

Prognose von Umweltauswirkungen bei der Entwicklung chemischer Anlagen

Ein Beitrag zur Ganzheitlichen Bilanzierung

Von der Fakultät Maschinenbau der Universität Stuttgart
zur Erlangung der Würde eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.) genehmigte Abhandlung

vorgelegt von
Thilo Kupfer
aus Gerlingen

Hauptberichter: Prof. Dr.-Ing. P. Eyerer
Mitberichter: Prof. Dr.-Ing. C. Merten

Tag der mündlichen Prüfung: 25.11.2005

Institut für Kunststoffprüfung und Kunststoffkunde
Universität Stuttgart

2005

Inhaltsverzeichnis

Danksagung	3
Kurzfassung	5
Abstract	6
Nomenklatur	7
Glossar	11
1 Einführung	13
1.1 Problemstellung und Zielsetzung	13
1.2 Aufbau der Untersuchung	15
2 Grundlagen und Stand der Technik	17
2.1 Verfahrensentwicklung als Lebensphase eines verfahrenstechnischen Systems	17
2.2 Verfahrensentwicklung als Problemlösungsprozess	19
2.3 Zielformulierung	21
2.4 Synthese von Lösungen.....	21
2.4.1 Verfahrenstechnische Grundoperationen	21
2.4.2 Informationsbeschaffung.....	22
2.5 Analyse.....	24
2.5.1 Technische Analyse.....	24
2.5.2 Ökonomische Analyse.....	27
2.5.3 Ökologische Analyse.....	35
2.6 Bewertung	42
2.6.1 Technische und ökonomische Bewertung.....	43
2.6.2 Ökologische Bewertung	44
2.6.3 Dimensionsübergreifende Bewertung.....	44
3 Kritik bestehender Analysemethoden	46
3.1 Anforderungen an die Analysemethoden	46
3.2 Bewertung bestehender Analysemethoden	48
4 Prognose von Umweltauswirkungen bei der Entwicklung chemischer Anlagen	52
4.1 Wahl des Systemraums	52
4.2 Wahl der funktionellen Einheit	58
4.3 Vorgehen bei Neben- bzw. Koppelprodukten.....	59
4.4 Auswahl der zu prognostizierenden Größen	60
4.5 Auswahl der betrachteten Umweltproblemfelder	62
4.6 Grundoperationen als Ordnungssystem zur Zerlegung der Anlage.....	67
4.6.1 Einführung.....	67
4.6.2 Anpassung des Ordnungssystems	67

4.7	Vorgehen bei der Prognose	71
4.8	Entwicklung von Kennzahlen zur Prognose	75
4.8.1	Einführung.....	75
4.8.2	Entwicklung von Kennzahlen	76
4.8.3	Zeitliche und örtliche Gültigkeit der Kennzahlen	84
4.9	Umsetzung in die Praxis.....	85
4.9.1	Aufbauorganisation	86
4.9.2	Ablauforganisation	86
4.9.3	Ablage von Informationen	87
5	Anwendungsbeispiel.....	88
5.1	Auswahl eines geeigneten Beispiels	88
5.2	Prognose von Umweltauswirkungen im Projekt BIOFOAM	89
5.2.1	Beschreibung des Projektes.....	89
5.2.2	Beschreibung des betrachteten Polymerisationsverfahrens	89
5.2.3	Prognose der Umweltauswirkungen des Polymerisationsverfahrens.....	92
5.2.4	Fehlerbetrachtung.....	98
5.3	Entwicklungsbegleitende Entscheidungsunterstützung im Projekt BIOFOAM	99
5.3.1	Ökologische Analyse.....	100
5.3.2	Ökonomische Analyse.....	102
5.3.3	Schlussfolgerungen	104
6	Diskussion und Ausblick.....	106
6.1	Diskussion	106
6.2	Ausblick	108
	Literatur.....	112
	Anhang	123
	Anhang A: Dokumentation der Datengrundlage des Projektes BIOFOAM	123
	Anhang B: Ökonomische Prognose im Projekt BIOFOAM	127
	Anhang C: Verfahren, die den Regressionen zugrunde liegen	130

Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter in der Abteilung „Ganzheitliche Bilanzierung“ am Institut für Kunststoffprüfung und Kunststoffkunde IKP an der Universität Stuttgart.

