahme der Temperaturrampe die Differenz bis zu 3,0 kg Öl-Äq. beträgt. Ähnliches zeigt sich auch bei den anderen betrachteten Materialien, wobei für die emaillierten Stahlbehältern mit Abweichungen von bis zu 3,6 kg Öl-Äq. ein Unterschied zu den anderen beiden Materialien auffällig ist.

Ebenfalls erkennbar ist der Einfluss des Prozessparameters Temperaturrampe. Ein Vergleich der Apparate, wie z. B. C22-1,6-190-0,5 zu C22-1,6-190-1,0 und C22-1,6-190-1,5, zeigt einen scheinbar exponentiell abnehmenden ökologischen Aufwand. Dies ist darin begründet, dass die Dauer des Prozessschrittes über den Verlauf abnimmt und somit die Pumpen kürzere Laufzeiten aufweisen. Daher fällt der Anteil, an den aus dem apparativen Aufwand resultierenden ökologischen Aufwendungen, geringer aus. Gleichzeitig nehmen die benötigten Wärmemengen und die Mengen an eingesetztem Thermalöl aufgrund höherer Vorlauftemperaturen und damit höheren Verlusten an die Umgebung zu, was wiederum mit einem höheren Aufwand für die Wiederaufbereitung verbunden ist. Die Abnahme der apparativen Aufwendungen wird daher teilweise durch den erhöhten Bedarf an Wärmemenge ausgeglichen, sodass kein linearer Zusammenhang erkennbar ist.

Die ökologische Bewertung in der WK MET zeigt vorrangig den Einfluss des apparativen Aufwands in Abhängigkeit vom Nennvolumen und den verbauten Materialien, in Verknüpfung mit dem variierten Prozessparameter Temperaturrampe. Die Ergebnisse zeigen, dass in dieser WK die Materialien, die in den emaillierten Stahlapparaten verbaut sind, einen geringeren ökologischen Aufwand verursachen als Edelstahl und C22. Dies wird durch die unterschiedlichen Nennvolumen deutlich. Die graphische Darstellung zeigt außerdem den bereits in der WK FD angezeigten Zusammenhang zwischen Temperaturrampe und dem durch die Apparate verursachten ökologischen Aufwand. Je höher die Rampe, desto kürzer dauert das Heizen und somit verringert sich der Anteil an den Aufwendungen für den Apparat. In dieser WK lässt sich quasi kein Einfluss des variierten Betriebsparameters Temperaturniveau ableiten. Die Unterschiede zwischen Konstellationen, die sich lediglich in diesem Parameter unterscheiden, wie z. B. C22-1,0-190-1,0 und C22-1,0-130-1,0, liegen über die ganze Untersuchungsmatrix verteilt zwischen 0,02...0,04 kg 1,4-DCB-Äq. Die Aufwendungen für die Apparate überdecken somit den Einfluss der Aufwendungen für Wiederaufbereitung der Betriebsstoffe und des Bedarfs an elektrischer Energie.

Die Ergebnisse der ökologischen Bewertung in der WK CC zeigen sowohl einen deutlichen Einfluss der verbauten Materialien als auch der Betriebsstoffaufbereitung und elektrischen Energie. So beträgt die Abweichung zwischen der Bereitstellung der Temperaturniveaus, bezogen auf Dampf, in dieser WK

ca. 73 % (im Vgl. in der WK FD ca. 13 %), was sich unmittelbar in dem Unterschied zwischen den variierten Betriebsparametern 130 °C und 190 °C widerspiegelt. Auffällig ist ebenfalls, dass der Einfluss der Materialien bei niedrigen Temperaturrampen und dem ökologisch vorteilhafteren Temperaturniveau von 190 °C die gesamtökologischen Aufwendungen für die C22-Apparate über denen der emaillierten Stahlapparate liegen. Dies betrifft die Konstellationen C22(St/em)-1,0-190-0,5 und C22(St/em)-1,6-190-0,5 sowie C22(St/em)-4,0-190-0,5. Bei diesen Konstellationen überdecken die ökologischen Aufwendungen für die Materialien den Einfluss der deutlich besseren Wärmeübertragung des C22-RWA gegenüber dem emaillierten Stahlapparat. Dieser Effekt hebt sich mit steigender Temperaturrampe auf. Für alle anderen untersuchten Konstellationen zeigt sich, ähnlich wie in der WK FD, die Tendenz, dass Edelstahl im direkten Vergleich mit C22 und emaillierten Stahl im Betrieb aus ökologischer Sicht vorteilhafter ist. Ebenfalls deutlich erkennbar ist auch in dieser WK der sinkende Einfluss der Materialien mit Zunahme der Temperaturrampe.

Die Ergebnisse dieser Sensitivitätsstudie zeigen, dass die bei der energetischen Untersuchung klar herausgestellten Unterschiede zwischen apparativen und prozessbedingten Parametern auch bei der ökologischen Bewertung erkennbar sind. Außerdem sind die verschiedenen Temperaturniveaus aus der ökologischen Perspektive relevant. Abhängig von den betrachteten WK sind die Einflüsse unterschiedlich stark ausgeprägt und weisen unter Umständen verschiedene Konstellationen als ökologisch beste bzw. schlechteste Wahl aus, sodass auch hier die Betrachtung verschiedener WK erforderlich ist.

Untersuchungen in diesem Detaillierungsgrad bedürfen eine detaillierte Abbildung einzelner Prozessschritte, in denen unterschiedlichste verfahrenstechnische Parameter variiert werden können. Diese Möglichkeit bieten die für die Abbildung von Produktionsprozessen entwickelten Bausteine vollumfänglich. Außerdem ist eine Einbindung in eine Infrastruktur von Vorteil, wie in dem 3-Ebenen-Modell vorgesehen. Anhand eben solcher Untersuchungen können ökologisch besonders vorteilhafte Parameterkonstellationen für einen bestehenden oder auch neu zu entwickelndem Produktionsprozesse identifiziert werden. So zeigen die Ergebnisse Abweichungen zwischen dem niedrigsten und höchsten Aufwand bezogen auf den Worst-Case in der WK FD von ca. 53 % (ED-1,0-190-1,5 vs. St/em-4,0-130-0,5), in der WK MET von ca. 78 % (St/em-1,0-190-1,5 vs. C22-4,0-130-0,5) und in der WK CC von ca. 70 % (siehe WK FD). Diese Art der Betrachtung liefert erstens aus Sicht des Betriebes die Möglichkeit, durch die Wahl geeigneter TAN den ökologischen Impact des Produktionsprozesses zu beeinflussen und zweitens der Forschung und Entwicklung Ansatzpunkte im Hinblick auf Apparategestaltung und Prozessführung bereit zu stellen. Vor allem für die Verfahrensentwicklung sind Orientierungspunkte, wie Worst-Case/Best-Case-Betrachtungen oder Vergleiche mit einem Benchmark, wertvoll bei der Berücksichtigung ökologischer Aspekte im Hinblick auf die Gestaltung nachhaltiger Produktionsverfahren.

## 5.7 Auswertung und Diskussion der Ergebnisse

Die durchgeführten Bewertungen verfolgen das Ziel, die ökologischen Aufwendungen eines Produktionsprozesses in einer MZA zu ermitteln und zu analysieren, um Einflussgrößen sowie kritische Prozessabschnitte bzw. GO zu identifizieren. Basierend auf der ökologischen Betrachtung und den durchgeführten Analysen sollen Einflussfaktoren aufgezeigt werden, welche die Betriebsleitung als Grundlage für die Ableitung von Handlungsempfehlung nutzen kann, um die Umweltperformance der Produktionsprozesse in der MZA gezielt beeinflussen zu können. Dazu werden sowohl eine gesamtökologische Bewertung und Analyse eines Produktionsprozesses durchgeführt als auch der Betrieb dessen einzelner GO sowie das Rüsten und Reinigen der belegten Teilanlagen untersucht, um typische Einflussfaktoren des Produktionsumfeldes aufzuzeigen. So steht schlussendlich eine Datenbasis zur Verfügung, die auch für weiterführende Betrachtungen im Rahmen der Verfahrensentwicklung und -design genutzt werden kann.

In diesem Unterkapitel werden zunächst die erhaltenen Ergebnisse hinsichtlich ihrer Aussagekraft und Validität diskutiert. Anschließend erfolgen die Auswertung hinsichtlich des gesetzten Ziels der Untersuchungen sowie die Ableitung von Handlungsempfehlungen.

### 5.7.1 Belastbarkeit der Ergebnisse

Die nachfolgende Diskussion zielt auf die Belastbarkeit der erhaltenen Ergebnisse sowie auf deren Aussagekraft. Als größter Einflussfaktor ist hier die Modellierung zu nennen, die zur Ermittlung des Großteils der Verbrauchsdaten des Produktionsprozesses dient und unmittelbar von den zur Verfügung stehenden Daten zum Produktionsprozess und der MZA abhängen. Ebenfalls von Bedeutung sind die gesetzten Systemgrenzen sowie die Auswahl und damit die Qualität der Datensätze zur Erstellung der Sachbilanz als Basis für die Wirkungsabschätzung.

Hinsichtlich der Modellierung wird auf eine möglichst produktionsnahe Abbildung des Produktionsprozesses gezielt, vor allem im Hinblick auf apparative und betriebstechnische Einflussgrößen, welche die Besonderheiten der Produktion in einer MZA erfassen. Aus diesem Grund erfolgt die Modellierung des Produktionsprozesses nach dem 3-Ebenen-Modell in einem sehr hohen Detaillierungsgrad, in dem die einzelnen GO, zerlegt in ihre Prozessschritte, abgebildet werden können. In diesen als Bausteine ausgeführten Prozessschritten können sowohl apparative Parameter in Abhängigkeit von den belegten TAn als auch betriebliche und prozesstechnische Größen, gekennzeichnet durch die Betriebsstoffversorgung in der MZA als auch durch rezepturbasierte Vorgaben, abgebildet werden. Dieser Modellierungsansatz stellt sicher, dass der verfahrenstechnische Hintergrund der einzelnen GO erfasst ist. Der Detaillierungsgrad der Daten und die genutzten Parameter spiegeln typische Angaben wider, die im Workflow von Prozessingenieuren hinreichend bekannt sind und entsprechend eine zügige Einschätzung hinsichtlich Qualität und Quantität ermöglichen. In die Modellierung wurden vorrangig Primärdaten eingebunden, die unmittelbar den Herstellvorschriften, internen Datenbanken und Betriebsprotokollen sowie dem Leitsystem entnommen wurden. Lediglich in Bezug auf den Einsatz an Regelluft wurde auf Schätzungen der Betriebsingenieure zurückgegriffen. Ähnliches gilt für die Berechnung der Verbräuche durch die Pumpen, für die keine Pumpenkennlinien hinterlegt sind. Für dieses Equipment wurde angenommen, dass es unter Volllast mit einem festgelegten Wirkungsgrad betrieben wird. Außerdem erfolgte die Ermittlung des Betriebsstoffeinsatzes der Kondensatoren ohne apparativen Einfluss und damit auch ohne Berücksichtigung von Verlusten.

Die Analysen haben gezeigt, dass die Verbräuche an elektrischer Energie in den verschiedenen WK eine untergeordnete Rolle spielen, sodass die Aufwendungen der Pumpen keinen signifikanten Einfluss auf die Bewertungsergebnisse haben, zudem durch diese Annahmen die Verbräuche über- und nicht unterschätzt werden. Anders verhält es sich mit den Annahmen zu den Kondensatoren. Die Sensitivitätsstudie II (Kapitel 5.6.6) zeigt, dass der Einfluss von apparativen Parametern, wie Materialart und den einhergehenden physikalischen Größen, in den verschiedenen WK einen deutlichen Einfluss haben können. Auch zeigen die Autoren Wesche et al. [98], dass Bauformen und Oberflächenstrukturen im Bereich der Wärmeübertragung die Ergebnisse einer ökologischen Bewertung auf Prozessebene beeinflussen können. Aus diesem Grund kann davon ausgegangen werden, dass die ökologischen Auswirkungen in den GO DE01, DE02, DE03 und DE04, vor allem im Hinblick auf die Inputklasse Betriebsstoffe, unterschätzt werden. Durch die Einbindung der Primärkreisläufe, des Basisbetriebes zentraler TAn sowie der zentralen Elemente der MZA wird die Allokation der Aufwendungen resultierend aus der Produktionsinfrastruktur des betrachteten Prozesses in der MZA im Großen und Ganzen sichergestellt. Trotz der genannten Einschränkungen ist die Qualität der genutzten Primärdaten, die im Modell zur Berechnung der Verbrauchsdaten hinterlegt wurden, in Summe nach der Leitlinie der Europäischen Kommission [5] als sehr gut bis gut einzustufen.

Die aufgestellten Systemgrenzen ermöglichen die gewünschten Aussagen im Hinblick auf die Identifizierung von sowohl kritischen Einsatzstoffen als auch GO oder Prozessabschnitten, die einen großen Einfluss auf die ökologische Performance des betrachteten Produktionsprozesses ausüben. Es ist davon auszugehen, dass ein vollständiges Einbeziehen der Lebenszyklusabschnitte *Herstellung Anlagenkomponenten* und *Transportwege* sowie der Anteil der nicht-produktiven Infrastruktur des Gebäudes die Gesamtumweltwirkung erhöht. Dabei ist vorrangig die Herstellung der einzelnen Apparate und sonstigem Equipment anzuführen, da bei diesen von einem aus energetischer Sicht hohen Aufwand ausgegangen werden kann (siehe Kapitel 2.5). Die hier gezeigten Ergebnisse unterschätzen daher den Anteil der Apparate an den ökologischen Aufwendungen des Produktionsprozesses systematisch. Bei den Transportwegen wird ein geringer Einfluss erwartet, da die eingesetzten Lösemittelmengen überschaubar sind und in den verschiedenen GO i. d. R. in unterschiedlichen Kombinationen eingesetzt werden. Die durch die Transporte verursachten ökologischen Mehraufwendungen würden daher auf die verschiedensten GO abhängig von den eingesetzten Betriebs- und Hilfsstoffen verteilen, sodass eine signifikante Änderung in den Ergebnissen nicht zu erwarten ist. Ähnliches gilt für die Transporte der Anlagegüter. Die durch den nicht-produktiven Teil der Gebäudeinfrastruktur verursachten Aufwendungen würden, wie die zentralen Bestandteile der MZA, zu gleichen Teilen auf die Produktionsprozesse im Betrachtungsjahr allotiert werden. Daher ist davon auszugehen, dass sich zwar die absoluten Aufwendungen der einzelnen GO erhöhen, die Aussagen der Schwerpunktanalysen bzgl. des Betriebes der GO etc. aber nicht beeinflusst werden.

Die Qualität der ausgewählten Datensätze aus der ecoinvent Datenbank zur Abbildung der Hintergrundprozesse, also die mit der Bereitstellung der Hilfsstoffe, der verbauten Anlagenmaterialien, der zum Rüsten und Reinigen eingesetzten Betriebsstoffe, etc., wird nach den Beurteilungsvorgaben der Leitlinie der Europäischen Kommission in Summe als mittlere Datenqualität eingestuft. Dies ist allerdings vorrangig auf die Datenbankversion 2.2 zurückzuführen, da hier der geforderte Umfang der Aussagen zu den einzelnen Kriterien nicht ausreicht. Eine nachträgliche Einbindung von Datensätzen aus den 3.x Versionen der Datenbank (aktuell: v3.6 (2019)) würde zu einer deutlich besseren Qualitätsbeurteilung führen. In dieser Version stehen zum einen mehr definierte Datensätze zur Verfügung und zum anderen kann auch die in der Leitlinie geforderte Transparenz bzgl. Allokationsansätze zur Beschreibung der Multifunktionalität und der Systemgrenzen bedient werden. Die aus den Datensätzen resultierenden Unsicherheiten, die sich in der Sachbilanz widerspiegeln, sind hier nicht diskutiert. Mögliche Methoden dazu finden sich in der Literatur (siehe z. B. [164]).

Die eingesetzten Daten für die hier durchgeführte Bewertung entsprechen in Bezug auf das Betrachtungsjahr der Untersuchungen 2011 dem „Stand der Technik“, da die 3.x Versionen der ecoinvent-Datenbank erst ab dem Jahr 2013 zur Verfügung standen. In Summe kann davon ausgegangen werden, dass sowohl die Qualität der Modellierung, als auch der eingesetzten Daten solide Aussagen sowohl zum Produktionsprozess und dem Einfluss der MZA als auch zu den Handlungsempfehlungen im Hinblick auf Prozessverbesserungen zulassen.

### 5.7.2 Auswertung der Ergebnisse und Empfehlungen

Nach den vorliegenden Ergebnissen birgt die Reduzierung der eingesetzten Hilfsstoffe für den Betrieb der GO sowie der organischen Fluiden zur Reinigung der TA große Potentiale, die Umweltwirkungen des Produktionsprozesses deutlich zu verringern. Dies bestätigen auch die Autoren Tufvesson et al. [113], die in ihrem Review resümieren, dass für Ökobilanzen im Industriezweig der Feinchemie die Lösemittel i. d. R. die kritischste Einflussgröße in der Umweltperformance der Produkte darstellen.

Für den hier untersuchten Produktionsprozess führt dies im Hinblick auf den Hilfsstoffeinsatz unweigerlich zur grundlegenden Überprüfung der Ausführung der einzelnen Grundoperationen und den damit verbundenen verfahrenstechnischen Aufgaben. Nachfolgend werden verschiedene Empfehlungen bezogen auf den aktuellen Betrieb der GO, der Reinigung, der Apparatebelegung sowie mögliche Ansätze im Rahmen der Verfahrensentwicklung und des -designs ausgeführt.

### Betrieb der GO

- Um den Betrieb der GO signifikant zu verbessern, müssen die in dem Prozess eingesetzten **Hilfsstoffe** zur Diskussion gestellt werden. Die Hilfsstoffe sind Bestandteil der Rezeptur, deren Festlegung in den frühen Phasen der Prozessentwicklung erfolgt [63] und deren Änderungen in einem bestehenden Prozess aus ökonomischer Sicht i. d. R. mit einem zu hohen Aufwand verbunden ist. Daher gilt es für zukünftige Prozesse den ökologischen Aspekt bereits bei den Laboruntersuchungen zu berücksichtigen und so möglichst ökologisch vorteilhafte Lösemittel zur Erfüllung der Verfahrensaufgabe zu identifizieren. Dies wäre durch die Reduzierung der Mengen der aktuell eingesetzten Hilfsstoffe oder alternativer Stoffe realisierbar. An dieser Stelle können Softwarelösungen wie z. B. Cosmo RS für ein erstes Screening genutzt werden.
- Eine andere Möglichkeit stellt das Recycling von Lösemitteln dar. In dem Produktionsprozess werden in den verschiedenen Grundoperationen Hilfsstoffe eingesetzt, die aus dem Prozess als **Reststoffe** austreten. Für diese sollten die Möglichkeit der Rückgewinnung geprüft werden. Die in den Reststoffströmen vorliegenden Mengen und Vielfalt an Verunreinigungen nehmen mit dem Verlauf des DSP ab. Aktuell werden die Reststoffströme aus den GO in IBC gesammelt und zur Verbrennung gegeben. Um die Rückgewinnung zu realisieren, müssen die Reststoffströme aufgegliedert nach einzelnen Lösemitteln bzw. Zweistoffgemischen zwischengelagert werden. In den verschiedenen GO und auch Produktionsprozessen der MZA kommen i. d. R. eine überschaubare Anzahl an Hilfsstoffen zum Einsatz, die entsprechend zusammengeführt werden können. Daraus resultiert ein höherer logistischer Aufwand, der in den Arbeitsabläufen integriert werden müsste. In Bezug auf das Recycling ist der Aufwand zum Erreichen der für den Einsatz als Hilfsstoff im Prozess geforderten Reinheit für die einzelnen Lösemittel, wie in der Sensitivitätsstudie I gezeigt, individuell zu prüfen. Sollte das Recycling extern, z. B. durch einen Lohndestillateur erfolgen, sind die ökologischen Aufwendungen für die zusätzlichen Transportwege ebenfalls zu berücksichtigen.
- Die GO **CR01** und durch diese GO bedingte **DE04** verursachen in dem Produktionsprozess in allen betrachteten WK die in Summe höchsten ökologischen Aufwendungen. Diese resultieren vorrangig aus dem hohen Hilfsstoffeinsatz und dem Reststoffaufkommen. Auch ist der nicht-wertschöpfende Anteil an den ökologischen Aufwendungen des Produktionsprozesses bei diesen GO am höchsten, was auf das hohe Reststoffaufkommen und den damit verbundenen Produktverlusten zurückzuführen ist. Um die Materialverluste und Materialaufwendungen und damit die ökologischen Aufwendungen zu verringern, sollte die GO CR01 zur Diskussion gestellt werden. Dabei ist zu prüfen, ob die Realisierung der Verfahrensaufgabe durch eine andere GO ökologisch deutlich vorteilhafter ausfällt. Für die CR01 und DE04 könnte z. B. der Einsatz eines Membranverfahrens oder einer Filtration geprüft werden. Dabei sollten eventuelle Änderungen bzw. Auswirkungen an vor- oder nachgeschalteten GO im direkten Vergleich berücksichtigt werden.