Dem Institutsleiter, Herrn Prof. Eyerer, danke ich für die Übernahme des Erstgutachtens und für die akademische Freiheit bei der Durchführung dieser Arbeit.

Herrn Prof. Merten danke ich für das der Arbeit entgegengebrachte Interesse und die Übernahme des Zweitgutachtens.

Die Anregung für die Auswahl des Themas dieser Arbeit und das durchgeführte Beispiel entstammen dem von der EU geförderten Projekt BIOFOAM. Allen am Projekt Beteiligten gilt mein Dank für die ertragreiche und erfreuliche Zusammenarbeit.

Die Anregungen und Diskussionen meiner Kollegen und Ex-Kollegen aus dem IKP haben diese Arbeit bereichert. Besonderer Dank gilt dabei Dr.-Ing. Martin Baitz, Prof. Dr.-Ing. Bernhard Möglinger und Dipl.-Ing. Anna Braune, die sich bei der Ausarbeitung besonders um mich bemüht haben.

Meinen Freunden Steffen, Holger, Henß, Chuck, 8er und Armin, sowie meiner Freundin Montserrat und meinen Eltern danke ich für die Bodenhaftung, die zur Durchführung einer wissenschaftlichen Arbeit unerlässlich ist.

Gerlingen, im Dezember 2004

Thilo Kupfer



Die BIOFOAM Projektgruppe



... und die Abteilung GaBi am IKP

„Zwischen Personen dienen Gefühle und Visionen der Orientierung.
Zahlen und Fakten können lediglich Entscheidungshilfen sein.“

H. Hubeny, in [41]

Kurzfassung

Auf der Basis von Methoden zur Prognose von ökonomischen Auswirkungen chemischer Anlagen, der Methodik der Ökobilanzierung und der verfahrenstechnischen Grundoperationen wird eine Vorgehensweise zur Prognose von ökologischen Auswirkungen in der Vorstudie zur Verfahrensentwicklung bei chemischen Anlagen entwickelt. Sie ist angepasst an den Stand der Verfahrensentwicklung, der durch Informationsmangel und eine hohe Zahl von Lösungsmöglichkeiten gekennzeichnet ist.

Grundlage der Methode ist die Ökobilanz mit ihrer Abfolge von Modellbildung, Sachbilanz, Wirkungsabschätzung und Bewertung. Es werden Stoff- und Energieströme prognostiziert, die direkt in die Wirkungsabschätzung eingehen können. Die prognostizierten Größen sind so für eine Bewertung nach in der Ökobilanz üblicherweise verwendeten Methoden geeignet. Der hohe Datenbedarf als Schwäche der Ökobilanz für den Einsatz in frühen Phasen der Verfahrensentwicklung wird durch den Einsatz von Kennzahlenmethoden vermindert.

Systemraum der Prognose ist das betrachtete Verfahren. Der Aufwand zur Informationsbeschaffung ist für diesen Systemraum handhabbar. Um die Genauigkeit der Prognose zu erhöhen, wird das Verfahren in seine Grundoperationen unterteilt und diese werden einzeln prognostiziert. Dazu wird ein Ordnungssystem der Grundoperationen verwendet, das innerhalb der Hauptgruppen die Grundoperationen anhand des Aggregatzustandes der eintretenden Stoffe unterscheidet. Dieses Ordnungssystem wird entsprechend der Anforderungen der ökologischen Analyse modifiziert, indem chemische Stoffumwandlungen und diffuse Emissionen in die Systematik aufgenommen werden.