### Reinigung der TAn

- Die Ergebnisse zeigen, dass die **Nutzung einzelner TAn** in der Produktion mehrmals aufeinander folgend sowohl aus zeitlichen als auch betriebstechnischen Gründen (u.a. Sicherheit, Zeit, Rüsten/Reinigungsaufwand) ökologisch vorteilhaft ist. Eine daraufhin optimierte Belegungsplanung wür-

## 5 Ökologische Bewertung eines Produktionsprozesses in einer Mehrzweckanlage

---

de die Anzahl der Rüst- und Reinigungszyklen deutlich verringern und somit den Einsatz der ökologisch vorrangig relevanten Reinigungsfluide signifikant reduzieren.

- Ebenfalls eine Reduzierung der Aufwendungen ist durch einen **Kampagnenbetrieb** zu erwarten. Der Kampagnenbetrieb und damit die Produktionsdauer eines Produktes gehen unmittelbar einher mit einer Diskussion hinsichtlich der Flexibilität in der Produktion. Längere Kampagnen stellen eine Möglichkeit dar, die bestehenden Standardreinigungsprotokolle anzupassen, da die Gefahr von Kreuzkontaminationen nicht zu erwarten ist. Längere Kampagnen bedeuten allerdings einen höheren Lagerbestand bzw. setzen voraus, dass ein Lager in entsprechendem Umfang vorhanden ist und das Produkt über eine entsprechende Lagerfähigkeit verfügt. Auf der anderen Seite schränken längere Kampagnenlaufzeiten die Flexibilität und womöglich eine anfragenorientierte Produktion ein.
- Eine Anpassung der **Standardreinigungsprotokolle** bzw. die Entwicklung individueller Reinigungsregime, orientiert an Verschmutzungsgrad und -art, würde ebenfalls dazu beitragen, die Menge der eingesetzten Reinigungsfluide zu reduzieren. Hinzu kommt, dass dieses Vorgehen das Potential birgt, die Reinigungsvorgänge deutlich zu beschleunigen, da vor allem bei den RWA das aktuell typische Auskochen im Rückfluss einen nicht unerheblichen Zeitaufwand darstellt. Gleichzeitig würde für die TAN, mit einem RWA als Hauptapparat, der Verbrauch an Betriebsstoffen zur Bereitstellung der verschiedenen Temperaturniveaus reduziert werden können. Als mögliche Alternative sollte auch für die RWA der Reinigungsansatz des CIP nochmals geprüft werden, da im Rahmen der Betrachtung lediglich das Reinigungsprotokoll für die Bauform Trockner mit einem geringen NV als Vergleich herangezogen wurde. Allerdings gilt es neben dem RWA, auch den Kondensator sowie die Aufsatzgefäße in einer solchen Betrachtung mit zu berücksichtigen.
- Auch in Bezug auf die in der Reinigung **eingesetzten LM** können durch ein Recycling, die mit dem Reststoffaufkommen sowie die mit der Bereitstellung der LM verbundenen ökologischen Aufwendungen reduziert werden. Außerdem könnte der Einsatz jener recycelten LM geprüft werden, die als Hilfsstoffe im Betrieb eingesetzt und in größeren Mengen anfallen, für die Reinigung aber evtl. eine geringere Reinheit aufweisen dürfen. Es ist davon auszugehen, dass der ökologische Aufwand für LM mit geringerem Reinheitsgrad niedriger ausfällt.

### Apparatebelegung

- In einzelnen WK hat der apparative Aspekt bzgl. Bereitstellung und Entsorgung sowie Instandhaltung einen deutlichen Einfluss auf die gesamtökologischen Auswirkungen des Produktionsprozesses. Daher birgt die gezielte Auswahl einzelner TAN vor allem im Hinblick auf das **verbaute Material** ein Potential zur Verringerung der Umweltwirkungen. In diesem Zusammenhang sollte, wenn sowohl Edukte als auch Produkte und eingesetzte Hilfsstoffe im Hinblick auf die Korrosionsbeständigkeit es zulassen, Edelstahlapparaten der Vorzug vor emaillierten Stahlapparaten oder solchen aus Hastelloy (C22) gegeben werden.
- Die Wahl des Materials hat außerdem einen unmittelbaren Einfluss auf den Betriebsstoffverbrauch, da die **physikalischen Materialparameter** sowie die in den Normen vorgegebenen **Materialstärken** die Wärmeübertragung beeinflussen. Die Sensitivitätsstudie zum Heizen hat gezeigt, dass sowohl Edelstahl als auch Hastelloy (C22) als Apparatematerial im Vergleich zu emailliertem Stahl zu geringeren ökologischen Belastungen in den untersuchten WK *Verbrauch fossiler Ressourcen (FD)*, *Seewasser Ökotoxizität (MET)* und *Klimaänderung (CC)* führen.
- Ebenfalls einen großen Einfluss hat der Produktionsstandort und damit verbunden die zur Verfügung stehende Infrastruktur, wie u. a. **Temperaturschienen** an den TAN. An dieser Stelle ist der ökologische Aufwand zur Wiederaufbereitung, wie in der Sensitivitätsstudie II dargestellt, wesentlich abhän-

gig von dem gewählten Energieträger und dem jeweiligen Temperaturniveau. In Bezug auf die hohen, zum Heizen eingesetzten Temperaturniveaus, sollte der Primärenergieträger Erdgas dem Einsatz von Dampf zur Wiederaufbereitung vorgezogen werden.

- Die Untersuchungen haben gezeigt, dass die apparativen Aspekte einen nicht zu vernachlässigbaren Einfluss auf die ökologische Bewertung in verschiedenen WK ausüben. Prinzipiell ist für die betrachtete MZA in Bezug auf die TAn zu prüfen, inwiefern der **ökologische Aspekt in die Belegungsplanung integriert** werden kann.

#### Verfahrensentwicklung

- Eine Stellschraube zur Verbesserung der ökologischen Performance des Produktionsprozesses ist eine Steigerung von Umsatz und Ausbeute, z. B. durch Anpassung von Art und Menge der eingesetzten Hilfsstoffe. Damit ist die vorliegende **Rezeptur** zur Diskussion zu stellen. Ebenfalls sollte die Prozessführung, vorrangig der Parameter Temperaturrampe beim Heizen und Kühlen, im Rahmen der damit einhergehenden Prozessentwicklung bzw. des -designs berücksichtigt werden. Die Sensitivitätsanalyse II hat gezeigt, dass dieser einen wesentlichen Einfluss auf den Betriebsstoff- sowie den Energiebedarf ausübt. In diesem Zusammenhang ist zu prüfen, ob und in welchem Umfang weitere Prozessparameter der Produktionsprozesse, die in der MZA betrieben werden, über das Potential verfügen die ökologischen Auswirkungen positiv zu beeinflussen.
- Eine Reduzierung des Reststoffaufkommens und Hilfsstoffeinsatzes könnte ebenfalls durch eine Verbesserung der **Ausbeute** und einer damit einhergehenden Reduzierung der Produktverluste erreicht werden. Eine höhere Ausbeute verringert den Aufwand im DSP, da weniger Nebenprodukte sowie nicht umgesetzte Edukte abzutrennen sind. Daraus resultiert sowohl eine Reduktion des Betriebsstoffeinsatzes als auch der Energiebedarfe und vor allem der Einsatz der Hilfsstoffe. Gleichzeitig werden die eingesetzten Eduktmengen verringert, die, wenn auch in der Untersuchung nicht betrachtet, in der Spezialchemie einen großen Einfluss auf die Ergebnisse einer ökologischen Prozessbewertung haben können, wie z. B. in Koller et al. [165] oder Ott et al. [52] gezeigt.
- Eine deutliche Verbesserung der ökologischen Prozessperformance könnte außerdem durch den Austausch der aktuellen **GO CR01** gegen eine andere GO mit einem abweichenden verfahrenstechnischem Trennmechanismus erreicht werden. Die hohen ökologischen Aufwendungen resultieren vorrangig aus den Mengen an eingesetztem Elutionsmittel sowie dem Säulenmaterial als auch aus den anfallenden Reststoffmengen, die in der nachgelagerten GO DE04 abgetrennt werden müssen. Davon ausgehend, dass der ökologische Aufwand dieser GO und auch der damit eng verknüpften GO DE04 um je 30 % gesenkt wird, bedeutet für den Produktionsprozess eine Reduzierung der Umweltwirkung in den sechs hier näher betrachteten WK von mindestens 9...15 %. Als mögliche Alternativen könnten hier unter dem Aspekt „ökologische Performance“ z. B. eine Filtration oder Membranverfahren untersucht oder auch neue Technologien, wie z. B. das MCSGP-Verfahren<sup>25</sup> hinsichtlich ihrer Einsatzmöglichkeiten geprüft werden.
- Die Sensitivitätsstudie zu den apparativen, betrieblichen und prozesslichen Einflussparametern zeigt, dass diese die ökologische Performance eines Prozessschrittes und damit schlussendlich des Produktionsprozesses, signifikant beeinflussen können. In der Modellierung sind solche Parameter durch die **Nutzung des Bausteinkonzepts** integriert. Dies ermöglicht eine Prüfung verschiedener Apparatekonzepte zur Identifizierung der ökologisch vorteilhaftesten Konfiguration bei gegebenen Prozessbedingungen:

<sup>25</sup> MCSGP-Verfahren steht für multicolumn gountercurrent solvent gradient purification und ist in der Literatur beschrieben z. B. in [166].

- Retrospektiv besteht die Möglichkeit, die bestehenden TAn gegeneinander zu vergleichen und so eine ökologisch optimale Belegung der zur Verfügung stehenden TAn für den einzelnen Produktionsprozess zu identifizieren.
- Prospektiv bietet dies die Option zu prüfen, ab wann die Integration einer zusätzlichen TAn mit engeren Betriebsfenstern in der bestehenden MZA aus ökologischerer Sicht sinnvoll ist. Dabei würde der apparative Aufwand für den einzelnen Prozess steigen, aber ggf. die Aufwendungen für Betriebsstoffe und Hilfsstoffe sinken. In diesem Zusammenhang wären Grenzwertbetrachtungen (siehe z. B. Kuschnerow et al. [45]) notwendig, die aufzeigen, wie lange der oder die Prozesse betrieben werden müssten, um die Neuanschaffung aus ökologischer Sicht rentabel zu machen.
- Die Ergebnisse zeigen, dass für die Erarbeitung von Verbesserungsansätzen diverse verfahrenstechnische Informationen notwendig sind. Eine Vielzahl der einflussreichen Parameter aus prozesslicher Sicht (u. a. Auswahl der Hilfsstoffe oder die Prozessführung) werden bereits in frühen Phasen der Prozessentwicklung und -design festgelegt. Um einen Produktionsprozess möglichst umweltverträglich zu gestalten, ist daher die Einbindung von ökologischen Betrachtungen bereits in diesen frühen Phasen unabdingbar. Die Wirkung solcher Betrachtungen haben verschiedene Autoren, wie z. B. Biwer und Heinze [167], Curzons et. al [168], Grundemann et al. [169], Kuschnerow et al. [45] oder Patel et al. [170] zeigen können.

Eine zusätzliche Sensitivitätsstudie um den Einfluss der nicht in den Betrachtungen berücksichtigten Reaktion zu untersuchen, wäre ebenfalls sinnvoll - vor allem im Hinblick auf die gesamtökologischen Aufwendungen des Produktionsprozesses. Zu den Edukten stehen allerdings, wie bereits beschrieben, keine generischen Datensätze zur Verfügung und auch die Ermittlung von Datensätzen der Vorstufen ist aufgrund fehlender belastbarer Daten nicht möglich. Die Verwendung von Tools wie FineChem der ETH Zürich [102], welches die ökologischen Aufwendungen die mit der Synthese des Produktes einhergehen für den kumulierten Energieaufwand [171], in der Wirkungskategorie Klimaänderung nach dem Charakterisierungsmodell des IPCC [172] und dem Bewertungsansatz Eco-Indicator99 [109] ermittelt, wäre an dieser Stelle theoretisch möglich. Dieses Tool ist allerdings für das in diesem Prozess hergestellte Produktmolekül nicht anwendbar. Die Verwendung wird für einige chemischen Klassen nicht empfohlen, da für diese in der Entwicklung nicht genügend Beispieldatensätze zur Verfügung standen. Daher gilt für diese, dass die Unsicherheiten sehr hoch ausfallen und die Ergebnisse als nicht aussagekräftig von den Autoren eingeschätzt werden. Zu diesen Klassen zählen lt. den Angaben der ETH Zürich Kunststoffpolymere, chirale Komponenten, metallorganische Komponenten, Chemikalien die Brom- oder Iodatome bzw. mehr als ein Schwefel-, Phosphor- oder mehr als vier Fluoridatome enthalten. In diesen Klassen ordnet sich das in der Reaktion des Produktionsprozesses hergestellte Molekül ein, sodass diese Möglichkeit der Abschätzung nicht gegeben ist. Um den Einfluss der Reaktion auf die Gesamtbewertung zu ermitteln, müssten daher die Daten zur Reaktion und auch die Herstellung der Vorstufen der eingesetzten Edukte erfasst werden.



## 6 Zusammenfassung und Ausblick

Diese Arbeit zielt auf die Entwicklung einer Methode zur ökologischen Bewertung von Produktionsprozessen in Mehrzweckanlagen, der sowohl die spezifischen Gegebenheiten der Produktionsstätte erfasst als auch die Möglichkeit bietet einzelne Produktionsprozesse im Detail zu analysieren und verfahrenstechnische Verbesserungsansätze zu identifizieren. In diesem Kapitel werden die erzielten Ergebnisse und Erkenntnisse im Überblick zusammengefasst sowie Ansatzpunkte für weiterführende Untersuchungen aufgezeigt.

### 6.1 Zusammenfassung

Mehrzweckanlagen (MZA) sind Produktionsanlagen, in denen im Bereich der Spezialchemie Spezialitäten mit Jahresproduktionsmengen von einigen 100 kg...1000 t pro Jahr gefertigt werden. Der Lebenszyklus des Produktportfolios dieser Anlagen ist aufgrund der Schnelllebigkeit des Marktes gering und liegt deutlich unter jenen der Anlagen. Aus diesem Grund erfolgt die Ausrüstung dieser Anlage orientiert an einer möglichst großen Produktvielfalt, sodass eine hohe Auslastung und somit eine gleichbleibend hohe Deckung der Fixkosten gewährleistet ist. Die MZA sind mit Teilanlagen (TAn), die sich in Größe, Ausstattung und Werkstoffen unterscheiden sowie zentralem Equipment ausgestattet. Durch diese Anlagenstruktur wird ein hohes Maß an Flexibilität der Produktion hinsichtlich Struktur und Kapazität gewährleistet. Die einzelnen TAn können unabhängig voneinander betrieben werden. Ihr Verschalten erfolgt in Abhängigkeit von geforderter Prozessstopologie und notwendigen Anlagenvolumina für die Produktgewinnung. Die einzelnen TAn sind gekennzeichnet durch große Betriebsfenster, die einen weiten Parameterbereich abdecken.

Für die ökologische Bewertung eines in einer MZA betriebenen Produktionsprozesses resultieren aus den Charakteristika der Struktur und des Betriebs der Anlage Herausforderungen. Zum einen sind die Produktionsprozesse ausrüstungsorientiert ausgelegt und die Ausstattung der TAn beeinflusst die Verbräuche der einzelnen Prozesse. Zum anderen muss bei der Verbrauchsdatenerfassung bzw. -berechnung berücksichtigt werden, dass verschiedenste Prozesse parallel betrieben und die Verbrauchsdaten i. d. R. zentral für die gesamte Anlage erfasst werden.

Die in dieser Arbeit vorgestellte Methode umfasst Ansätze, die unter Berücksichtigung der MZA-Struktur sowohl die Ermittlung eines detaillierten Abbildes der Verbräuche als auch die ökologische Bewertung und umfassende Analysen zur Ableitung von Verbesserungsansätzen ermöglichen. Durch die hier genutzte Strukturierung der Inputs in die Klassen Edukte, Hilfsstoffe, Betriebsstoffe, Energie, Anlage sowie der Outputs in Reststoffe, Emissionen und Produkt, können die Stoffe und Energien entsprechend ihrer Bedeutung im Produktionsprozess zugeordnet werden. Im Hinblick auf die Ableitung von Verbesserungsansätzen besteht retrospektiv die Möglichkeit Ansatzpunkte zu identifizieren - ohne Eingriff in die Rezeptur der einzelnen Produkte. Ebenso ist die Identifizierung von Verbesserungsansätzen auch prospektiv möglich. In der Forschung und Entwicklung können einzelne Prozesse gezielt im Hinblick auf eingesetzte Edukte und Hilfsstoffe sowie Prozessbedingungen (wie z. B. Druck oder Temperatur) untersucht und verbessert bzw. Hinweise für die Gestaltung zukünftiger Prozesse abgeleitet werden.

Das entwickelte 3-Ebenen-Modell repräsentiert einen Modellierungsansatz, der die Abbildung und Bilanzierung der einzelnen Produktionsprozesse im betrieblichen Kontext der Produktionsanlage unterstützt. In unterschiedlichen Detaillierungsgraden (MZA, Produktionsprozess, einzelne GO sowie deren Prozessschritte und einzelne Apparate bzw. Equipment) können sowohl ökologische Bewertungen als auch umfassende Analysen und Sensitivitätsstudien durchgeführt werden. Dies wird unterstützt durch die Einbindung von parametrisierten Bausteinen, die neben den apparativen Größen auch betriebliche und prozessliche Einflussgrößen erfassen. Die Parametrisierung ermöglicht hierbei eine hohe Flexibilität und Geschwindigkeit bei der Modellierung anderer Standorte, Apparate oder Einsatzstoffe. Der damit erreichte Detaillierungsgrad liefert Daten und Parameter bezogen auf verfahrenstechnische Zusammenhänge, die im Engineering-Umfeld bekannt und gut handhabbar sind. Daher haben die Ergebnisse aus den Analysen und Bewertungen eine Chance in den bestehenden Workflow der Betriebs- und Entwicklungsingenieure integriert zu werden. Die Struktur der Modellierung repräsentiert zusätzlich eine bekannte Prozessdarstellung in Grundoperationen sowie Apparaten, wie sie aus der Fließbildsimulation oder anderen typischen Tools im verfahrenstechnischen Umfeld geläufig sind. Vor diesem Hintergrund werden eine höhere Akzeptanz und tatsächliche Verwertung der Daten erwartet.