Nach einer ökologischen Relevanzanalyse für den Bereich der organischen Grundstoffchemie und der kunststoffherzeugenden Industrie werden Kennzahlen gebildet, die den Arbeitsaufwand zur Erhebung von benötigten Informationen vermindern. Es handelt sich dabei um Kennzahlen für Emissionen von Feststoffen in Luft, diffuse gasförmige Emissionen in Luft und Energiebedarf (thermische Energie und Strom). Abschätzungsrechnungen erleichtern die Bestimmung der ökologischen Relevanz für den Bau der Anlage und die Mitarbeiter.

Die Vorgehensweise bei der ökologischen Prognose wird am Beispiel des Polymerisationsverfahrens für die Herstellung eines aliphatischen Polyesteramid Block-Copolymers in die Praxis umgesetzt. In diesem Beispiel wird nach Expertenschätzung eine Abweichung von $\pm 10\%$ zum prognostizierten Ergebnis erzielt. Dies ist vergleichbar mit der Genauigkeit von ökonomischen Prognosemethoden in der Vorstudie zur Verfahrensentwicklung. Es wird gezeigt, dass ökologische und ökonomische Aspekte parallel analysiert und die Ergebnisse zur Entscheidungsunterstützung bezüglich der Wahl des Polymers und der Herstellungsrouten genutzt werden können.

Abstract

Based on methods forecasting economic effects of chemical process plants, the method of Life Cycle Assessment and the concept of unit operations, a procedure to forecast environmental effects in the draft design phase of chemical process development is devised. It is adapted to this phase of process development, which is characterized by lack of information and a high number of possible design solutions.

Basis of the method is Life Cycle Assessment with its succession of steps for modelling, inventory, impact assessment and evaluation. Flows of material and energy are forecasted, that can directly be used for impact assessment. The forecasted flows can thus be used with the methods usually used for evaluation in Life Cycle Assessment. The high need for data, which is a disadvantage associated with the use of Life Cycle Assessment in early design phases, is lowered by using characteristic ratios.

System boundary for the forecast is the considered process. The expenditures for the investigation of data can be handled in this system. To increase the precision of the forecast, the process is divided into unit operations, and each unit operation is estimated separately. For this, a classification system of unit operations is used, that among their main groups systematizes the unit operations by the physical state of the input materials. This classification system is modified according to the needs of the prognosis of environmental effects by taking into account chemical conversions and diffuse emissions.

According to a relevance analysis for the organic bulk chemistry and the polymer producing industry, indicators are developed that reduce the expenses of labour for the collection of needed information. Characteristic ratios are developed for the emission of solid materials into air, diffuse emission of gaseous materials into air and energy needed (thermal and electrical energy). Estimating equations facilitate the determination of the ecological relevance for the building of the process plant and the employees.

The procedure of the ecological forecast is applied to the polymerisation process for the production of an aliphatic poly(ester-amide) block-copolymer. For this example according to expert judgement an exactness of $\pm 10\%$ compared to the forecasted results can be achieved. This is comparable to the exactness of economic forecast methods used in the draft design phase of process development. It is shown, that ecological and economic aspects can be analysed in parallel and used for decision support regarding the choice of polymer and the production route.