Die Basis der Modellierung bildet das Softwaretool *umberto*<sup>®</sup>. Dieses ist eingebettet in einer Modellierungsumgebung, die einen Zugriff auf verschiedene Datenbanken, Makros zur Berechnung von Verbrauchsdaten sowie die Auswertung der Daten in der Tabellenkalkulationssoftware Excel ermöglicht. Die Verbrauchsdaten werden in Abhängigkeit von physikalischen und verfahrenstechnischen Parametern ermittelt. Anhand einer Studie zum Erwärmen eines Lösemittels in einem Rührwerksreaktor (RWA) konnte gezeigt werden, dass sowohl die apparativen, betrieblichen und auch prozesslichen Aspekte einen großen Einfluss auf die Verbrauchsdaten ausüben. In dieser Untersuchung flossen 54 Konstellationen aus den Parametern „*Nennvolumen des RWA*“, „*Apparatematerial*“ sowie der Betriebsparameter „*Temperaturniveau*“ und der Prozessgröße „*Temperaturrampe*“ ein. Für die durchgeführte Sensitivitätsstudie hinsichtlich der Umweltwirkungen erfolgte eine Erweiterung des Betrachtungsrahmens, um die mit der Bereitstellung der Wärme einhergehenden Verbräuche in die ökologische Bewertung zu integrieren. Die Ergebnisse der Verbrauchsdatenermittlung zeigen einen Einfluss der untersuchten Parameter, der unterschiedlich groß ausfällt und Abweichungen zum ideal errechneten Wärmebedarf zwischen 10...85 % belegt. Hinsichtlich der *energetischen Betrachtungen* weisen die untersuchten apparativen Parameter einen höheren Einfluss auf den Wärmebedarf auf als die Variation der Prozessgröße Temperaturrampe. Dahingegen zeigen die Ergebnisse der *ökologischen Bewertung* für die variierten Parameter in Abhängigkeit von den betrachteten Wirkungskategorie (WK) eine unterschiedlich große Bedeutung. Die ökologische Analyse umfasste die drei WK *Verbrauch fossiler Ressourcen*, *Seewasser Ökotoxizität* und *Klimaänderung*. Die Ergebnisse dieser Studie zeigen, dass sowohl apparative als auch betriebliche und prozessliche Größen einen nicht vernachlässigbaren Einfluss auf die Verbrauchsdaten und damit ökologische Performance eines Prozessschrittes haben. So treten im Vergleich zum Benchmark in den drei WK maximale Abweichungen zwischen 73...100 % auf. Derart hohe Abweichungen zeigen, dass sowohl apparative als auch betriebliche und prozessliche Größen bei einer ganzheitlichen Modellierung und Analyse der Produktionsprozesse zwingend berücksichtigt werden sollten.

Für die Erfassung und Berücksichtigung der Produktionsanlage in der ökologischen Bewertung wird ebenfalls ein Ansatz präsentiert. Dazu wurde eine MZA der Fa. Merck KGaA im Detail aufgenommen und unterteilt in belegungsabhängige sowie -unabhängige Anlagenbestandteile. Belegungsabhängige Bestandteile stellen die TAN sowie das Equipment, die MSR-Technik und die Verrohrung an den TAN dar. Die belegungsunabhängigen Bestandteile umfassen zentrale Anlagenbestandteile und die Anlageninfrastruktur. Für die Bewertung einer TAN sind die Hauptapparate und das Equipment zu erfassen. Abhängig von der Komplexität der TAN werden anschließend mittels eines Komplexitätsfaktors die verbauten Materialmengen für Verrohrung etc. abgeschätzt. Anhand der im Betrieb gesammelten Daten wurden mit 0,5

sowie 0,75 und 1,5 drei Komplexitätsfaktoren vorgeschlagen, die eine vollständige Abschätzung der in einer TAn verbauten Materialmengen ermöglichen und auf andere Anlagen übertragbar sind. Um die Lebensdauer der MZA in der ökologischen Bewertung eines Produktionsprozesses zu berücksichtigen, wurde ein Ansatz entwickelt, der die jährlichen, aus der Abschreibung resultierenden Aufwendungen sowie die Instandhaltung über die Lebensdauer erfasst. Dieser Ansatz sieht einen jährlich den Prozessen zuzuordnenden Anteil von 15 % der ermittelten Aufwendungen vor und berücksichtigt damit sowohl den über die Betriebsdauer zunehmenden Instandhaltungsaufwand als auch die Neubeschaffung einzelner Ausrüstungsgegenstände. Die Zuordnung der belegungsunabhängigen Bestandteile einer MZA erfolgt entsprechend der im Betrachtungsjahr betriebenen Prozesse zu gleichen Anteilen.

Für die Zuordnung der belegungsabhängigen Bestandteile der Aufwendungen wurden außerdem vier verschiedene Allokationsansätze, orientiert an der *Anzahl der betriebenen Prozesse*, der *Anzahl der Batchansätze*, der *Belegungshäufigkeit der TAn* sowie der *Belegungsdauer*, anhand einer Stichprobe von 15 Produktionsprozessen untersucht und verglichen. Die Ergebnisse zeigen, dass der Detaillierungsgrad der Belegungshäufigkeit bei Akzeptanz einer max. Abweichung zum höchsten Detaillierungsgrad von 30 % die Zuordnung hinreichend genau beschreibt. Bis zu diesem Detaillierungsgrad können die Daten aus der Belegungsplanung herangezogen und der Aufwand für die Datenerfassung in vertretbaren Grenzen gehalten werden. Der für den höchsten hier untersuchten Detaillierungsgrad *Erfassung der Belegungsdauer* verbundenen Daten- und Arbeitsaufwand ist hingegen deutlich umfangreicher und in der Anwendung im Unternehmen vermutlich schwer handhabbar.

Die Anwendung sowohl der Modellierung als auch die Aufschlüsselung der Anlagenaufwendungen wurde an einem Beispielprozess aus dem Umfeld der Spezialchemie der Fa. Merck KGaA, Standort Darmstadt, Deutschland, demonstriert. Die Bewertung erfolgte in 18 WK mittels der Charakterisierungsmodelle der ReCiPe 2008 Methode. Eine Schwerpunktanalyse zeigt, dass die Einflüsse der einzelnen Input- und Outputklassen in Abhängigkeit von der betrachteten WK unterschiedlich groß sind, da die Umweltproblemfelder unterschiedliche Schwerpunkte bei der Bewertung betrachten. Die Ergebnisse zeigen über die WK für den Input Anlage Anteile zwischen 2...86 % und belegen damit die Bedeutung, der durch die Produktionsstätte verursachten potentiellen ökologischen Aufwendungen. Die Inputklasse elektrische Energie verursacht über alle WK im Mittel die geringsten potentiellen ökologischen Auswirkungen. Alle weiteren Klassen (Hilfsstoffe, Betriebsstoffe und Reststoffe) variieren in Abhängigkeit vom Umweltproblemfeld. Der Überblick über die verschiedenen WK weist keine einheitliche Tendenz auf, sodass die Möglichkeit besteht, die Verbesserung in einem einzelnen Umweltproblemfeld auf Kosten eines anderen zu generieren. Die erhaltenen Resultate unterstreichen daher die Forderung der Europäischen Kommission, fest vorgegebene WK bei der Erstellung von Umweltfußabdrücken zu erfassen, da die Wirkungen der Inputs und Outputs in diesen sehr unterschiedlich ausfallen. Aufgrund des Umfangs wurden für die weiterführenden Analysen dieser Arbeit die sechs WK *Klimaänderung (CC)*, *Verbrauch fossiler Ressourcen (FD)*, *Überdüngung Frischwasser (FE)*, *Humantoxizität (HT)*, *Seewasser Ökotoxizität (MET)* und *Natürliche Landumformung (NLT)* betrachtet, u. a. begründet in den unterschiedlichen Schwerpunkten der WK und auch den Ergebnissen der durchgeführten Normierung.

Die Analysen zum Produktionsprozess unterteilen sich in Schwerpunktanalysen und Sensitivitätsstudien. Die Durchführung dieser Betrachtungen basieren auf den unterschiedlichen Prozessdetaillierungsgraden, die mittels des 3-Ebenen-Modells bilanziert werden können. Die Ergebnisse zeigen, dass die Betriebsweise der MZA vor allem durch die umfangreiche Reinigung nach Belegung der einzelnen TAn mit Anteilen zwischen 14...61 % wesentlich zu der ökologischen Performance des Produktionsprozesses beiträgt. Die ökologischen Aufwendungen der Reinigung mittels Standardprotokolle sind vorrangig gekennzeichnet durch den Einsatz von Lösemitteln und damit verbundenem Reststoffaufkommen. Durch eine Anpassung der Protokolle orientiert nach dem Verschmutzungsgrad, in Verbindung mit einer gezielteren Produktionsplanung könnten diese Aufwendungen reduziert werden. Dies führt allerdings im Umkehrschluss zu

einer Reduzierung der Flexibilität, da längere Kampagnen die Reaktionszeit hinsichtlich Marktanfragen erhöhen. Resultierend daraus, erfolgten die weiteren Analysen zum Betrieb der GO bereinigt um die Verbräuche des Rüstens und Reinigens sowie dem Basisbetrieb.

Zum Betrieb der GO erfolgte eine Analyse des Ressourcen- und Energieeinsatzes zunächst mittels Sankey-Diagramms, um den Hilfsstoffeinsatz und das Reststoffaufkommen der einzelnen GO sowie deren Bedarf an Wärmezufuhr und -abfuhr abzubilden. Die darauf aufbauende ökologische Bewertung erfolgte u. a. nach dem Ansatz der Materialflusskostenrechnung (MFKR). Diese repräsentiert einen in der ökonomischen Bewertung genutzten Analysenansatz. Durch die Unterteilung in wertschöpfenden und nicht wertschöpfenden Anteil der Produktion (hier bezogen auf den Betrieb der GO) kann die Sichtweise der Ressourceneffizienz für die ökologische Bewertung des Produktionsprozesses herangezogen und so Einsparpotentiale durch eine verbesserte Ressourcennutzung im Prozess für die verschiedenen WK beziffert werden. Die Übertragung des MFKR Ansatzes auf die ökologische Bewertung ermöglichte eine aussagekräftige Darstellung bzgl. der Einsparpotentiale, bezogen auf die Umweltwirkungen, die aus anfallenden Materialverlusten sowie dem vorrangig aus Lösemitteln bestehenden Reststoffaufkommen resultieren. Basierend auf diesen Ergebnissen erfolgte eine Sensitivitätsstudie zum Lösemittelrecycling mittels dem Freeware Tool ecosolvent. In dieser Studie werden die Verwertungswege *Verbrennung* und *Rückgewinnung mittels Destillation* verglichen und dem Aufwand der Bereitstellung der Lösemittel gegenübergestellt, um die Kompensation von Umweltwirkung in die Studie mit einfließen zu lassen. Die Ergebnisse zeigen, dass das Recycling eine Option darstellt, die ökologische Performance eines Produktionsprozesses zu verbessern. Dies hängt allerdings unmittelbar von der Art und Menge des Lösemittels ab und ist individuell zu prüfen.

Die Ergebnisse der Schwerpunktanalysen zum Betrieb der GO zeigen über alle betrachteten WK für den Prozessabschnitt Chromatographie und anschließender Destillation in Summe die höchsten Ressourcen- bzw. Energieaufwendungen sowie auch ökologische Auswirkungen. Der größte Anteil, der in den WK FE, HT, CC und MET durch die Destillation verursachten Aufwendungen, resultiert aus den anfallenden Reststoffen. Diese sind ursächlich in der vorgelagerten Chromatographie herbeigeführt. Die Aufwendungen, die aus der verfahrenstechnischen Realisierung der Trennung resultieren, werden an die nachfolgende GO weitergereicht. Dieses Phänomen des „Problem Shifting“ zeigt, dass für Analysen von Produktionsprozessen nach dem hier vorgeschlagenen 3-Ebenen-Modell, prinzipiell die verfahrenstechnische Ausführung von vor- und nachgelagerten Grundoperationen in die Betrachtungen eingebunden werden muss. Es sind daher teilweise erweiterte Betrachtungen notwendig, die nicht nur eine einzelne GO sondern die verfahrenstechnische Trennaufgabe im Ganzen einbeziehen.

Die für diese beiden GO durchgeführten detaillierten Betrachtungen auf Basis der Daten aus der Modellenebene 1 zeigen zum einen die stoff- und energiebezogenen Auswirkungen und zum anderen die mit dem Betrieb der Apparate und des in der TAN verbauten Equipments verknüpften ökologischen Aufwendungen. Basierend auf den Daten können verschiedene Kennzahlen ermittelt werden, um sowohl den Betrieb einer GO zu bewerten und mit der verfahrenstechnischen Realisierung einer anderen GO zu vergleichen als auch den Einsatz verschiedener apparativer Lösungen zu betrachten. Die Bilanzdaten, verknüpft mit dem Detaillierungsgrad der ersten Ebene, ermöglichen außerdem die transparente Zuordnung der ökologischen Aufwendungen zu den einzelnen Prozessschritten einer GO. Dies wurde an dieser Stelle nicht gezeigt, bietet aber die Möglichkeit, Einflussfaktoren wie z. B. Betriebsdruck oder das Abfahren von Temperaturrampen mit ökologischen Auswirkungen zu verknüpfen.

Die Analysen belegen, dass die Abbildung und Erfassung der Produktionsprozesse in der Struktur des 3-Ebenen-Modells eine solide Basis bilden, um den Einfluss der verschiedenen verfahrenstechnischen Parameter sowohl in Bezug auf den Prozess, als auch dem um den Prozess herum existierenden Betrieb sowie der vorhandenen Anlage, den Apparaten und der Peripherie auf das Ergebnis einer ökologischen

Prozessbewertung widerzuspiegeln. Der damit erreichte Detaillierungsgrad ermöglicht die Identifizierung und Quantifizierung von Hotspots und Verbesserungsansätzen – sowohl hinsichtlich der Realisierung einzelner Verfahrensaufgaben als auch deren apparativer Umsetzung. Ebenfalls möglich ist in diesem Zusammenhang die Darstellung einzelner Einflussgrößen, wie apparativer, prozesslicher und betrieblicher Aspekte als Basis für weiterführende Untersuchungen im Rahmen der Verfahrensentwicklung und des Prozessdesigns. In Bezug auf die Produktionsanlage sind Aussagen bzgl. der Effizienzeinbußen abschätzbar, die aus der ausrüstungsorientierten Auslegung der Prozesse resultieren. Übergeordnet sind mit der erarbeiteten Methode ökologische Bewertungen von Produktionsprozessen, die in MZA betrieben werden, allumfassend möglich. Sowohl die Anlage als auch die mit diesem Anlagentyp verbundenen zusätzlichen apparativen Aufwendungen über den Lebenszyklus und die Verbräuche, die aus der Anlagengestaltung resultieren, können berücksichtigt werden.

## 6.2 Ausblick

Auf Basis der in dieser Arbeit vorgenommenen Untersuchungen ergeben sich mehrere Anknüpfungspunkte für weiterführende Betrachtungen:

Diese sollten erstens die verschiedenen verfahrenstechnischen Einflüsse auf einen Prozessschritt hinsichtlich apparativer, betrieblicher und prozesslicher Parameter sowie deren Einfluss auf das Ergebnis eines Gesamtprozesses betrachten. Dazu gilt es in einem ersten Schritt die verfahrenstechnischen Größen eines Produktionsprozesses, die sowohl einen deutlichen Einfluss auf den Energie- und Ressourcenbedarf als auch ökologischen Auswirkungen ausüben, zu identifizieren und zu quantifizieren. Anhand von Kombinationen der unterschiedlichen Parameter könnten so Stellschrauben identifiziert werden, die bei der Auslegung von verfahrenstechnischen Lösungen zwingend zu berücksichtigen sind - sowohl den Prozess selbst als auch die apparative Ausführung betreffend. Ziel sollte es sein, eine überschaubare Anzahl an Kennzahlen zu generieren, die eine Aussage hinsichtlich Effizienz bezogen auf den Energie- und Ressourceneinsatz in Verbindung mit Umweltwirkungen zu ermöglichen.

Dieser Sachverhalt, überführt auf verschiedene Apparatetypen und –ausstattungen, erlaubt in einem nächsten Schritt die Entwicklung eines Tools, welches die Möglichkeit bietet, den Einsatz von Apparaten zur Realisierung einer verfahrenstechnischen Grundoperation bereits im Vorfeld zu bewerten. Dazu müsste folgende Datenbasis sichergestellt werden:

- Die Ermittlung des „ökologischen Grundstock“ eines Apparates, unabhängig vom Betrieb – in diesem Zusammenhang der Lebenszyklus ohne die Phase „Produktionsbetrieb“ (siehe Abb. 2.4),
- Empirische Gleichungen in Abhängigkeit vom Apparatetyp, die die identifizierten, betrieblich bedingten, einflussreichsten Prozessparameter abbilden,
- Eine Datenbank zu verschiedenen Betriebsstoffschienen (Wärmeträger, Inertgase, etc.), in der die mit der Bereitstellung bzw. Aufbereitung verbundenen Verbräuche und Aufwendungen hinterlegt sind, wobei in diesem Zusammenhang Freiheitsgrade hinsichtlich individueller Unternehmensstandorte notwendig sind.

Die Anwendung eines solchen Tools bietet insbesondere auch Apparate- und Anlagenbauern die Möglichkeit, ihren Kunden eine Aussage bzgl. der Effizienz und dem ökologischen Fußabdruck ihres Produktes in Abhängigkeit von der jeweiligen Anwendung mitzuliefern.

Einen zweiten Ansatzpunkt stellt die Anwendung des 3-Ebenen-Modells in Verbindung mit den entwickelten Bausteinen im Kontext der Industrie 4.0-Initiative in der stoffwandelnden Industrie dar. Potentiale können z. B. durch die Vernetzung von Produktion, u. a. der Planung und dem Betriebsleitsystem, und dem Zustand des Produktionsprozesses generiert werden. Die Erfassung von sowohl Prozessdaten

(z. B. Temperaturen, Druck oder Füllstände) als auch Verbrauchsdaten (z. B. Volumenströme, Energieaufwendungen), deren Verarbeitung in aussagekräftige Kennzahlen sowie die Rückmeldung zu Stellgrößen im Prozess bilden die Grundlage für ein fortlaufendes, produktionsbegleitendes Monitoring des IST-Zustandes und eines angestrebten, optimierten SOLL-Zustandes. Dazu sind Modelle zu erstellen, die auf Basis von im Produktionsprozess erfassten Daten Eingaben in parametrisierten Bausteinen unterstützen und Kennzahlen generieren, die eine Rückmeldung zum Energie- und Ressourcenverbrauch sowie Umweltwirkungen in verschiedenen Detaillierungsgraden (z. B. einzelne GO, Produktionsprozess oder betriebliche Infrastruktur) geben. Anhand im Vorfeld definierter SOLL-Zustände zu den Produktionsprozessen in der bestehenden Infrastruktur kann ein Abgleich erfolgen. Das Monitoring liefert eine Rückmeldung an den Betrieb wo Anpassungen hinsichtlich der Prozessführung unter Berücksichtigung von apparativen Restriktionen und, bezogen auf MZA, der Belegungsplanung zur optimalen Auslastung der Anlage erfolgen müssen. Die SOLL-Zustände können z. B. die Einhaltung von unternehmerischen Umweltzielen bzw. die Minimierung von potentiellen Umweltwirkungen oder den möglichst minimalen Einsatz von Energie- und Ressourcen umfassen. Weiterführend kann dies in lernende Systeme überführt und so die Produktion stetig im Hinblick auf die SOLL-Zustände verbessert werden. Dies bietet die Chance auch Produktionen in der stoffwandelnden Industrie deutlich effizienter und nachhaltiger durch die dynamische Anpassung an Produktionserfordernisse (z. B. Bestellungen von Kunden oder geforderte Spezifikationsänderungen) zu gestalten.

Als einen weiteren Ansatzpunkt soll an dieser Stelle noch die Quantifizierung von Potentialen bezogen auf Produktionsstrukturen der stoffwandelnden Industrie angedacht werden. Dabei steht die Betrachtung und Bewertung von Produktionsstrukturen, die sowohl den Prozess, die Anlage in einem Produktionsgebäude, die Infrastruktur als auch den Standort repräsentieren, im Fokus. Für die Firmen stellen sich häufig im Hinblick auf die Klimaschutzziele und Unternehmensziele die Fragen: Wie sieht die Umweltperformance der Produktionsprozesse aus? Wo sind die Hebel in den Produktionen um die vorgegebenen und auch selbst gesteckten Umweltziele zu erreichen? Was kann maximal an Einsparungen und Verbesserungen erreicht werden?

Orientiert am Ansatz des 3-Ebenen-Modells sind verschiedene Betrachtungsoptionen denkbar, die die Identifizierung von Verbesserungspotentialen bezogen auf Produktionsstrukturen ermöglichen. Denkbar wären z. B. die nachfolgenden drei aufgeführten Optionen, die sowohl detaillierte Betrachtungen bezogen auf die Produktionsprozesse als auch die Sicht aus der Hubschrauberperspektive bezogen auf die Anlage und den Standort umfassen:

**Option 1** beschreibt den IST-Zustand bezogen auf den Standort, der zur Verfügung stehenden Infrastruktur sowie dem existierenden Gebäude mit Produktionsanlage. Diese Betrachtung umfasst Ansätze zur Prozessverbesserung, wie sie in dieser Arbeit gezeigt wurden. Um hier Potentiale quantifizieren zu können, sind Vergleichsansätze notwendig. Diese könnten zum einen repräsentiert werden durch Produktionsprozesse anderer Standorte oder, soweit verfügbar, durch Prozesse anderer Unternehmen mit gleichem Produktoutput. Zum anderen wäre eine sog. BEST AVAILABLE UNIT denkbar, die die verfahrenstechnisch beste Lösung bei möglichst minimalen Umweltwirkungen unter Berücksichtigung standortabhängiger Faktoren (Infrastruktur, Anlage und Gebäude) repräsentiert.

Der nächst größer gefasste Betrachtungsrahmen in der **Option 2** berücksichtigt zwar den Standort und die dort verfügbare Infrastruktur, lässt allerdings die Anlage und das Gebäude als Freiheitsgrade in der Betrachtung offen. Bezogen auf die Produktion und damit auf die Prozesse, würden bei dieser Betrachtung beinahe alle Freiheitsgrade zur Verfügung stehen, da sowohl Anlage als auch die versorgende Infrastruktur völlig neu gedacht werden können. An dieser Stelle sind eine Vielzahl von Optionen gegeneinander zu Vergleichen, wie z. B. die zentrale gegen eine dezentrale Betriebsstoffversorgung unter Einbindung von regenerativen Energien und Speichern in dem Produktionsgebäude. Ebenfalls offen ist auch die Gestal-

---

tung der Anlage, wie z. B. modular strukturierte MZA mit großer Apparatevielfalt gegen kleine, individuell auf eine Produktfamilie angepasste Mehrproduktanlagen oder kontinuierliche Fertigungen im Mikromaßstab.

Die **Option 3** repräsentiert die sog. „Grüne Wiese“ und lässt eine völlige Neukonzeptionierung zu. Bei dieser Option wird neben der Anlage und dem Gebäude sowie der Infrastruktur, der Produktionsstandort selbst in Frage gestellt.

In der hier entwickelten Struktur des 3-Ebenen-Modells können zu den verschiedenen Optionen, die auf eine Betrachtung und Bewertung von Produktionsstrukturen abzielen, unterschiedliche Szenarien in variierenden Detaillierungsgraden durchgeführt werden. Durch die Möglichkeit, die einzelnen Ebenen als Blackbox zu betrachten, sind die verschiedenen Betrachtungsräume übersichtlich darstellbar und basierend auf Bilanzen von Szenarien (z. B. Jahresproduktionen einzelner Anlagen oder Verbräuche der Infrastruktur eines Standortes bzw. einzelnen Prozesses) vergleichbar und die Auswirkungen z. B. der Option 3 bis auf den einzelnen Prozess bzw. die einzelnen GO im Detail darstellbar.



## 7 Literaturverzeichnis

- [1] M. Scheppe and H. Steinharter, „Hip und Grün – Unternehmen setzen verstärkt auf Nachhaltigkeit: Die Jugend demonstriert gegen den Klimawandel, die Grünen sind im Umfragehoch. Für Deutschlands Firmen wird ein ökologisches Image immer wichtiger.“ *Handelsblatt*, vol. **2019**, 17.08.2019.
- [2] Bundestag, „Gesetz zur Einführung eines Bundes-Klimaschutzgesetzes und zur Änderung weiterer Vorschriften: Bundesgesetzblatt Jahrgang 2019 Teil I Nr. 48,“ 17.12.2019, **2019**.
- [3] A. SPIRE Team, “SPIRE 2050 Vision: Towards the Next Generation of European Process Industries,” [https://www.spire2030.eu/sites/default/files/users/user85/Vision\\_Document\\_V6\\_Pages\\_Online\\_0.pdf](https://www.spire2030.eu/sites/default/files/users/user85/Vision_Document_V6_Pages_Online_0.pdf). - letzter Zugriff: 09.03.2020
- [4] P. Tello and R. Weerdmeester, “SPIRE ROADMAP,” **2013**, [https://www.spire2030.eu/uploads/Modules/Publications/spire-roadmap\\_december\\_2013\\_ppb.pdf](https://www.spire2030.eu/uploads/Modules/Publications/spire-roadmap_december_2013_ppb.pdf). - letzter Zugriff: 09.03.2020
- [5] Europäische Kommission, „Empfehlung der Kommission vom 9. April 2013 für die Anwendung gemeinsamer Methoden zur Messung und Offenlegung der Umweltleistung von Produkten und Organisationen,“ **2013**, 2013/179/EU.
- [6] Europäische Kommission, „Schaffung eines Binnenmarktes es für grüne Produkte: Erleichterung einer besseren Information über die Umweltleistung von Produkten und Organisationen: Begleitunterlage zur Mitteilung der Kommission an das Europäische Parlament und den Rat,“ 2013b, [http://www.cep.eu/Analysen/COM\\_2013\\_196\\_Gruene\\_Produnkte/Zusammenfassung\\_der\\_Folgenabschaetzung\\_SWD\\_2013\\_112.pdf](http://www.cep.eu/Analysen/COM_2013_196_Gruene_Produnkte/Zusammenfassung_der_Folgenabschaetzung_SWD_2013_112.pdf). - letzter Zugriff: 09.03.2020
- [7] L. Jacquemin, P.-Y. Pontalier, and C. Sablayrolles, “Life cycle assessment (LCA) applied to the process industry: A review,” *The International Journal of Life Cycle Assessment*, vol. 17, no. 8, pp. 1028–1041, **2012**.
- [8] R. Geres, A. Kohn, S. Lenz et al., “Roadmap Chemie 2050: Auf dem Weg zu einer treibhausgasneutralen chemischen Industrie in Deutschland,“ FutureCamp Climate GmbH, DECHEMA Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e. V., **2019**, [https://dechema.de/dechema\\_media/Downloads/Positionspapiere/2019\\_Studie\\_Roadmap\\_Chemie\\_2050-p-20005590.pdf](https://dechema.de/dechema_media/Downloads/Positionspapiere/2019_Studie_Roadmap_Chemie_2050-p-20005590.pdf). - letzter Zugriff: 09.03.2020
- [9] Verband der Chemischen Industrie e.V., „Auf einen Blick Chemische Industrie 2019,“ **2019**, <https://www.vci.de/vci/downloads-vci/publikation/chemische-industrie-auf-einen-blick.pdf>. - letzter Zugriff: 09.03.2020
- [10] Verband der Chemischen Industrie e.V., „Wege in die Zukunft – Weichenstellung für eine nachhaltige Entwicklung in der chemisch-pharmazeutischen Industrie,“ **2019**, <https://www.vci.de/vci/downloads-vci/publikation/2019-10-studie-vci-prognos-wege-in-die-zukunft-fuer-die-chem-pharm-industrie.pdf>. - letzter Zugriff: 09.03.2020
- [11] J. Rauch, *Mehrproduktanlagen*, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, FRG, **1997**.
- [12] W. Klöpffer, “Life cycle assessment: From the beginning to the current state,” *Environmental science and pollution research international*, vol. 4, no. 4, pp. 223–228, **1997**.
- [13] D. Postlethwaite, “Development of Life Cycle Assessment (LCA): The role of SETAC (Society of Environmental Toxicology and Chemistry) and the ‘Code of Practice’,” *Environmental science and pollution research international*, vol. 1, no. 1, pp. 54–55, **1994**.
- [14] Deutsches Institut für Normung e.V., *Umweltmanagement - Ökobilanz - Grundsätze und Rahmenbedingungen: (ISO 14040:2006); deutsche und englische Fassung EN ISO 14040:2009*, Beuth, Berlin, **2009**.
- [15] M. Z. Hauschild, R. K. Rosenbaum, and S. I. Olsen, eds., *Life Cycle Assessment: Theory and Practice*, Springer, Cham, **2018**.



- [16] *Ecoinvent database: [electronic resource]*, Ecoinvent, Zürich, **2013**.
- [17] Umweltbundesamt, „Ökobilanz,” **2018**, <https://www.umweltbundesamt.de/themen/wirtschaftskonsum/produkte/oekobilanz>. - letzter Zugriff: 09.03.2020
- [18] L. M. Hilty and C. Rautenstrauch, „Betriebliche Umweltinformationssysteme (BUIS) – eine Literaturanalyse,” *Informatik-Spektrum*, no. 20, pp. 159–167, **1997**.
- [19] „Großer Fuß auf kleiner Erde? Bilanzieren mit dem Ecological Footprint; Anregungen für eine Welt mit begrenzten Ressourcen,” Deutsche Gesellschaft für Technische Zusammenarbeit (GTZ) GmbH, [http://www.conservation-development.net/Projekte/Nachhaltigkeit/DVD\\_10\\_Footprint/Material/pdf\\_Serie\\_Nachhaltigkeit/10\\_Footprint\\_de.pdf](http://www.conservation-development.net/Projekte/Nachhaltigkeit/DVD_10_Footprint/Material/pdf_Serie_Nachhaltigkeit/10_Footprint_de.pdf). - letzter Zugriff: 09.03.2020
- [20] Global Footprint Network, „Ecological footprint standards 2009,” **2009**, [http://www.footprintnetwork.org/content/images/uploads/Ecological\\_Footprint\\_Standards\\_2009.pdf](http://www.footprintnetwork.org/content/images/uploads/Ecological_Footprint_Standards_2009.pdf). - letzter Zugriff: 09.03.2020
- [21] M. Wackernagel, *Ecological footprint and appropriated carrying capacity: A tool for planning toward sustainability*, Dissertation, The University of British Columbia, **1994**.
- [22] M. Wackernagel and W. E. Rees, *Our ecological footprint: Reducing human impact on the earth*, New Society Publ, Gabriola Island, BC [u.a.], **2007**.
- [23] H. Bruijn, R. Duin, M. A. J. Huijbregts, et al., eds., *Handbook on Life Cycle Assessment: Operational a Guide to the ISO Standards*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, **2004**.
- [24] S. Suh and G. Huppes, „Methods for Life Cycle Inventory of a product,” *Journal of Cleaner Production*, vol. 13, no. 7, pp. 687–697, **2005**.
- [25] S. Suh and G. Huppes, „Missing inventory estimation tool using extended input-output analysis,” *The International Journal of Life Cycle Assessment*, vol. 7, no. 3, pp. 134–140, **2002**.
- [26] Deutsches Institut für Normung e.V., *Umweltmanagement - Ökobilanz - Anforderungen und Anleitungen (ISO 14044:2006): Deutsche und englische Fassung EN ISO 14044:2006 = Environmental management, life cycle assessment - requirements and guidelines (ISO 14044:2006) = Management environnemental, analyse du cycle de vie - exigences et lignes directrices (ISO 14044:2006)*, Beuth, Berlin, **2006**.
- [27] *Greenhouse gas protocol: Product life cycle accounting and reporting standard*, World Resources Institute; World Business Council for Sustainable Development, Washington, DC, Geneva, Switzerland, **2011**.
- [28] Bundesregierung, „Gesetz zur Stärkung der nichtfinanziellen Berichterstattung der Unternehmen in ihren Lage- und Konzernlageberichten,” 11. April 2017, **2017**.
- [29] European Commission, *General guide for Life Cycle Assessment: Provisions and action steps*, Publications Office, Luxembourg, **2010**.
- [30] European Commission, *International Reference Life Cycle Data System (ILCD) Handbook - General guide for Life Cycle Assessment - Detailed guidance*, Publications Office, Luxembourg, **2010**.
- [31] Bundesregierung, „Gesetz über den Handel mit Berechtigungen zur Emission von Treibhausgasen (Treibhausgas-Emissionshandelsgesetz - TEHG),“ 28. Juli 2011, **2011**.
- [32] N. Tangsubkul, K. Parameshwaran, S. Lundie et al., „Environmental life cycle assessment of the microfiltration process,” *Journal of Membrane Science*, vol. 284, 1-2, pp. 214–226, **2006**.
- [33] A. Scipioni, A. Mazzi, M. Niero et al., „LCA to choose among alternative design solutions: The case study of a new Italian incineration line,” *Waste management (New York, N.Y.)*, vol. 29, no. 9, pp. 2462–2474, **2009**.
- [34] D. O'Rourke, L. Connelly, and C. Koshland, „Industrial Ecology: A critical review,” *International Journal of Environment and Pollution*, vol. **1996**, no. 6, pp. 89–112.
- [35] E. Gasafi, L. Meyer, and L. Schebek, „Using Life-Cycle Assessment in Process Design,” *Journal of Industrial Ecology*, vol. 7, 3-4, pp. 75–91, **2003**.
- [36] D. T. Allen and D. R. Shonnard, „Green engineering: Environmentally conscious design of chemical processes and products,” *AIChE Journal*, vol. 47, no. 9, pp. 1906–1910, **2001**.
- [37] D. Kralisch and G. Kreisel, „Assessment of the ecological potential of microreaction technology,” *Chemical Engineering Science*, vol. 62, no. 4, pp. 1094–1100, **2007**.



- [38] D. Kralisch and G. Kreisel, „Bewertung der ökologischen Potenziale der Mikroverfahrenstechnik,“ *Chemie Ingenieur Technik*, vol. 77, no. 6, pp. 784–791, **2005**.
- [39] A. Amelio, G. Genduso, S. Vreysen et al., „Guidelines based on life cycle assessment for solvent selection during the process design and evaluation of treatment alternatives,“ *Green Chem*, vol. 16, no. 6, pp. 3045–3063, **2014**.
- [40] S. Hellweg, U. Fischer, M. Scheringer et al., „Environmental assessment of chemicals: Methods and application to a case study of organic solvents,“ *Green Chem*, vol. 6, no. 8, pp. 418–427, **2004**.
- [41] L. Grundemann and S. Scholl, „Ecological and Economic Assessment of Micro-/Milli-Continuous Campaign Manufacturing: The Case of Writing Ink,“ *Processes*, vol. 2, no. 1, pp. 238–264, **2014**.
- [42] A. Paschetag, M. Wesche, H. Nieder et al., „Integration of Ecological Aspects During Process Development and Design – A Case Study of Batch to Continuous Production,“ *Procedia CIRP*, vol. 48, pp. 532–537, **2016**.
- [43] E. Peschel, A. Paschetag, M. Wesche et al., „Identification of potentials for improvement in paint production process through Material Flow Cost Accounting - a step towards sustainability,“ in *Progress in Life Cycle Assessment*, L. Schebek, C. Herrmann, and F. Cerdas, Eds., pp. 89–96, Springer International Publishing, Cham, **2019**.
- [44] D. Gericke, D. Ott, V. G. Matveeva et al., „Green catalysis by nanoparticulate catalysts developed for flow processing? Case study of glucose hydrogenation,“ *RSC Advances*, vol. 5, no. 21, pp. 15898–15908, **2015**.
- [45] J. C. Kuschnerow, M. Wesche, and S. Scholl, „Ökobilanzielle Bewertung des Einsatzes rezyklierter ionischer Flüssigkeiten als Umesterungskatalysatoren,“ *Chemie Ingenieur Technik*, vol. 83, no. 10, pp. 1582–1589, **2011**.
- [46] J. C. Kuschnerow, *Ionische Flüssigkeiten als rezyklierbare Katalysatoren für die Umesterung*, Cuvillier, E. Göttingen, Niedersachs, **2013**.
- [47] Y. Zhang, B. R. Bakshi, and E. S. Demessie, „Life Cycle Assessment of an Ionic Liquid versus Molecular Solvents and Their Applications,“ *Environmental Science & Technology*, vol. 42, no. 5, pp. 1724–1730, **2008**.
- [48] D. Ott, D. Kralisch, and A. Stark, „Perspectives of Ionic Liquids as Environmentally Benign Substitutes for Molecular Solvents,“ in *Handbook of Green Chemistry, Green Solvents, Ionic Liquids*, P. T. Anastas, P. Wasserscheid, and A. Stark, Eds., pp. 315–340, Wiley, Hoboken, **2014**.
- [49] F. Piccinno, R. Hischier, S. Seeger et al., „From laboratory to industrial scale: A scale-up framework for chemical processes in life cycle assessment studies,“ *Journal of Cleaner Production*, vol. 135, pp. 1085–1097, **2016**.
- [50] S. Gavanekar, S. Suh, and A. A. Keller, „The Role of Scale and Technology Maturity in Life Cycle Assessment of Emerging Technologies: A Case Study on Carbon Nanotubes,“ *Journal of Industrial Ecology*, vol. 19, no. 1, pp. 51–60, **2015**.
- [51] C. Capello, S. Hellweg, B. Badertscher et al., „Life-Cycle Inventory of Waste Solvent Distillation: Statistical Analysis of Empirical Data,“ *Environmental Science & Technology*, vol. 39, no. 15, pp. 5885–5892, **2005**.
- [52] D. Ott, D. Kralisch, I. Denčić et al., „Life cycle analysis within pharmaceutical process optimization and intensification: Case study of active pharmaceutical ingredient production,“ *ChemSusChem*, vol. 7, no. 12, pp. 3521–3533, **2014**.
- [53] R. Hischier, S. Hellweg, C. Capello et al., „Establishing Life Cycle Inventories of Chemicals Based on Differing Data Availability,“ *The International Journal of Life Cycle Assessment*, vol. 10, no. 1, pp. 59–67, **2005**.
- [54] A. G. Parvatkar, H. Tunceroglu, J. D. Sherman et al., „Cradle-to-Gate Greenhouse Gas Emissions for Twenty Anesthetic Active Pharmaceutical Ingredients Based on Process Scale-Up and Process Design Calculations,“ *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, vol. 7, no. 7, pp. 6580–6591, **2019**.
- [55] C. Jiménez-González, A. D. Curzons, D. J.C. Constable et al., „Cradle-to-Gate life Cycle Inventory and Assessment of Pharmaceutical Compounds,“ *The International Journal of Life Cycle Assessment*, vol. 9, no. 2, pp. 114–121, **2004**.