Nomenklatur

Abkürzungen

ADP	Abiotischer Ressourcenverbrauch (Abiotic Depletion) in [kg Sb-Äquivalenten]
AETP	Aquatisches Ökotoxizitätspotential (Aquatic Ecotoxicity Potential) in [kg DCB-Äquivalenten]
AP	Versauerungspotential (Acidification Potential) in [kg SO ₂ -Äquivalenten]
DCB	Dichlorbenzol
DfE	Öko-Design (Design for Environment)
EDV	Elektronische Datenverarbeitung
EMAS	Gemeinschaftssystem für das Umweltmanagement und die Umweltbetriebsprüfung (Eco-Management and Audit Scheme)
EP	Überdüngungspotential (Eutrophication Potential) in [kg PO ₄ ³⁻ -Äquivalenten]
EU	Europäische Union
GaBi	Ganzheitliche Bilanzierung / Life Cycle Engineering (LCE)
GaBi 4	Software zur Ganzheitlichen Bilanzierung
GWP	Treibhauspotential (Global Warming Potential) in [kg CO ₂ -Äquivalenten]
HTP	Humantoxizitätspotential (Human Toxicity Potential) in [kg DCB-Äquivalenten]
IKP	Institut für Kunststoffprüfung und Kunststoffkunde, Universität Stuttgart
EN ISO	Europäische Norm
LCA	Ökobilanz (Life Cycle Assessment)
LCI	Ökobilanz-Inventar (Life Cycle Inventory)
ODP	Ozonabbaupotential (Ozone Depletion Potential) in [kg R 11-Äquivalenten]
PEA	Polyesteramid
POCP	Sommersmogpotential (Photochemical Ozone Creation Potential) in [kg C ₂ H ₄ -Äquivalenten]
PTFE	Polytetrafluorethylen
R 11	Trichlorfluormethan CFC ₁₃
RAD	Radioaktive Strahlung (Radioactive Radiation) in [Bq I 129-Äquivalenten]
TETP	Terrestrisches Ökotoxizitätspotential (Terrestrial Ecotoxicity Potential) in [kg DCB-Äquivalenten]
UN	Vereinte Nationen (United Nations)
UVP	Umweltverträglichkeitsprüfung
VOC	Flüchtige Kohlenwasserstoffe (Volatile Organic Compounds)

Chemische Formelzeichen

CH ₄ O	Methanol
C ₂ H ₄	Ethen
C ₂ H ₈ N ₂	Ethandiamin
C ₄ H ₁₀ O ₂	Butandiol
C ₆ H ₁₀ O ₂	Caprolacton
C ₈ H ₁₄ O ₄	Dimethyladipat
[C ₃₀ H ₅₀ N ₂ O ₁₀] _n	Polyesteramid
CO ₂	Kohlendioxid
HCl	Chlorwasserstoff, Salzsäure
H ₂ SO ₄	Schwefelsäure
NaOH	Natriumhydroxid, Natronlauge
PO ₄ ³⁻	Phosphat-Ion
SO ₂	Schwefeldioxid
SF ₆	Schwefelhexafluorid

Griechische Formelzeichen

Δ	Differenz in [-]
ε	Emissionskoeffizient in [-]
ρ	Dichte in [kg/l]
σ	Strahlungskonstante in [kW/m ² ·K ⁴]
Ψ	Kostenkapazitäts-Exponent in [-]

Lateinische Formelzeichen

A	Fläche in [m ²]
c	Konstante in [-]
c _p	Wärmekapazität in [kJ/kg·K]
d	Zahl der Arbeitstage in [d/a]
D	Zahl der Dichtungen pro Grundoperation in [-]
e	Umweltindex in [-]
Ė	Exergiestrom in [kW]
F	Gesamtzahl der unabhängigen Variablen (Freiheitsgrad) in [-]
G	Zahl der unabhängigen Gleichungen in [-]
GO	Zahl der Grundoperationen in [-]
Ĥ	Enthalpiestrom in [kW]
k	Wärmedurchgangskoeffizient in [kW/m ² ·K]
km	Fahrleistung in [km/d]

l	Länge in [m]
L	Leckagerate in [kg/s·m]
m	Massenstrom in [kg/s]
M	Zahl der Mitarbeiter in [-]
n	Molzahl in [kmol]
p	Druck in [bar]
P	Preis in [€]
q	Preisindex in [-]
\dot{Q}	Wärmestrom in [kW]
s	Stromverbrauchskennzahl in [kW·s/kg]
\bar{s}	Stoffvektor
S	Selektivität einer chemischen Reaktion in [-]
\dot{S}	Entropiestrom in [kW/K]
T	Temperatur in [K]
u	Spezifische Umweltauswirkung eines Stoff- bzw. Energiestroms in [Umweltwirkungsäquivalent/kg] bzw. [Umweltwirkungsäquivalent/MJ]
U	Umweltauswirkung eines Stoff- bzw. Energiestroms in [Umweltwirkungsäquivalent]
v	Kraftstoffverbrauch in [l/100 km]
V	Gesamtzahl der Variablen in [-]
w	Massenanteil in [kg/kg _{ges}]
\dot{W}	Mechanische oder elektrische Leistung in [kW]
x	Molanteil in [kmol/kmol _{ges}]
x	Variable in [-]
y	Kostenanteil in [€/€ _{ges}]
Y	Ausbeute einer chemischen Reaktion in [-]

Griechische Indices

α	Input
ω	Output
Φ	Durchschnitt

Lateinische Indices

1	Zur Zeit t = 1
2	Zur Zeit t = 2
d	Direkt
E	Emission

el	Elektrisch
ges	Gesamt
i	Stoff I
ind	Indirekt
i_k	Komponente K im Stoff I
k,i	Stoff K bezogen auf Stoff I
Q	Quelle
R	Reaktion
S	Senke
U	Umgebung
V	Verdampfung

Glossar

Allokation: „Zuordnung der Input- und Outputflüsse eines Moduls auf das untersuchte Produktsystem“ [95], also auf Haupt- und Koppelprodukte eines Verfahrens.

Elementarfluss: „Stoff oder Energie, der bzw. die dem untersuchten System zugeführt wird und der Umwelt ohne vorherige Behandlung durch den Menschen entnommen wurde“ und „Stoff oder Energie, der bzw. die das untersuchte System verlässt und ohne anschließende Behandlung durch den Menschen an die Umwelt abgegeben wird“ [95].

Fluss: Stoffmenge pro Zeit oder Energiemenge pro Zeit, der bzw. die einem Verfahren zugeführt wird (Input) oder der bzw. die von einem Verfahren abgegeben wird (Output) [95]. Ein Fluss wird außerhalb der Ökobilanzierung gewöhnlich als Strom bezeichnet. Beide Begriffe werden hier synonym verwendet.

Funktionelle Einheit: „Quantifizierter Nutzen eines Produktsystems für die Verwendung als Vergleichseinheit in einer Ökobilanzstudie“ [95].

Ganzheitliche Bilanzierung: „Instrumentarium zur Erhebung, Dokumentation und Aufbereitung ökologischer Parameter von Produkten, Verfahren, Systemen oder Dienstleistungen auf der Basis technischer und wirtschaftlicher Pflichtenhefte“ [41].

Grundoperation: „Die Stufen eines [...] Prozesses sind [...] aus einer Vielzahl miteinander stofflich und energetisch vernetzter Einzelschritte zusammengesetzt. Diejenigen Einzelschritte, die eine physikalische, chemische, nukleare oder biologische Stoffänderung bewirken, werden Grundoperationen genannt“ [18]. Eine Unterscheidung von Grundprozess und Grundoperation entfällt durch diese Definition.

Modell: Eine „ideelle Abbildung bestimmter, ausgewählter Eigenschaften eines Originalsystems durch ein System mathematischer Beziehungen“ [18].

Nachhaltigkeit: "Meeting the needs of the present generation without compromising the ability of future generations to meet their needs" [161]. Dieser Satz wird seit der UN-Konferenz in Rio 1992 interpretiert als „Drei-Säulen-Konzept“, bezieht sich also nicht mehr nur vorrangig auf den langfristigen Schutz von Umwelt und Ressourcen, sondern gleichermaßen auf die Verwirklichung sozialer und ökonomischer Ziele [133].

Ökobilanz: „Zusammenstellung und Beurteilung der Input- und Outputflüsse und der potentiellen Umweltwirkungen eines Produktsystems im Verlauf seines Lebensweges“ [95].

Prognose: In Abweichung zum statistischen Prognosebegriff (Errechnen von abhängigen Variablen nach der Festlegung der unabhängigen Anfangsbedingungen) wird der Begriff der Prognose in dieser Arbeit breiter verstanden und beinhaltet in Anlehnung an den Begriff der Kostenprognose auch Elemente der Planung und der Schätzung. Eine Prognose ist damit intentional (es werden Soll-Größen prognostiziert), überschlägig (nach

dem „top-down“-Prinzip, im Unterschied zur detaillierten Ermittlung nach dem „bottom-up“-Prinzip) und beruht auf der Basis von theoretischen Erkenntnissen und Erfahrungswissen.