- [56] C. Jiménez-González, *Life Cycle Assessment in Pharmaceutical Applications*, Dissertation, North Carolina State University, **2002**.
- [57] G. Wernet, S. Conradt, H. P. Isenring et al., "Life cycle assessment of fine chemical production: A case study of pharmaceutical synthesis," *The International Journal of Life Cycle Assessment*, vol. 15, no. 3, pp. 294–303, **2010**.
- [58] G. van der Vorst, J. Dewulf, W. Aelterman et al., "A systematic evaluation of the resource consumption of active pharmaceutical ingredient production at three different levels," *Environmental Science & Technology*, vol. 45, no. 7, pp. 3040–3046, **2011**.
- [59] G. van der Vorst, J. Dewulf, W. Aelterman et al., "Assessment of the Integral Resource Consumption of Individual Chemical Production Processes in a Multipurpose Pharmaceutical Production Plant: A Complex Task," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 48, no. 11, pp. 5344–5350, **2009**.
- [60] J. Dewulf, M. E. Bösch, B. D. Meester et al., "Cumulative Exergy Extraction from the Natural Environment (CEENE): A comprehensive Life Cycle Impact Assessment method for resource accounting," *Environmental Science & Technology*, vol. 41, no. 24, pp. 8477–8483, **2007**.
- [61] M. Wesche, M. Häberl, M. Kohnke et al., "Ökologische Bewertung von Produktionsprozessen in Mehrproduktbatchesanlagen," *Chemie Ingenieur Technik*, vol. 87, no. 3, pp. 203–215, **2015**.
- [62] H. A. van Kalker, A. L. Blom, F. P. J. T. Rutjes et al., "On the usefulness of life cycle assessment in early chemical methodology development: The case of organophosphorus-catalyzed Appel and Wittig reactions," *Green Chem*, vol. 15, no. 5, p. 1255, **2013**.
- [63] R. Goedecke, *Fluidverfahrenstechnik*, Wiley-VCH, Hoboken, **2008**.
- [64] C. Blickenstorfer, *Analyse des Energieverbrauchs eines Mehrprodukte-Batch-Betriebs: Fallbeispiel Reaktivfarbstoffproduktion*, Zürich, **1999**.
- [65] P. S. Bieler, U. Fischer, and K. Hungerbühler, "Modeling the Energy Consumption of Chemical Batch Plants Top-Down Approach," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 42, no. 24, pp. 6135–6144, **2003**.
- [66] G. Müller, H. Sugiyama, S. Stocker et al., "Reducing Energy Consumption in Pharmaceutical Production Processes: Framework and Case Study," *Journal of Pharmaceutical Innovation*, vol. 9, no. 3, pp. 212–226, **2014**.
- [67] P. S. Bieler, U. Fischer, and K. Hungerbühler, "Modeling the Energy Consumption of Chemical Batch Plants: Bottom-Up Approach," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 43, no. 24, pp. 7785–7795, **2004**.
- [68] C. Pereira, S. Papadokonstantakis, C. Rérat et al., "Industrial Documentation-Based Approach for Modeling the Process Steam Consumption in Chemical Batch Plants," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 52, no. 44, pp. 15635–15647, **2013**.
- [69] C. Pereira, I. Hauner, K. Hungerbühler et al., "Gate-to-Gate Energy Consumption in Chemical Batch Plants: Statistical Models Based on Reaction Synthesis Type," *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, vol. 6, no. 5, pp. 5784–5796, **2018**.
- [70] A. Szűjarto, S. Papadokonstantakis, U. Fischer et al., "Bottom-up Modeling of the Steam Consumption in Multipurpose Chemical Batch Plants Focusing on Identification of the Optimization Potential," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 47, no. 19, pp. 7323–7334, **2008**.
- [71] A. Szűjarto, S. Papadokonstantakis, and K. Hungerbühler, "Model-Based Identification and Analysis of the Energy Saving Potential in Batch Chemical Processes," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 51, no. 34, pp. 11170–11182, **2012**.
- [72] C. Rérat, S. Papadokonstantakis, and K. Hungerbühler, "Estimation and Analysis of Energy Utilities Consumption in Batch Chemical Industry through Thermal Losses Modeling," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 51, no. 31, pp. 10416–10432, **2012**.
- [73] G. Geisler, T. B. Hofstetter, and K. Hungerbühler, "Production of Fine and Speciality Chemicals: Procedure for the Estimation of LCIs," *The International Journal of Life Cycle Assessment*, vol. 9, no. 2, pp. 101–113, **2004**.
- [74] W. Klöpffer and B. Grahl, *Ökobilanz (LCA): Ein Leitfaden für Ausbildung und Beruf*, Wiley-VCH, Weinheim, **2009**.

- [75] J. Ruge and H. Wohlfahrt, *Technologie der Werkstoffe: Herstellung Verarbeitung Einsatz*, Friedr. Vieweg & Sohn Verlag | GWV Fachverlage GmbH Wiesbaden, Wiesbaden, **2007**.
- [76] Wirtschaftsvereinigung, „Fakten zur Stahlindustrie in Deutschland 2016“, **2016**, [http://www.stahl-online.de/wp-content/uploads/2013/12/Fakten\\_Stahlindustrie\\_2016\\_V2.pdf](http://www.stahl-online.de/wp-content/uploads/2013/12/Fakten_Stahlindustrie_2016_V2.pdf). - letzter Zugriff: 09.03.2020
- [77] Stahlinstitut VDEh, <https://www.stahl-online.de/index.php/themen/>. - letzter Zugriff: 09.03.2020
- [78] H. Gräfen, U. Gramberg, E.-M. Horn et al., *Kleine Stahlkunde für den Chemieapparatebau*, VDI-Verl., Düsseldorf, **1978**.
- [79] A. H. Fritz and G. Schulze, *Fertigungstechnik*, Springer, Berlin, **2010**.
- [80] W. König and F. Klocke, *Fertigungsverfahren: Massivumformung*, Springer, Berlin, Heidelberg, **1996**.
- [81] Deutsches Institut für Normung e.V., *Umweltmanagement - Materialflusskostenrechnung - allgemeine Rahmenbedingungen (ISO 14051:2011): Deutsche und englische Fassung EN ISO 14051:2011 = Environmental management - material flow cost accounting - general framework (ISO 14051:2011) = Management environnemental - comptabilité des flux matières - cadre général (ISO 14051:2011)*, Beuth, Berlin, **2011**.
- [82] S. Scholl, „Verfahrenstechnisches Design von Verdampfern. Process Engineering Design of Evaporators,“ *Chemie Ingenieur Technik*, vol. 82, no. 12, pp. 2179–2187, **2010**.
- [83] BAVCI, *Kostenrechnung in der Chemischen Industrie*, Gabler Verlag, Wiesbaden, **1962**.
- [84] K. Sattler and W. Kasper, *Verfahrenstechnische Anlagen: Planung, Bau und Betrieb*, Wiley-VCH, Weinheim, **2000**.
- [85] P. Prinzing, R. Rödl, and D. Aichert, „Investitionskosten-Schätzung für Chemieanlagen,“ *Chemie Ingenieur Technik*, vol. 57, no. 1, pp. 8–14, **1985**.
- [86] W. M. Vatavak, „Updating the CE Plant Cost Index,“ pp. 62–70, **2002**.
- [87] M. Schenk, *Instandhaltung technischer Systeme: Methoden und Werkzeuge zur Gewährleistung eines sicheren und wirtschaftlichen Anlagenbetriebs*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, **2010**.
- [88] Deutsches Institut für Normung e.V., *Grundlagen der Instandhaltung*, Beuth, Berlin, **2012**.
- [89] S. Dolata and K. Noé, „Rückbau von Chemie-Industrieanlagen“, *Chemie Technik*, vol. 45, no. 5, **2016**.
- [90] Chiresa AG, „Kernkompetenzen: Anlagenrückbau und Altlastensanierung,“ **2017**, [http://www.chiresa.ch/k\\_industrieanlagen.php](http://www.chiresa.ch/k_industrieanlagen.php). - letzter Zugriff: 09.03.2020
- [91] S. Lier, D. Wörsdörfer, and M. Grünewald, „Wandlungsfähige Produktionskonzepte: Flexibel, Mobil, Dezentral, Modular, Beschleunigt“, *Chemie Ingenieur Technik*, vol. 87, no. 9, pp. 1147–1158, **2015**.
- [92] Experten Merck KGaA. Personal communication. **2013**.
- [93] H.-J. Althaus, R. Hischer, M. Osses et al., „Life Cycle Inventories of chemicals: Data v2.0 (2007),“ EMPA Dübendorf, **2007**, [https://db.ecoinvent.org/reports/08\\_Chemicals.pdf](https://db.ecoinvent.org/reports/08_Chemicals.pdf). - letzter Zugriff: 09.03.2020
- [94] G. Wernet, C. Mutel, S. Hellweg et al., „The Environmental Importance of Energy Use in Chemical Production,“ *Journal of Industrial Ecology*, vol. 15, no. 1, pp. 96–107, **2011**.
- [95] Sigma-Aldrich Co., „ChemFiles: Enabling Technologies,“ [https://www.sigmaaldrich.com/content/dam/sigma-aldrich/docs/Aldrich/Brochure/al\\_chemfile\\_v5\\_n7.pdf](https://www.sigmaaldrich.com/content/dam/sigma-aldrich/docs/Aldrich/Brochure/al_chemfile_v5_n7.pdf). - letzter Zugriff: 09.03.2020
- [96] O. G. Griffiths, R. E. Owen, J. P. O'Byrne et al., „Using life cycle assessment to measure the environmental performance of catalysts and directing research in the conversion of CO<sub>2</sub> into commodity chemicals: A look at the potential for fuels from ‘thin-air’,“ *RSC Advances*, vol. 3, no. 30, p. 12244, **2013**.
- [97] L. Grundemann, *Zur Umstellung von chargenweise betriebenen Mehrproduktanlagen auf kontinuierliche Kampagnenfertigung*, Cuvillier, Göttingen, **2013**.
- [98] M. Wesche, A. Paschetag, K. Jasch et al., „Estimation of Efficiency Potentials Generated by Innovative Equipment Technologies,“ *ChemBioEng Reviews*, vol. 5, no. 3, pp. 180–191, **2018**.
- [99] S. Suh, „Developing a sectoral environmental database for input–output analysis: The comprehensive environmental data archive of the US,“ *Economic Systems Research*, vol. 17, no. 4, pp. 449–469, **2006**.

- [100]D. Weber and C. Capello, *Ecosolvent*, ETH Zürich, Safety & Environmental Technology Group, **2006**.
- [101]C. Capello, *Environmental Assessment of Waste-Solvent Treatment in the Swiss Chemical Industry*, ETH, **2006**.
- [102]G. Wernet, S. Hellweg, and K. Hungerbühler, *FineChem*, ETH Zurich, **2009**.
- [103]S. Kabelac, ed., *VDI-Wärmeatlas: [Berechnungsunterlagen für Druckverlust, Wärme- und Stoffübergang]*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, **2006**.
- [104]Deutsches Institut für Normung e.V., „Chargenorientierte Fahrweise Teil 1: Modelle und Terminologie,” **2000**, 61512-1:1999.
- [105]W. R. A. Vauck and H. A. Müller, *Grundoperationen chemischer Verfahrenstechnik*, Dt. Verl. für Grundstoffindustrie; Wiley-VCH, Stuttgart, Weinheim, **2000**.
- [106]M. Schmidt and A. Häuslein, *Ökobilanzierung mit Computerunterstützung: Produktbilanzen und betriebliche Bilanzen mit dem Programm Umberto<sup>®</sup>*, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, **1997**.
- [107]ifu und ifeu, *umberto*, ifu Hamburg GmbH und ifeu Heidelberg GmbH, **2011**.
- [108]C. A. Petri, *Kommunikation mit Automaten*, Mathematisches Institut der Universität Bonn, Bonn, **1962**.
- [109]M. Goedkoop and R. Spriensma, *Eco-indicator 99: A damage-oriented method for life cycle impact assessment; methodology report*, Ministerie van Volkshuisvesting Ruimtelijke Ordening en Milieubeheer Centrale Directie Communicatie, Den Haag, **1999**.
- [110]J. B. Guinée and E. Lindeijer, eds., *Handbook on life cycle assessment: Operational guide to the ISO standards*, Kluwer, Dordrecht, **2002**.
- [111]M. Goedkoop, R. Heijungs, M. Huijbregts et al., “ReCiPe 2008: A life cycle impact assessment method which comprises harmonised category indicators at the midpoint and the endpoint level,” **2009**, [http://www.leidenuniv.nl/cml/ssp/publications/recipe\\_characterisation.pdf](http://www.leidenuniv.nl/cml/ssp/publications/recipe_characterisation.pdf). - letzter Zugriff: 09.03.2020
- [112]Deutsches Institut für Normung e.V., „Halbrohrschlangen für chemische Apparate,” **2011**, ICS 71.120.30, no. 28128.
- [113]L. M. Tufvesson, P. Tufvesson, J. M. Woodley et al., “Life cycle assessment in green chemistry: Overview of key parameters and methodological concerns,” *The International Journal of Life Cycle Assessment*, vol. 18, no. 2, pp. 431–444, **2013**.
- [114]Deutsches Institut für Normung e.V., „Rührbehälter - Teil 1: Hauptmaße,” **2005**, ICS 71.120.10, no. 28136.
- [115]R. S. H. Mah, *Chemical process structures and information flows*, Butterworths, Boston, **1990**.
- [116]B. Kögl, F. Moser, and H. Pointner, *Grundlagen der Verfahrenstechnik*, Springer, Wien [u.a.], **1981**.
- [117]G. Schuch and F. J. König, „Erfahrungen mit Mehrproduktanlagen,” *Chemie Ingenieur Technik*, vol. 64, no. 7, pp. 587–593, **1992**.
- [118]A. Mauderli and D.W.T. Rippin, “Scheduling Production In Multi-Purpose Batch Plants: The Batchman Program,” *Chemical Engineering Progress*, no. 76, pp. 37–45, **1980**.
- [119]W. Jänicke, „Computergestützte Apparatebelegung für Mehrzweckanlagen,” *Chemie Ingenieur Technik*, vol. 64, no. 4, pp. 368–370, **1992**.
- [120]S. Fürer, J. Rauch, and F. J. Sanden, „Konzepte und Technologien für Mehrproduktanlagen,” *Chemie Ingenieur Technik*, vol. 68, no. 4, pp. 375–381, **1996**.
- [121]M. J. Realff, N. Shah, and C. C. Pantelides, “Simultaneous design, layout and scheduling of pipeless batch plants,” *Computers & Chemical Engineering*, vol. 20, 6-7, pp. 869–883, **1996**.
- [122]D. Schmalz, *Eine systematische Potentialbewertung für die Einführung neuer Technologien in der Prozessindustrie am Beispiel der Mikroreaktionstechnik*, Shaker, Aachen, **2006**.
- [123]M. Nelißen, M. Kohnke, D. Schmalz et al., *Effizienzsteigerung durch Prozessintensivierung im Multi-Purpose-Umfeld*, Bruchsal, 19. November **2013** (Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgemeinschaft Prozess-, Apparate- und Anlagentechnik (PAAT)).
- [124]G. Gruhn and G. Fichtner, „Untersuchungen der Flexibilität verfahrenstechnischer Systeme,” *Chemische Technik*, vol. 40, no. 12, pp. 505–542, **1988**.



- [125] D. J. Yoo, I.-B. Lee, and J. H. Jung, "Design of Pipeless Chemical Batch Plants with Queueing Networks," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 44, no. 15, pp. 5630–5644, **2005**.
- [126] L. J. Zeballos and C. A. Méndez, "An Integrated CP-Based Approach for Scheduling of Processing and Transport Units in Pipeless Plants," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 49, no. 4, pp. 1799–1811, **2010**.
- [127] S. Hoshino, H. Seki, Y. Naka et al., "Multirobot Coordination for Flexible Batch Manufacturing Systems Experiencing Bottlenecks," *IEEE Transactions on Automation Science and Engineering*, vol. 7, no. 4, pp. 887–901, **2010**.
- [128] Deutsches Institut für Normung e.V., „Druckbehälter aus Stahl, emailliert – Behälter für Anlagen 0,063 m<sup>3</sup> bis 10 m<sup>3</sup>“, **2009**, vol. 71.120.10, no. 28018.
- [129] Deutsches Institut für Normung, „Nahtlose Stahlrohre für Rohrbündel-Wärmeaustauscher - Maße und Werkstoffe“, **2007**, vol. 23.040.10, no. 28180.
- [130] juris, „AfA-Tabelle für den Wirtschaftszweig „Chemische Industrie“: (§ 193ff AO, § 7 Abs 1 EStG),“ Fachportal Steuerrecht, **1995**.
- [131] E. Baumgarten, „Zuverlässigkeit und Instandhaltung,“ *Statistische Hefte*, vol. 3, no. 1, pp. 107–123, **1962**.
- [132] S. Zhang, *Instandhaltung und Anlagenkosten*, Deutscher Universitätsverlag, Wiesbaden, s.l., **1990**.
- [133] J. Wolfbauer and H. Biedermann, „Wirtschaftlichkeitsfragen der Instandhaltung,“ in *Instandhaltungsmanagement: Wirtschaftlichkeitsfragen der Instandhaltung*, H.-J. Warnecke and C.-O. Bauer, Eds., vol. 1, pp. 741–770, Verl. TÜV Rheinland, Köln, **1992**.
- [134] W. Palm, *Die Instandhaltung von Maschinen und maschinellen Anlagen im Industriebetrieb*, R. Fischer, Frankfurt a.M., **1981**.
- [135] W. Becker and F. Brinkmann, *Kostenrechnung für die Instandhaltung: Ergebnisse einer empirischen Untersuchung*, Otto-Friedrich-Univ, Bamberg, **2000**.
- [136] M. März, N. Blechschmidt, and L. Weck, „Projektstudie Chemie und Pharmazie: Wertorientiertes Instandhaltungs- und Asset Management,“ **2014**, <http://www.iquadrat-magazin.de/files/server/henrich/files/6354.pdf>. - letzter Zugriff: 09.03.2020
- [137] Verein Deutscher Ingenieure, „Auswahl und Bildung von Kennzahlen für die Instandhaltung,“ **2006**, vol. 03.080.10, no. 2893.
- [138] H.-G. Krüger, *Anlagenmanagement*, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, **1995**.
- [139] W. Sihn, *Ein Informationssystem für Instandhaltungsleitstellen*, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, **1992**.
- [140] dankl+partner, „Instandhaltungs-Kennzahlen 3,“ [www.delta-q.de/export/sites/default/de/downloads/ih\\_kennzahlen\\_3.pdf](http://www.delta-q.de/export/sites/default/de/downloads/ih_kennzahlen_3.pdf). - letzter Zugriff: 09.03.2020
- [141] M. Schroll, *Instandhaltung mit Kennzahlen professionell managen!*, Duisburg, **2011**, [www.ipih.de/system/files/upload/2011/story/schroll-kennzahlen.pdf](http://www.ipih.de/system/files/upload/2011/story/schroll-kennzahlen.pdf). – letzter Zugriff: 09.03.2020
- [142] H.-J. Warnecke, „Bedeutung der Funktion „Instandhaltung“,“ in *Instandhaltungsmanagement: Wirtschaftlichkeitsfragen der Instandhaltung*, H.-J. Warnecke and C.-O. Bauer, Eds., Band 1, pp. 3–16, Verl. TÜV Rheinland, Köln, **1992**.
- [143] H. Kastner and A. Dankl, *Die optimale Instandhaltungs-Software für Ihr Unternehmen*, Verl. TÜV Rheinland, Köln, **1992**.
- [144] W. Kern, *Industrielle Produktionswirtschaft*, Schäffer-Poeschel, Stuttgart, **1992**.
- [145] W. Männel, „Anforderungen an umfassende Standardsoftware-Lösungen für die Instandhaltung: Wirtschaftliche Bedeutung einer DV-Unterstützung für die Instandhaltung,“ in *Moderne Software-Lösungen für die Instandhaltung*, W. Männel and B. Alterauge, Eds., pp. 3–28, Verl. TÜV Rheinland, Köln, **1990**.
- [146] S. Scholl, M. Wesche, and R. Goedecke, *BMBF Verbundprojekt: „Chemische Prozesse - Verbundprojekt: Innovative Apparate- und Anlagenkonzepte zur Steigerung der Effizienz von Produktionsprozessen (InnovA2)“: Schlussbericht: Berichtszeitraum: 01.01.2011 - 30.09.2014, Teilprojekte A2 und C4*, Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig Institut für Chemische und Thermische Verfahrenstechnik, Braunschweig, **2014**.