Sachbilanz: „Bestandteil der Ökobilanz, der die Zusammenstellung und Quantifizierung von Inputs und Outputs eines gegebenen Produktsystems im Verlauf seines Lebensweges umfasst“ [95].

Simulation: „Die Handhabung eines Modells z. B. durch EDV“ [18].

Verfahren: „Beziehungsgefüge zweckgerichteter Wirkungsabläufe, seien sie biologischer, chemischer oder physikalischer Natur“ [18].

Verfahrensentwicklung: Entwicklung eines verfahrenstechnischen Systems, bestehend aus Verfahren und Anlage. „Im Verlauf der Verfahrensentwicklung sollen die Möglichkeiten untersucht werden, eine gewünschte Stoffänderung auf einem neuen, technisch machbaren, wirtschaftlich und industriell auswertbaren Weg zu erreichen“ [18]. Die Definition wird in dieser Arbeit um den Aspekt der Minimierung ökologischer Auswirkungen des Verfahrens erweitert.

Verfahrenstechnische Anlage: „Materielle Hülle“ [18] eines Verfahrens.

Vorstudie: „Die Verfahrensentwicklung kann grob in die drei Konkretisierungsphasen Vorstudie, Hauptstudie und Detailstudien aufgeteilt werden. In der Vorstudie erfolgen die Prüfung der eingesetzten Rohstoffe, die Analyse der möglichen Reaktionswege und der daraus folgenden ökonomischen Konsequenzen, aber auch die experimentelle Machbarkeit der chemischen oder biologischen Reaktion“ [18].

Wirkungsabschätzung: „Bestandteil der Ökobilanz, der dem Erkennen und der Beurteilung der Größe und Bedeutung von potentiellen Umweltwirkungen eines Produktsystems dient“ [95].

1 Einführung

1.1 Problemstellung und Zielsetzung

Die europäische Chemieindustrie ist ein bedeutender Wirtschaftsfaktor der Europäischen Union EU und trägt in hohem Maße zur Umweltbelastung bei. Der Umsatz der europäischen Chemieindustrie liegt bei 519 Milliarden € (2001) [38], der ihr zugeschriebene Ausstoß von Treibhausgasen (als Beispiel für eine Umweltbelastung) liegt bei 60 Millionen t CO₂-Äquivalenten (2001) [40]. Um die Umweltauswirkungen dieser Industrie bei möglichst hoher Wirtschaftsleistung zu minimieren, unternehmen Industrie und Gesetzgeber große Anstrengungen [39][40]. Die Ökologie tritt zunehmend neben die Wirtschaftlichkeit als Kriterium zur Bewertung von technischen Systemen und Produkten der chemischen Industrie.

Der günstigste Zeitpunkt zur Einbeziehung von Umweltgesichtspunkten ist die Entwicklungsphase der chemischen Anlagen. Abbildung 1.1 zeigt, dass in der Entwicklungsphase ein großer Teil der Kosten bzw. Umweltauswirkungen vorherbestimmt werden. Dabei sind die gestalterischen Möglichkeiten bei der Verfahrensentwicklung in den frühen Phasen besonders hoch, nur wenige Kosten bzw. Umweltauswirkungen sind bereits festgelegt.