- [147] K. Kipke, „Rühren von dünnflüssigen und mittelviskosen Medien,“ *Chemie Ingenieur Technik*, vol. 51, no. 5, pp. 430–436, **1979**.
- [148] M. Thompson, R. J. Ellis, and A. B. Wildavsky, *Cultural theory*, Westview Press, Boulder, Colo., **1990**.
- [149] P. Hofstetter, T. Baumgartner, and R. W. Scholz, “Modelling the valuesphere and the ecosphere: Integrating the decision makers’ perspectives into LCA,” *The International Journal of Life Cycle Assessment*, vol. 5, no. 3, pp. 161–175, **2000**.
- [150] M. Goedkoop, R. Heijungs, M. Huijbregts et al., “ReCiPe 2008: Charakterisation and normalisation factors (update Dec. 2014),” **2014**, <https://sites.google.com/site/lciarecipe/file-cabinet>. - letzter Zugriff: 09.03.2020
- [151] V. Prado, B. A. Wender, and T. P. Seager, “Interpretation of comparative LCAs: External normalization and a method of mutual differences,” *The International Journal of Life Cycle Assessment*, vol. 22, no. 12, pp. 2018–2029, **2017**.
- [152] L. Benini, L. Mancini, S. Sala et al., *Normalization method and data for environmental footprints*, Publications Office, Luxembourg, **2014**.
- [153] R. K. Henderson, C. Jiménez-González, C. Preston et al., “EHS & LCA assessment for 7-ACA synthesis A case study for comparing biocatalytic & chemical synthesis,” *Industrial Biotechnology*, vol. 4, no. 2, pp. 180–192, **2008**.
- [154] R. A. Sheldon, “The E Factor: Fifteen years on,” *Green Chem*, vol. 9, no. 12, p. 1273, **2007**.
- [155] A. Steinbach, R. Winkenbach, and H. Ehmsen, „Materialeffizienz und Nachhaltigkeit in der Chemie: Wo stehen wir heute?“, *Chemie Ingenieur Technik*, vol. 83, no. 3, pp. 295–305, **2011**.
- [156] United Nations, *Industrial development for the 21st century: Sustainable development perspectives*, United Nations, New York, **2007**.
- [157] R. J. Baumgartner, H. Biedermann, and M. Zwainz, *Öko-Effizienz: Konzepte, Anwendungen und Best Practices*, Hampp, München, **2009**.
- [158] A. Mersmann, *Thermische Verfahrenstechnik: Grundlagen und Methoden*, Springer, Berlin, Heidelberg, **1980**.
- [159] A. Jayswal, X. Li, A. Zanzwar et al., “A sustainability root cause analysis methodology and its application,” *Computers & Chemical Engineering*, vol. 35, no. 12, pp. 2786–2798, **2011**.
- [160] Föste, M. Helbig, M. Wesche et al., „Ressourceneffiziente CIP-Reinigung mittels pulsierender Strömung,“ *CIT plus*, vol. **2014**, no. 12, pp. 50–52.
- [161] C. Capello, S. Hellweg, B. Badertscher et al., “Environmental Assessment of Waste-Solvent Treatment Options: Part I: The Ecosolvent Tool,” *Journal of Industrial Ecology*, vol. 11, no. 4, pp. 26–38, **2007**.
- [162] C. Capello, S. Hellweg, and K. Hungerbühler, “Environmental Assessment of Waste-Solvent Treatment Options: Part II: General Rules of Thumb and Specific Recommendations,” *Journal of Industrial Ecology*, vol. 12, no. 1, pp. 111–127, **2008**.
- [163] P. Luis, A. Amelio, S. Vreysen et al., “Life cycle assessment of alternatives for waste-solvent valorization: Batch and continuous distillation vs incineration,” *The International Journal of Life Cycle Assessment*, vol. 18, no. 5, pp. 1048–1061, **2013**.
- [164] S.-C. Lo, H.-W. Ma, and S.-L. Lo, “Quantifying and reducing uncertainty in life cycle assessment using the Bayesian Monte Carlo method,” *The Science of the total environment*, vol. 340, 1-3, pp. 23–33, **2005**.
- [165] G. Koller, D. Weirich, F. Brogli et al., “Ecological and Economic Objective Functions for Screening in Integrated Development of Fine Chemical Processes. 2. Stream Allocation and Case Studies,” *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 37, no. 8, pp. 3408–3413, **1998**.
- [166] M. Krättli, T. Müller-Späth, and M. Morbidelli, “Multifraction separation in countercurrent chromatography (MCSGP),” *Biotechnology and bioengineering*, vol. 110, no. 9, pp. 2436–2444, **2013**.
- [167] A. Biber and E. Heinzle, “Environmental assessment in early process development,” *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*, vol. 79, no. 6, pp. 597–609, **2004**.



- [168] A. D. Curzons, C. Jiménez-González, A. L. Duncan et al., “Fast life cycle assessment of synthetic chemistry (FLASC™) tool,” *The International Journal of Life Cycle Assessment*, vol. 12, no. 4, pp. 272–280, **2007**.
- [169] L. Grundemann, J. C. Kuschnerow, T. Brinkmann et al., “Using Ecological Assessment during the Conceptual Design Phase of Chemical Processes – a Case Study,” in *Glocalized Solutions for Sustainability in Manufacturing: Proceedings of the 18th CIRP International Conference on Life Cycle Engineering, Technische Universität Braunschweig, Braunschweig, Germany, May 2nd - 4th, 2011*, J. Hesselbach and C. Herrmann, Eds., pp. 617–622, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, **2011**.
- [170] A. D. Patel, K. Meesters, H. den Uil et al., “Sustainability assessment of novel chemical processes at early stage: Application to biobased processes,” *Energy & Environmental Science*, vol. 5, no. 9, p. 8430, **2012**.
- [171] Verein Deutscher Ingenieure, *Kumulierter Energieaufwand (KEA): Begriffe, Berechnungsmethoden = Cumulative energy demand (KEA)*, Beuth, Berlin, **2012**.
- [172] S. Solomon, ed., *Climate change 2007: The physical science basis; contribution of Working Group I to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*, UNEP, New York, **2007**.
- [173] W. Wagner, *Wärmeaustauscher*, Vogel Buchverlag, s.l., **2009**.
- [174] D. S. Christen, *Praxiswissen der chemischen Verfahrenstechnik: Handbuch für Chemiker und Verfahreningenieure*, Springer, Berlin, Heidelberg, **2010**.
- [175] Deutsches Institut für Normung e.V., „Rührer und Stromstörer für Rührbehälter; Formen, Benennungen und Hauptmaße,” **1992**, no. 28131.









## A Anhang

### A.1. Ergänzungen zur Modellierung

Die nachfolgende Tabelle zeigt im Überblick die verschiedenen in dem Stoffstromnetzmodellierungstool umberto® v5.6 zur Verfügung stehenden Modellierungssymbole und deren Funktion.

Tab. A1.1: Beschreibung Symbol des Stoffstromnetzmodellierungstools umberto® v5.6

Symbol	Bezeichnung	Beschreibung
	Transition	Umwandlung von Stoffen und Energie, Abbildung von Prozessen
	Stelle	Lager, Eintritt oder Austritt von Stoff- und Energieströmen
	Inputstelle	Eintritt von Stoff- und Energieströmen in das betrachtete System
	Outputstelle	Austritt Stoff- und Energieströme aus dem betrachtetem System
	Connection- stelle	Weiterleitung von Stoff- und Energieströmen zwischen zwei Transitionen
	Subnetz	unterstützen hierachische Strukturierung der Modelle, verbergen detailliertere Darstellungen
	Verbindung (Kanten)	Verknüpfung von Stellen und Transitionen; Richtung Stoff- und Energieströme durch Pfeil gekennzeichnet

### A.2 Ergänzungen zur ökologischen Bewertung

Dieser Abschnitt enthält Ergänzungen und zusätzliche Daten zur ökologischen Bewertung der Mehrzweckanlage und des Produktionsprozesses.

#### A.2.1 Zur ökologischen Bewertungen der in der Mehrzweckanlage (MZA) verbauten Hauptapparate

Die bewerteten Hauptapparate der aufgenommen, belegungsabhängigen TAN sind den fünf Typen Chromatographiesäule, Nutsche, Trockner, RWA und Zentrifuge zugeordnet. In der nachfolgenden Abb. A2.1 sind die Standardabweichungen der durchschnittlichen ökologischen Aufwendungen der TAN innerhalb der jeweiligen Hauptapparatetypen für die 18 Wirkungskategorien der ReCiPe2008-Methode dargestellt.

In der Auswertung wird deutlich, dass die Standardabweichungen für den Hauptapparatetyp RWA in einzelnen WK deutlich höher ausfallen als in anderen. Standardabweichung von < 100 % zeigen die WK *Überdüngung Frischwasser* (FE), *Humantoxizität* (HT), *Überdüngung Salzwasser* (ME), *Ozonabbau* (OD), *Feinstaubbildung* (PMF), *Photochemische Oxidation* (POF), *Terrestrische Versauerung* (TA),

*Terrestrische Ökotoxizität (TET)* und *Verbrauch von Wasser (WD)*. Alle anderen untersuchten TAN-Typen weisen deutlich geringere Abweichungen auf. Dies ist begründet in der hohen Anzahl und sehr unterschiedlichen Ausführung bzgl. des Nennvolumens, der Materialien und der Komplexität dieser TAN.

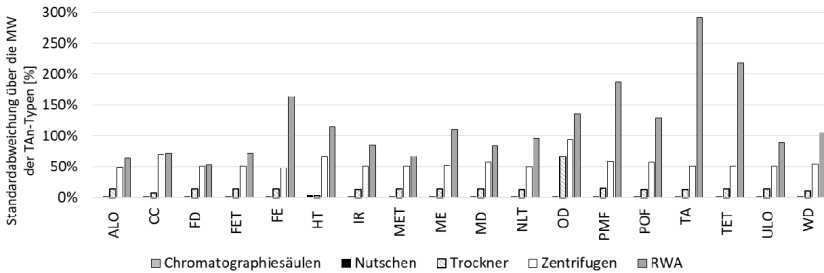


Abb. A2.1 Standardabweichungen zu den ökologischen Aufwendungen der aufgenommenen belegungsabhängigen TAN unterteilt in fünf verschiedene Hauptapparatetypen in den verschiedenen WK im Überblick

Ebenfalls höhere Standardabweichungen weisen die Zentrifugen auf. Bei diesen TAN sind die Nennvolumen der Hauptapparate zwar meist identisch, allerdings sind die Materialien und die Komplexitäten der TAN verschiedenen. Hinzu kommt, dass lediglich vier TAN mit einer Zentrifuge als Hauptapparat erfasst wurden. Die Standardabweichungen zu ökologischen Bewertung sowohl der Chromatographiesäulen als auch der Nutschen sind gleich null bzw. sehr gering. Bei den Chromatographiesäulen ist dies begründet durch die Tatsache, dass in der MZA lediglich vier Hauptapparate dieses Typs existieren und diese außerdem baugleich ausgeführt sind. Ähnliches gilt für die Nutschen, deren TAN durch eine geringe Komplexität und identisches Material gekennzeichnet sind, sodass Abweichungen lediglich aus wenigem zusätzlichem Hauptequipment resultieren. Ein etwas anderes Bild bezogen auf die Standardabweichungen zeigen die TAN mit einem Trockner als Hauptapparat. Diese TAN sind alle gekennzeichnet durch eine hohe Komplexität und mit Sonderwerkstoffen ausgeführt. In diesem Fall resultieren die vor allem in der WK *Ozonabbau (OD)* deutlich erkennbaren Abweichungen aus der unterschiedlichen Anzahl an zusätzlichem Hauptequipment.

## A.2.2 Datenerhebung für die ökologischen Bewertung

### Betriebsstoffe

Für die Bereitstellung der im Prozess benötigten Wärme aus den beiden heißen, primären Temperaturschienen wird zum einen auf das zentrale Dampfnetz und zum anderen auf dezentrale, der MZA zugeordnete Erdgasbrenner zurückgegriffen. Zur Erfassung der Dampfbereitstellung wird der Datensatz *Dampf, für chemische Prozesse (#1988)* herangezogen und nicht der üblicherweise genutzte Datensatz *Nutzwärme (#411)*. Dies ist darin begründet, dass überschlägige Berechnungen in einzelnen Wirkungskategorien anhand der Daten aus dem Betriebsnetz zeigen, dass die Größenordnung der ökologischen Aufwendungen der realen Dampfersorgung sonst deutlich unterschätzt wird. Nicht berücksichtigt in den Betrachtungen ist die Bereitstellung von Dampf durch die thermische Nachverbrennung der Abluft mit Kraft-Wärme-Koppelung (TAR), der neben Strom in das Werksnetz eingespeist werden. Die Abluftlast aus der betrachteten MZA ist produktionsabhängig schwankend. Außerdem sind an dieser TAR zwei MZA angeschlossen. Um hier verwertbare Daten in Bezug auf die Dampfbereitstellung zu erhalten, wäre eine Datenerfassung über einen längeren, nach Rücksprache mit den Verantwortlichen, repräsentativen Zeitraum denkbar, aus denen dann mittlere Werte abgeschätzt werden können. Dies könnte im Nachgang in das erstellte Modell integriert werden. In Bezug auf die Wärmebereitstellung durch den Erdgasbrenner wird der Erd-

gasbedarf über die Verbrennungsrechnung, unter der Annahme einer vollständigen Verbrennung, entsprechend der Erdgaszusammensetzung des externen Anbieters sowie dem mittleren Verbrauch eines Monats ermittelt. Dabei werden sowohl die geographischen Einflussfaktoren, wie Höhenlage, als auch betriebliche Einflüsse, wie der Effektivdruck über dem Zähler, berücksichtigt. Die Vorketten des Erdgases werden über den Datensatz Erdgas, Heliumextraktion (#10077) erfasst.

Die Bereitstellung der im Prozess benötigten Kälteleistung erfolgt für die verschiedenen kalten und tiefkalten Temperaturschienen mittels eines zentralen Rückkühlwasserkreislaufes und dezentral an der MZA aufgestellten Ammoniakverdampfern, die, wie oben beschrieben, an einer zentralen Ammoniakversorgung angeschlossen sind. Zur Erfassung der Aufwendungen zur Aufbereitung der Temperaturschiene mittels Rückkühlwasser werden anhand der gemittelten Stromverbräuche (beispielhaft gezeigt in Abb. A2.2) der im Kreislauf verbauten Pumpen und Ventilatoren im Kühlturm eines Jahres Verbrauchskennzahlen ermittelt, die den Stromverbrauch ins Verhältnis zur Kälteleistung setzt. Eine solche Verbrauchskennzahl wird ebenfalls für die Temperierung der anderen Kaltschiene und der zwei Tiefkaltschienen generiert. Dazu werden die Verbräuche der einzelnen in den Ammoniakverdampfern verbauten Maschinen sowie die Aufwendungen die aus der Kühlung der Verdichter resultieren über das Jahr gemittelt und jeweils in das Verhältnis zur Kälteleistung gesetzt. Die ökologischen Aufwendungen, die aus dem so ermittelten Bedarf an elektrischen Strom resultieren, werden mittels des Datensatzes Strommix, DE (#672) erfasst.

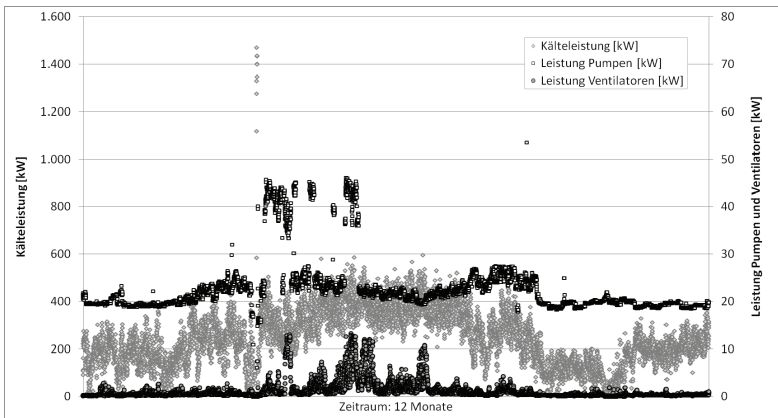


Abb. A2.2: Leistungsaufnahme zur Bereitstellung der Temperaturschiene K(T1)

Des Weiteren sind Betriebsstoffe wie Druckluft (Datensatz, #8198), Stickstoff (Datensatz, #300), VE-Wasser (Datensatz, #7237) und Trinkwasser (Datensatz, #2288) zu berücksichtigen. Die speziell für die Reinigung anfallenden Lösemittel können ebenfalls mittels Datensätzen aus der ecoinvent DB abgedeckt werden. Lediglich ein Reinigungsmittel bedarf der Ermittlung der Vorstufen, um Datensätze aus der DB verwenden zu können. In diesem Fall werden die Aufwendungen zur Herstellung des Reinigungsmittels nicht erfasst, da keinerlei Daten dazu öffentlich verfügbar sind.

### Edukte

Die Erfassung der Edukte erfolgt im Rahmen dieser Bewertung nicht, da die Reaktion und die unmittelbare daran anschließenden GO, die vorrangig die grobe Abtrennung der größten Menge an nicht umgesetzten Edukten und einer Vielzahl von Nebenprodukten realisieren. Zu den Edukten und Nebenprodukten stehen

keine belastbaren Stoffdaten zur Verfügung, sodass eine Ermittlung von ökologischen Aufwendungen dieses Prozessabschnittes zum jetzigen Zeitpunkt nicht möglich ist.

### **Elektrische Energie**

Die Erfassung der ökologischen Aufwendungen, die mit der Bereitstellung des elektrischen Stroms einhergehen, erfolgt mittels des Datensatzes Strommix, DE (#672). Der für die Bewertung relevante Anteil der Stromversorgung erfolgt zum einen auf dem Betriebsgelände mittels der unter Betriebsstoffe beschriebenen TAR und zum anderen durch externe Anbieter. Aufgrund der bereits beschriebenen Einschränkungen bzgl. der zur Verfügung stehenden Daten kann der Anteil der Eigenversorgung aktuell nicht berücksichtigt werden. Auch hier gilt, dass bei Vorliegen der Daten diese in das Modell nachgepflegt werden können.

### **Hilfsstoffe**

Die zum Einsatz kommenden Lösemittel sind sämtlich in der ecoinvent DB vorhanden, sodass die Vorketten mittels der entsprechenden Datensätze erfasst werden können. Für das in der GO Chromatographie eingesetzte Säulenmaterial müssen die Vorstufen ermittelt werden. Dieses stammt aus der betriebseigenen Herstellung, sodass sämtliche benötigte Daten zur Verfügung stehen.

### **Produktionsanlage**

Die Erfassung der ökologischen Aufwendungen, die durch die Bereitstellung und Entsorgung sowie Instandhaltungsmaßnahmen über dem Lebensweg anfallen, erfolgt nach dem in Kapitel 4 vorgestellten Ansatz. Zu den einzelnen TA werden demnach die Hauptequipment mit Materialart und –menge erfasst. Die Materialmassen des Nebenequipments sind rechnerisch unter Nutzung der Komplexitätsfaktoren berücksichtigt, die Materialart orientiert sich dabei an der des Hauptapparates der TA. Die Zuordnung der ökologischen Aufwendungen zu dem hier betrachteten Produktionsprozess erfolgt nach dem Detaillierungsgrad Stufe 3 (Anzahl der Belegung der TA je Batch-Ansatz).

### **Emissionen**

Direkte Emissionen in die Luft, Wasser oder den Boden sind in dem hier betrachten Prozessabschnitt nicht zu berücksichtigen. Die mittels der generischen Datensätzen zur Erfassung der Elementarflüsse auftretenden Emissionen werden nicht separat aufgeführt, sondern direkt den entsprechenden Stoffen, Entsorgungswegen oder Energien zugerechnet.

### **Reststoffe**

In der Klasse der Reststoffe fallen Abfälle in Form von Lösemittel und Feststoffen, sowie Abwasser an. Diese werden IBCs gesammelt und ab einer bestimmten Menge entsprechend den Vorgaben des Betriebes den entsprechenden Entsorgungswegen zugeführt. Für die Beseitigung von Lösemittel wird zur Erfassung der ökologischen Aufwendungen der Datensatz Entsorgung Lösemittelmischung, 16,5 % Wasser, Sonderabfallverbrennung (#2063), für die Beseitigung der Feststoffe der Datensatz Prozessspezifische Sonderabfallverbrennung (#2068) verwendet. In die Beseitigung gehen sämtliche Lösemittel und Feststoffe, die mit dem Produkt in Berührung gekommen sind. Die Behandlung des Abwassers repräsentiert der Datensatz Behandlung Abwasser in Abwasserreinigung, Gr. Kl. 3 (#2277).

## **A.2.3 Betroffene Annahmen bei der Datenerhebung**

Nachfolgend ist die Datenerhebung zu dem betrachteten Produktionsprozess näher erläutert. Diese Beschreibung dient als Ergänzung zu den Angaben in Kapitel A2.2. Ebenfalls kurz beschrieben sind die getroffenen Annahmen, die aufgrund von nicht verfügbaren Daten getroffen wurden.

In den verwendeten Bausteinen sind, wie bereits in Kapitel 3.2 beschrieben, vorrangig Berechnungsvorschriften aus dem VDI-Wärmeatlas [103] hinterlegt, ergänzt um Angaben zu den Apparaten aus den DIN-Normen. Für die Ermittlung der benötigten Mengen an Thermalöl zur Beheizung und Kühlung der RWA werden zusätzlich die Berechnungsvorschriften in Wagner [173] mit herangezogen, um die vorherrschenden apparativen Ausführungen mit Halbrohrschlangen zu berücksichtigen. Ebenfalls integriert wird der Berechnungsansatz von Christen [174], um den Temperaturanstieg des Heizmediums zum Austritt hin bei der Beheizung mit flüssigen Wärmeträgern zu erfassen.

Temperatur- und druckabhängigen Stoffdaten werden über den jeweils betrachteten Einsatzbereich gemittelt. Diese vereinfachte Annahme wurde getroffen, da die entsprechenden Stoffdaten über die Druck- und Temperaturbereiche eine weitestgehend lineare Abhängigkeit aufweisen. Für die produktseitigen Gemische werden die Stoffdaten über Massenanteile gemittelt. Während der Temperierung wird in der RWA von einer idealen Durchmischung ausgegangen. Neben dem eigentlichen Temperiervorgang werden außerdem Verluste an die Umgebung und dem Erwärmen des Behältermaterials, sowie die durch den Rührer eingetragene Energie berücksichtigt. Die zugrunde gelegten Stoffdaten sind dem VDI-Wärmeatlas [103] entnommen.

Der Verbrauch an elektrische Energie in den GO wird vorrangig durch den Betrieb von Rührern, Pumpen, Vakuumpumpen und Verdichtern verursacht. Um die Aufwendungen für die Rührvorgänge zu ermitteln, wird die Leistung des jeweils in dem RWA verbauten Rührorgans in Abhängigkeit von der Drehzahl sowie der Dichte des Produktgemisches berechnet und mit der Laufzeit multipliziert. Die dafür benötigten Geometriedaten stammen, wie in Kapitel 5.2 angegeben, aus der Norm DIN 28131[175] und die Leistungskennzahl  $Ne$  aus Kipke [147]. Angenommen werden ein Wirkungsgrad von 0,9 sowie ein Eintrag der anfallenden Abwärme in das Produktgemisch. Der Energiebedarf der Pumpen wird rechnerisch abgeschätzt mittels Verrechnung der Motorleistung mit der Laufzeit. Dabei werden die Laufzeit der Pumpen im Sekundärkreislauf abhängig von der Dauer der GO und die der Pumpen im Sekundärkreislauf aus umgewälzten Mengen Thermalöl und den Volumenströmen in den Primärkreisläufen ermittelt. Bei den Pumpen wird angenommen, dass diese mit der maximalen Motorleistung bei einem Wirkungsgrad von 0,75 betrieben werden, da Pumpenkennlinien nicht vorlagen. Die Ermittlung des Verbrauchs an elektrischer Energie durch Vakuumpumpen und Verdichter erfolgt entsprechend der Beschreibung zu den entsprechenden Bausteinen in Kapitel 5.2. Dazu wird für den Betrieb der Maschinen ein Wirkungsgrad von 0,2 angenommen.

Die Reinigung der TA basieren auf Standardprotokolle abhängig vom Hauptapparatetyp, die Informationen sowohl zu Reinigungsmittel und Lösemittel als auch Betriebsbedingungen enthalten, und für die Ermittlung der Verbräuche als Basis dienen. Der Produktionsprozess wird in 14 TA betrieben, von denen vier mit einer Chromatographiesäule, vier mit einem Trockner, eine mit einer Nutsche sowie fünf mit einem RWA als Hauptapparat ausgestattet sind. Für den RWA stand nur ein Protokoll für das Nennvolumen von 5,3 m<sup>3</sup> zur Verfügung, sodass nach Rücksprache mit dem Betrieb die Mengen an eingesetzten Löse- und Reinigungsmitteln für andere RWA mit anderem Nennvolumen mittels Dreisatzes rechnerisch ermittelt wurden. Die in dem Reinigungsprotokoll vorgegebenen Betriebsbedingungen gelten unverändert. Es gilt die Annahme, dass eine Reinigung immer nach Nutzung der TA erfolgt. Sollte eine TA für mehrere GO hintereinander genutzt werden, wird erst nach Ende der letzten GO gereinigt, also bevor der nächste Batch gestartet wird. Das Rüsten der TA umfasst für den betrachteten Produktionsprozess das Inertisieren vor dem Befüllen sowohl der Apparate und Leitungen, als auch der Zwischenlagerbehälter (IBC – Intermediated bulk container) die für das Produktgemisch, als auch für Abfälle eingesetzt werden. Für das Inertisieren wird als Inertgas Stickstoff auf einem Druckniveau von 1 barÜ eingesetzt. Zur Ermittlung der Inertgasmenge ist ein dreimaliger Austausch des Behältervolumens angenommen.

Die Betriebsbereitschaft der TA wird durch den sogenannten Basisbetrieb berücksichtigt. Dies umfasst zum einen den Stand-by-Betrieb der Vakuumpumpen bzw. des Vakuumbahnhofs und zum anderen den Betrieb der Gleitringdichtungen sowie die Regelung. Der Bedarf an Regelluft wird im Modell nicht rechnerisch ermittelt, sondern wurde basierend auf den Jahresverbrauch der MZA abgeschätzt. Nach Rücksprache mit dem Betrieb werden je GO 1000 kg auf einem Druckniveau von 6 bar $\bar{U}$  angenommen. Zur Regulierung eines Unterdrucks an den TA sind Vakuumpumpen verbaut bzw. ist ein Anschluss zu einem Vakuumbahnhof vorhanden. Die Verbräuche resultieren aus dem Generieren von Vakuum sowie aus auftretenden Leckagen. Um letzteres zu berücksichtigen, wurden Betriebsdaten zu Leckageraten (LR) gefittet und dieser Fit genutzt, um abhängig von den geforderten Betriebsdrücken die entsprechenden Raten zu ermitteln, siehe Gl. A1.

$$LR = 0,0104 \ln(x) + 0,0365 \quad (\text{Gl. A1})$$

Basierend auf der Leckagerate kann der Energiebedarf der Vakuumpumpe berechnet und die mit dem Betrieb der Vakuumpumpe einhergehenden Bedarf an Kühlleistung, erfasst werden. Die Ermittlung der Verbräuche zur Bereitstellung eines Unterdrucks basieren auf der Evakuierungszeit. Außerdem wird beim Betrieb der Vakuumpumpen berücksichtigt, dass diese bei Nutzung der TA auch ohne das ein Vakuum erzeugt bzw. gehalten werden muss, im Basisbetrieb laufen und damit eine Grundlast existiert. Der damit verbundene Verbrauch an elektrischer Energie sowie der Bedarf an Kühlleistung wird über die Belegungsdauer der TA durch die GO und der Grundlast-Motorleistung berechnet. Für die Ermittlung des Stromverbrauchs wird die von den Herstellern angegebene Motorleistung verwendet bei einem angenommenen Wirkungsgrad von 0,2. Eine Berücksichtigung von Kennlinien erfolgt nicht. Zur Einstellung eines Überdrucks in den Behältern wird Inertgas aus dem Zentralnetz zugeführt, welches auf einem Druckniveau von 10 bar( $\bar{U}$ ) in der Anlage zur Verfügung steht. Auch hier wird neben dem Einstellen des Druckniveaus die Leckagerate über die Zeit berücksichtigt.

Um die Menge an Spül- und Sperrgas für die Gleitringdichtungen zu ermitteln, wird ebenfalls auf Betriebsdaten zurückgegriffen und die Volumenströme, die die Basis zur Berechnung der Gasmengen darstellen, gemittelt. So ergibt sich für das Spülgas ein Volumenstrom von 4,5 NL/min und für das Sperrgas 11,25 NL/min. Der Netzdruck des Gases beträgt 10 bar( $\bar{U}$ ), für die Berechnungen ist eine Umgebungstemperatur von 20 °C angenommen.

## A.2.4 Übersicht über die Wirkungskategorien

Die für die ökologische Bewertung verwendeten Wirkungskategorien sind der ReCiPe2008-Methode entnommen. In der Tab. A.2.1 sind die einzelnen Wirkungskategorien elf Gruppen zugeordnet, die übergeordnet einzelne Umweltthemenfelder benennen. Neben den Einheiten der Referenzstoffe, die die Auswirkungen in den einzelnen Umweltproblemfelder quantifizieren sind für die WK HT, IR, CC, FET, MET, TET und TA Betrachtungshorizonte angegeben. Diese zeigen, wie in Kapitel 5.3 beschrieben, den betrachteten Wirkungszeitraum an und sind in den gewählten Modellen abhängig von der Betrachtungsperspektive (siehe Kulturtheorie). Die in diesen WK angegebenen ökologischen Auswirkungen können andere Zeiträume deutlich abweichen. Ebenfalls in der Tabelle aufgeführt ist eine kurze Beschreibung der Umweltproblemfelder.

## A.2.5 Ergänzungen zu den Ergebnissen der ökologischen Bewertung des Produktionsprozesses

Die nachfolgende Tab. A.2.2 zeigt die Verteilung der ökologischen Aufwendungen des Produktionsprozesses in den WK, zugeordnet zu den verschiedenen Input- und Outputklassen. Sowohl Emissionen als auch Edukte sind hier nicht berücksichtigt. Dies ist begründet, wie in den Kapiteln A.2.2 und A.2.3 beschrieben, in der Datenlage zur Abluft und Reaktion.

Tab. A2.1: Übersicht über die Wirkungskategorien der ReCiPe-Bewertungsmethode und deren Beschreibung

Midpoint Kategorien ReCiPe				Beschreibung	
Gruppe	Bezeichnung	Abkürzung	Einheiten	Betrachtungs-horizont (I)	
Eutrophierung	Überdüngung Frischwasser ( <i>freshwater eutrophication</i> )	FE	kg P-Äq.	-	Eintrag von Nährstoffen und deren Anreicherung in Flüssen und Seen, die das Wachstum der aquatischen Biomasse einschränken.
	Überdüngung Salzwasser ( <i>marine eutrophication</i> )	ME	kg N-Äq.	-	Eintrag von Nährstoffen und deren Anreicherung in Meere und Ozeanen, die das Wachstum der aquatischen Biomasse einschränken.
Feinstaub	Feinstaubbildung ( <i>particulate matter formation</i> )	PMF	kg PM10-Äq.	-	Erfassung der aufgenommenen Feinstaubpartikel die zu Gesundheitsschäden führen.
Humantoxizität	Humantoxizität ( <i>human toxicity</i> )	HT	kg 1,4-DCB-Äq.	100	Auswirkung von Schadstoffen (Umweltexposition, Nahrungs-kette) auf die menschliche Gesundheit.
Ionisierende Strahlung	Ionisierende Strahlung ( <i>ionising radiation</i> )	IR	kg U235-Äq	100	Erfassung der freigesetzten radioaktiv strahlenden Stoffe.
Klimaänderung	Klimaänderung ( <i>Climate change</i> )	CC	kg CO <sub>2</sub> -Äq	20	Verstärkung der Infrarotstrahlung und die daraus resultierende Temperaturerhöhung.
Landnutzung	Landwirtschaftliche Landnutzung ( <i>agricultural land occupation</i> )	ALO	m <sup>2</sup> a	-	Bewertung der durch Landwirtschaft genutzten Fläche
	Natürliche Landumwandlung ( <i>natural land transformation</i> )	NLT	m <sup>2</sup>	-	Bewertung Fläche unter ökol. Gesichtspunkten – z.B. Verringerung Biodiversität, Landerosion, Beeinträchtigung Landschaft, etc.
	Urbane Landnutzung ( <i>urban land occupation</i> )	ULO	m <sup>2</sup> a	-	Bewertung der besetzten städtischen Fläche
Ökotoxizität	Frischwasserökotoxizität ( <i>freshwater ecotoxicity</i> )	FET	kg 1,4-DCB-Äq.	100	Abschätzung Einfluss toxischer Chemikalien auf die Umwelt basierend auf ökol. Langlebigkeit und Akkumulation in der Nahrungskette.
	Seewasserökotoxizität ( <i>marine ecotoxicity</i> )	MET	kg 1,4-DCB-Äq.	100	Abschätzung Einfluss toxischer Chemikalien auf die Umwelt basierend auf ökol. Langlebigkeit und Akkumulation in der Nahrungskette.
	Terrestrische Ökotoxizität ( <i>terrestrial ecotoxicity</i> )	TET	kg 1,4-DCB-Äq.	100	Abschätzung Einfluss toxischer Chemikalien auf die Umwelt basierend auf ökol. Langlebigkeit und Akkumulation in der Nahrungskette.
Ozonabbau	Ozonabbau ( <i>Ozone depletion</i> )	OD	kg CFC-11-Äq.	-	Abschätzung Zerstörung der Ozonschicht (Stratosphäre) durch reaktionsträge, in der Troposphäre nicht abgebaute Schadstoffe
Photochemische Oxidation	Photochemische Oxidation ( <i>photochemical oxidant formation</i> )	POF	kg NMVOC	-	Abschätzung der erhöhten Bildung von Ozon (Sommersmog) infolge Emissionen von Stoffen wie z.B. org. Lösemitteln und Stickoxide.
Verbrauch abiotischer Ressourcen	Verbrauch von Wasser ( <i>water depletion</i> )	WD	m <sup>3</sup>	-	Erfassung der verbrauchten Wassermengen.
	Verbrauch fossiler Rohstoffe ( <i>fossil fuel depletion</i> )	FD	kg Öl-Äq.	-	Erfassung verschiedener fossiler Rohstoffe entsprechend ihrer statistischen Reichweite, gewichtet mit Energiegehalt
	Verbrauch mineralischer Rohstoffe ( <i>mineral resource depletion</i> )	MD	kg Fe-Äq.	-	Erfassung der Reduzierung der Bodenschätze (Metalle)
Versauerung	Terrestrische Versauerung ( <i>terrestrial acidification</i> )	TA	kg SO <sub>2</sub> -Äq	20	Versauerung des Boden aufgrund anorganischer Substanzen (Sulfate, Nitrate, Phosphate,...), die in die Atmosphäre und u.a. als saurer Regen in den Boden gelangen.

Tab. A2.2: Quantifizierung der ökologischen Aufwendungen in den untersuchten WK. Der Anteil der Inputs und Outputs entsprechend der Klassifizierung aus Kapitel 2.3.2 zeigt die prozentuale Beteiligung in den WK.

Wirkungskategorie	Ökologische Aufwendungen	Hilfsstoffe [%]	Betriebsstoffe [%]	Energie, elektr. [%]	Reststoffe [%]	Anlage [%]
PMF [kg PM10-Äq.]	94	39%	28%	5%	10%	19%
FET [kg 1,4-DCB-Äq.]	3.417	4%	8%	5%	67%	17%
HT [kg 1,4-DCB-Äq.]	6.437	21%	53%	3%	14%	9%
IR [kg U235-Äq.]	13.028	25%	38%	24%	7%	6%
CC [kg CO <sub>2</sub> -Äq.]	145.493	24%	24%	8%	37%	8%
ALO [m <sup>2</sup> a]	943	34%	29%	15%	7%	16%
NLT [m <sup>2</sup> ]	28	76%	15%	2%	5%	2%
OD [kg CFC-11-Äq.]	0.081	8%	3%	1%	1%	88%
POF [kg NMVOC]	290	58%	23%	4%	9%	7%
MET [kg 1,4-DCB-Äq.]	1.296	8%	14%	10%	27%	41%
TA [kg SO <sub>2</sub> -Äq.]	255	46%	30%	5%	9%	10%
TET [kg 1,4-DCB-Äq.]	48	9%	5%	1%	83%	2%
ULO [m <sup>2</sup> a]	302	39%	25%	11%	14%	11%
WD [m <sup>2</sup> ]	739	43%	23%	10%	21%	3%
FD [kg Öl-Äq.]	47.718	57%	29%	6%	4%	4%
MD [kg Fe-Äq.]	14.539	8%	4%	0%	2%	86%
FE [kg P-Äq.]	47	15%	34%	27%	17%	6%
ME [kg N-Äq.]	63	32%	30%	10%	19%	9%

Die Verteilung der ökologischen Aufwendungen auf die verschiedenen GO zeigt die Abb. 5.9. Nachfolgend sind die Anteile der Input- und Outputklassen an den ökologischen Aufwendungen der einzelnen GO dargestellt – jeweils normiert auf die Gesamtumweltwirkung.

## A.3 Ergänzungen zu den Prozessanalysen

Nachfolgend werden strukturiert nach den verschiedenen Schwerpunktanalysen und Sensitivitätsstudien Ergänzungen in Bezug auf Daten oder graphischen Auswertungen zu den gezeigten Ergebnissen dargestellt.

### A.3.1 Ergänzungen Schwerpunktanalyse II

Die nachfolgende Tabelle zeigt die Ergebnisse der angewandten MFKR für die ökologische Bewertung zum Energie- und Ressourceneinsatz, siehe Kapitel 5.6.2, für die betrachteten Wirkungskategorien.