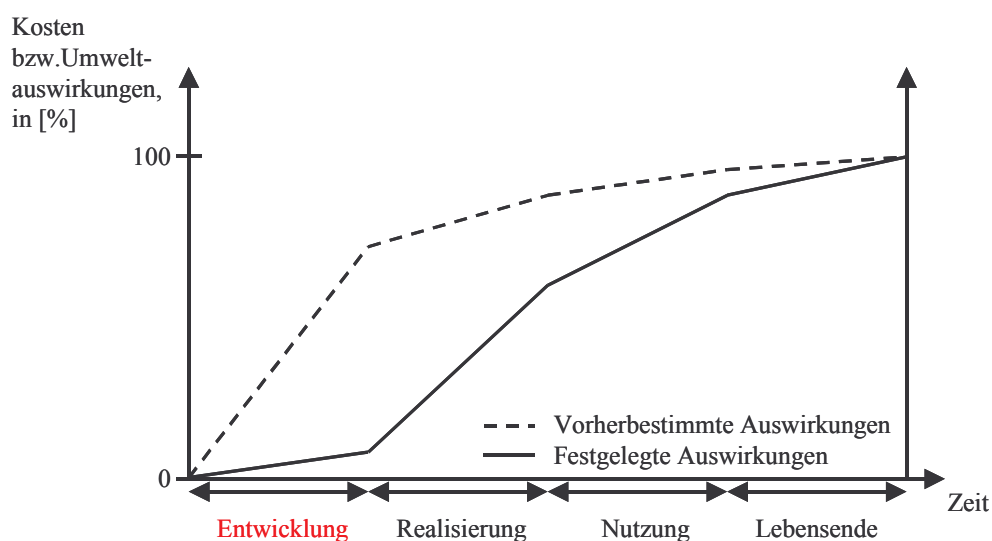


Abbildung 1.1: Prinzipieller Verlauf der Auswirkungen (Kosten und Umweltauswirkungen) von Entscheidungen in Abhängigkeit vom Zeitpunkt der Entscheidung, nach [127]

Die Umweltauswirkungen von chemischen Anlagen sollten folglich möglichst früh bei Verfahrensentwicklungen in die Planung einbezogen werden. In frühen Phasen der Verfahrensentwicklung ist allerdings die Zahl der möglichen Verfahrensrouten und Varianten hoch, unter Informationsmangel müssen die vielversprechendsten Verfahrensvarianten zur weiteren Bearbeitung und Detailplanung ausgewählt werden.

Eine vom Arbeitsaufwand und Informationsbedarf an diese Situation angepasste Vorgehensweise zur Analyse und Bewertung von Verfahrensvarianten wird deshalb benötigt.

Die Ökobilanz ist eine bewährte Methode zur Analyse von Produkten und Systemen. Sie wird gegenwärtig meist bei fertigen Anlagen eingesetzt [136], denn Messwerte über Stoff- und Energieströme der Anlagen liegen erst vor, wenn die Anlagen laufen. Außerhalb breit angelegter Forschungsprojekte wird angestrebt, nur wenige Alternativen zu analysieren, um den Arbeitsaufwand für die Erstellung der Ökobilanzen gering zu halten.

Ziel dieser Arbeit ist es, auf Basis der Ökobilanz eine Vorgehensweise zur Analyse von Umweltauswirkungen chemischer Anlagen zu entwickeln, die den Randbedingungen in frühen Phasen der Verfahrensentwicklung Rechnung trägt. Um eine möglichst rationale und objektive unternehmensinterne Bewertung von Verfahrensvarianten zu ermöglichen, gehen nur quantitativ bestimmbare Informationen in die Analyse und Bewertung ein. Die Schwierigkeiten der Kommunikation der Bewertungsergebnisse an externe Beteiligte wie Behörden, Bevölkerung oder die Medien werden in dieser Arbeit nicht betrachtet.

Um eine möglichst wirtschaftliche Umsetzung der entwickelten Methode sicher zu stellen, werden Synergien zur Analyse der Wirtschaftlichkeit der chemischen Anlagen ausgenutzt. Diese Kostenprognosen werden routinemäßig in frühen Phasen der Verfahrensentwicklung durchgeführt. Anknüpfungspunkte an die Kostenprognose bestehen bezüglich der Prognosemethoden und den zur Verfügung stehenden Informationen über das Verfahren.

Auf der Basis von Methoden zur Prognose der ökonomischen