Die Daten in Tab. A.2.4 zeigt die mit der Wärmebereitstellung in den Grundoperationen verbundenen Umweltwirkungen in den Wirkungskategorien *Klimaänderung* (CC), *Verbrauch fossiler Ressourcen* (FD) und *Überdüngung Frischwasser* (FE). Nicht in den Daten enthalten sind die mit der Bereitstellung der Wärme verbundenen Umweltauswirkungen, wie z. B. den Bedarf an elektrischer Energie durch die Pumpen in den Primär- und Sekundärkreisläufen. Den Einfluss, der aus der Infrastruktur und Teilanlagengestaltung resultiert, zeigen die Untersuchungen in der Schwerpunktanalyse III, Tab. 5.9 bzw. nachfolgend die Tab. A2.4.



Tab. A2.3: Massenallokation der ökologischen Aufwendungen zu Produktverlust und Produkt im Verlauf des Produktionsprozesses nach dem Ansatz der MFKR [81]

Grund- operationen	CC [kg CO <sub>2</sub> -Äq.]		HT [kg 1,4-DCB-Äq.]		FD [kg Öl-Äq.]		FE [kg P-Äq.]		MET [kg 1,4-DCB-Äq.]		NLT [m <sup>3</sup> ]	
	Produkt	Produkt- verlust	Produkt	Produkt- verlust	Produkt	Produkt- verlust	Produkt	Produkt- verlust	Produkt	Produkt- verlust	Produkt	Produkt- verlust
	EX02	30,12	410,00	0,90	7,04	9,70	16,72	0,01	0,06	0,15	2,66	0,01
DE01	1.852,62	5.703,50	138,57	97,14	1.277,35	214,71	0,50	0,87	5,87	37,06	0,58	0,15
KR01	7.870,95	4.184,40	359,54	71,27	5.686,37	157,52	2,10	0,64	15,64	27,19	1,55	0,11
DE02	7.950,51	584,81	361,07	9,96	5.707,80	22,02	2,17	0,09	16,42	3,80	1,56	0,02
KR02	12.266,22	4.876,92	371,57	80,21	8.698,82	311,42	2,39	0,72	19,00	30,54	1,59	0,13
DE03	14.530,65	2.263,83	460,78	41,65	11.273,89	237,49	3,03	0,36	30,41	14,51	4,97	0,26
CR01	32.790,55	7.369,16	1.251,71	153,76	23.287,41	946,27	7,20	1,20	98,30	44,82	16,22	0,83
DE04	34.382,87	18.115,41	1.279,09	308,53	23.805,51	681,95	8,86	2,76	115,58	117,70	16,38	0,48
KR03	37.523,53	1.222,86	1.398,68	22,16	27.611,14	120,14	9,82	0,20	131,24	7,85	21,18	0,13
TR01	37.624,03	505,65	1.400,41	8,61	27.643,55	19,04	9,92	0,08	132,34	3,29	21,19	0,01
	37.624,03	45.236,55	1.400,41	800,34	27.643,55	2.727,27	9,92	6,99	132,34	289,41	21,19	2,14
	45%	55%	64%	36%	91%	9%	59%	41%	31%	69%	91%	9%

Tab. A2.4: Ökologische Bewertung der in den einzelnen GO aufgewandten Wärmemengen basierend auf den Daten der Sankey-Analyse (Abb. 5.13) und den ermittelten Aufwendungen je MJ Wärmezufuhr und -abfuhr (Tab. 5.7) für die WK CC, FD und FE; Charakterisierungsmodellen der ReCiPe2008-Methode [111]

Klimaänderung CC [kg CO <sub>2</sub> -Äq.]											
T-Niveaus	EX02	DE01	KR01	DE02	KR02	DE03	CR01	DE04	KR03	TR01	Summe
H (T1)	22,83	377,76	135,26	58,29	41,20	337,81	0	0	0	0	973,16
H (T2)	0	0	0	0	0	0	0	126,91	14,97	0,73	142,62
K (T1)	0	50,81	3,82	34,53	0,24	26,47	0	0	0	0	115,87
K (T2)	0	0	0	0	0	0	0	437,33	50,00	12,96	500,29
TK (T1)	0	0	216,55	0	110,18	59,02	0	0	0	0	385,74
TK (T2)	0	0	0	0	0	0	0	37,44	150,46	1,72	189,62
Summe	22,83	428,57	355,63	92,82	151,62	423,30	0	601,68	215,44	15,41	2.307,30
Verbrauch fossiler Ressourcen [kg Öl-Äq.]											
T-Niveaus	EX02	DE01	KR01	DE02	KR02	DE03	CR01	DE04	KR03	TR01	Summe
H (T1)	8,30	137,37	49,19	21,20	14,98	122,84	0	0	0	0	353,88
H (T2)	0	0	0	0	0	0	0	147,38	17,39	0,85	165,62
K (T1)	0	13,00	0,98	8,83	0,06	6,77	0	0	0	0	29,64
K (T2)	0	0	0	0	0	0	0	109,33	12,50	3,24	125,07
TK (T1)	0	0	53,95	0	27,45	14,70	0	0	0	0	96,10
TK (T2)	0	0	0	0	0	0	0	9,27	37,25	0,43	46,95
Summe	8,30	150,37	104,11	30,03	42,49	144,32	0,00	265,99	67,14	4,51	817,25
Überdüngung Frischwasser [kg P-Äq.]											
T-Niveaus	EX02	DE01	KR01	DE02	KR02	DE03	CR01	DE04	KR03	TR01	Summe
H (T1)	0,0004	0,0072	0,0026	0,0011	0,0008	0,0064	0	0	0	0	0,0185
H (T2)	0	0	0	0	0	0	0	0,2005	0,0237	0,0012	0,2253
K (T1)	0	0,3819	0,0287	0,2595	0,0018	0,1990	0	0	0	0	0,8708
K (T2)	0	0	0	0	0	0	0	0,0034	0,0004	0,0001	0,0039
TK (T1)	0	0	0,0967	0,0000	0,0492	0,0264	0	0	0	0	0,1723
TK (T2)	0	0	0	0	0	0	0	0,0424	0,1705	0,0019	0,2148
Summe	0,0004	0,3891	0,1280	0,2606	0,0518	0,2317	0,0000	0,2463	0,1945	0,0032	1,0556

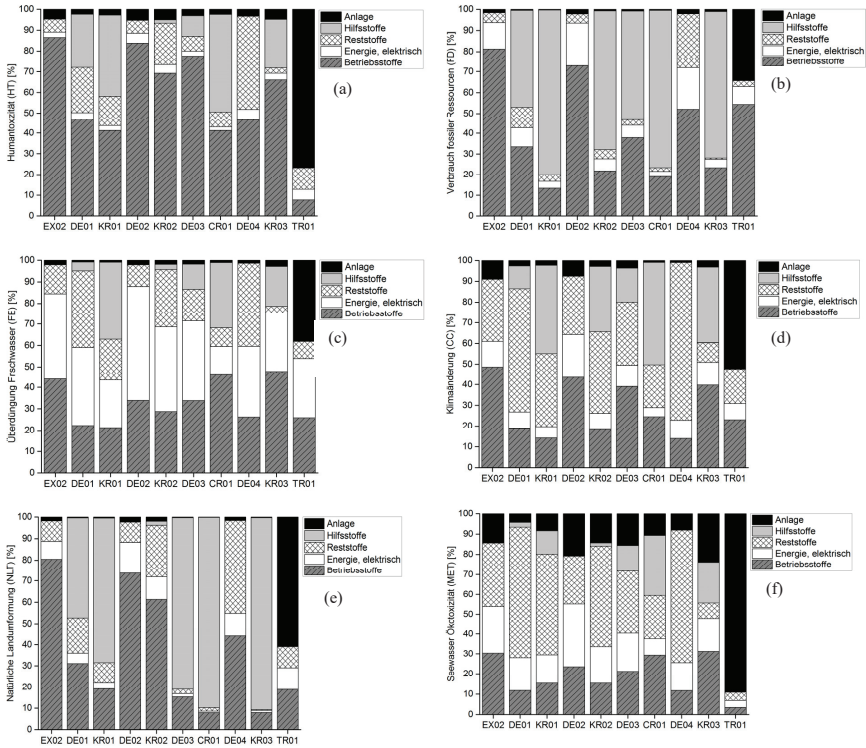


Abb. A2.3: Darstellen der prozentualen Verteilung der ökologischen Aufwendungen des Produktionsprozesses nach den verschiedenen Input- und Outputklassen bezogen auf die einzelnen Grundoperationen in den WK HT (a), FD (b), FE (c), CC (d), NLT (e) und MET (f), Charakterisierungsmodelle der ReCiPe2008-Methode [111]

### A.3.2 Ergänzungen Schwerpunktanalyse III

#### Betrieb der GO

Die nachfolgende Abb. A2.4 stellt die Ergänzung der Schwerpunktanalyse III zur Auswertung der ökologischen Bewertung bezogen auf dem Betrieb der GO für die WK *Seewasser Ökotoxizität* (MET; a, b), *Klimaänderung* (CC; c, d), *Humantoxizität* (HT; e, f) und *Natürliche Landumformung* (NLT; g, h) dar.

Die Daten der Schwerpunktanalyse zeigen, dass die ökologischen Auswirkungen der **Hilfsstoffe** in der GO CR01 am höchsten sind – sowohl in Bezug auf den prozentualen Anteil als auch den Absolutwerten. Die KR01 zeigt in den verschiedenen Umweltproblemfeldern mit Ausnahme der WK MET (a) und NLT (g) den zweithöchsten Absolutwert an. Nur in der WK MET liegt dieser für die KR03 deutlich höher. Der ökologische Aufwand der **Betriebsstoffe**, der für den hier betrachtete Bereich Betrieb der GO beinahe ausschließlich aus den Aufwendungen für die Wiederaufbereitung der verschiedenen Temperaturschienen resultiert, hat auf die Gesamtauswirkungen in den verschiedenen WK mit einem Anteil zwischen 1...5 % nur einen sehr geringen Einfluss. In Bezug auf die einzelnen GO, weisen die EX02, DE02, DE04 und TR01 in der WK FD, siehe Abb. 5.14 (a, b), einen Anteil der Betriebsstoffe von 30 %, 13 %, 19 % und 23 % auf und tragen damit deutlich zu

den ökologischen Aufwendungen dieser GO bei. Ähnliches zeigt sich in der WK NLT (g, h) auch hier wieder für die EX02, DE02, DE04 und TR01 mit Anteilen zwischen 16...33 %. Beide WK zeigen eine große Affinität bzgl. der Hilfsstoffe, deren Einfluss die WK klar dominieren. Daher müssen in diesem Fall die einzelnen GO für sich betrachtet werden, da der hier gezeigte Detaillierungsgrad noch keine Aussagen, vor allem im Hinblick auf mögliche Verbesserungspotentiale die aus dem Betrieb der einzelnen GO resultieren, zulässt. Die Untersuchungen bestätigen allerdings die Vermutung, die bei der Auswertung der GO im Zuge der Bewertung der Grundoperationen des Produktionsprozesses in Kapitel 5.5.2 geäußert wurde.

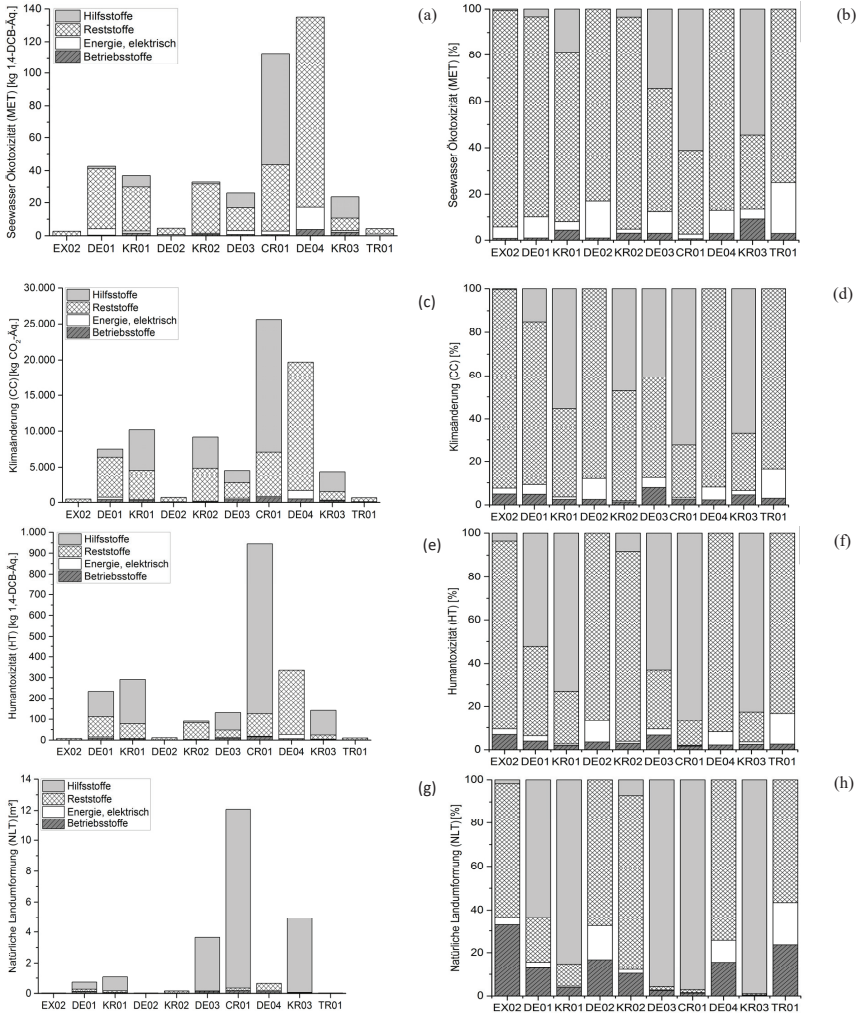


Abb. A3.1: Ökologischen Aufwendungen des Betriebes der GO in den WK MET (a,b), CC (c,d), HT (e,f) und NLT (g, h), bewertet nach Charakterisierungsmodellen der ReCiPe 2008 [111]

Die ökologischen Auswirkungen, die sich aus den Verbräuchen der **elektrischen Energie** ergeben, haben in Bezug auf die Gesamtaufwendungen aller GO in den betrachteten WK mit einem Anteil von 1...6 % eine deutlich untergeordnete Rolle. Lediglich in der WK FE, siehe Abb. 5.14 (c, d), verursacht die elektrische Energie 15 % der Auswirkungen, wobei die GO DE04 mit einem Absolutwert von 1,30 kg P-Äq./Batch den größten Anteil aufweist. Ebenfalls eindeutigen Anteil verzeichnen die GO DE01, DE03 und CR01 mit Werten von 0,37 kg P-Äq./Batch, 0,23 kg P-Äq./Batch sowie 0,21 kg P-Äq./Batch, die allerdings in einem deutlich geringerem Umfang anfallen. Ähnlich wie bei den Betriebsstoffen lässt sich auch beim elektrischen Strom der Einfluss der Hilfsstoffe bzw. der Reststoffe erkennen. So beträgt für die GO TR01 der Anteil des elektrischen Stroms in den WK zwischen 14...22 %. Ähnliches gilt für die Destillationen DE01 und DE03, die in der WK FE, siehe Abb. 5.14 (c, d), einen Anteil für den elektrischen Strom von durchschnittlich 22 % aufweisen sowie der DE02 deren Anteil mit 44 % doppelt so groß ist. Auch in der GO EX02 liegt der Aufwand bei 17 % bezogen auf die Gesamtaufwendungen dieser GO.

In Bezug auf die ökologischen Aufwendungen, die durch den Betrieb der GO verursachten **Reststoffmengen** resultieren, weist die GO DE04 in allen WK mit 57...67 % den größten Anteil auf. Dies resultiert aus der Abtrennung der in der Chromatographie als Elutionsmittel eingesetzten Hilfsstoffe, die an der DE04 aus dem Produktionsprozess ausgeschleust werden (vgl. Abb. 5.11). Signifikante Anteile an den Gesamtaufwendungen sind auch für die GO DE01, KR01, KR02 und CR01 vor allem in den WK HT (e, f), CC (c, d) und MET (a, b) sowie FE (vgl. Abb. 5.14 (c, d)), erkennbar. Die Standardabweichungen der Mittelwerte bzgl. der durch die Reststoffe verursachten ökologischen Aufwendungen, der einzelnen WK in diesen GO liegen in einem Korridor von +/-16...17 % und damit in einer vergleichbaren Größenordnung. Die Absolutwerte liegen dabei in einer Größenordnung von ca. 1/3 der durch die DE04 verursachten Beiträge. In Bezug auf die Reststoffe verursachen die GO EX02, DE02, DE03, KR03 und TR01 vergleichsweise geringe ökologische Aufwendungen. Dies ist zum einen in dem geringen Reststoffaufkommen der GO begründet und zum anderen in der Zusammensetzung dieses Outputs sowie den damit einhergehenden ökologischen Aufwand zur Entsorgung. Über alle betrachteten WK zeigt sich, dass die Reststoffe in den GO EX02, DE02, DE04 und TR01 wesentlich bzw. hauptursächlich zu den gesamtökologischen Auswirkungen der GO beitragen.

### A.3.3 Ergänzungen Sensitivitätsstudie I

Nachfolgend sind in der Tab. A3.1 die Inputs und Outputs des Destillations- und Verbrennungsmodells zur ökologischen Bewertung des Lösemittelrecyclings für die Lösemittel Methanol und Toluol dargestellt.

Tab. A3.1: Inputs und Outputs des Tools ecosolvent für die betrachteten Modelle zum Vergleich des Recyclings mittels Destillation und der Lösemittelverbrennung für 1.100 kg verunreinigten Methanol bzw. Toluol

	Destillationsmodell			Verbrennungsmodell				
	Stoffe/Energien	Methanol	Toluol	Stoffe/Energien	Methanol	Toluol		
INPUT	Lösemittel	kg	1.000,00	1.000,00	Lösemittel	kg	1.000,00	1.000,00
	Organische Verunreinigungen	kg	100,00	100,00	Organische Verunreinigungen	kg	100,00	100,00
	elektrische Energie	kWh	232,91	233,58	elektrische Energie	kWh	315,88	315,99
	Erdgas	Nm <sup>3</sup>	2,83	2,89	Erdgas	Nm <sup>3</sup>	3,57	3,58
	Hilfsstoffe Natriumhydroxid	kg	100,05	100,19	Hilfsstoffe Natriumhydroxid	kg	100,05	100,09
	Salzsäure	kg	5,33	5,31	Salzsäure	kg	8,59	8,59
	anorg. Chemikalien	kg	4,80	4,86	anorg. Chemikalien	kg	6,06	6,07
	leichtes Heizöl	kg	10,13		leichtes Heizöl	kg	101,87	
	Kühlwasser	m <sup>3</sup>	29,94	30,21	Deionisiertes Wasser	kg	9.610,08	12.687,27
	Dampf	kg	1.455,92	1.458,93				
Stickstoff	Nm <sup>3</sup>	1,64	1,58					
OUTPUT	CO <sub>2</sub> -Emissionen	kg	1.240,54	1.640,67	CO <sub>2</sub> -Emissionen	kg	1.826,27	3.478,87
	andere Emissionen	kg	37,54	5,87	andere Emissionen	kg	329,66	9,25
	gewonnener Dampf	kg	4.302,48	5.371,41	gewonnene elektrische Energie	kWh	381,16	623,80
	gewonnene elektrische Energie	kWh	244,76	305,56	gewonnener Dampf	kg	6.700,26	10.965,52
	Recycltes Lösemittel	kg	776,40	780,37				
	Abluftbehandlung	Nm <sup>3</sup>	81,69	81,39				
	Abfallverbrennung	kg	323,60	320,63				





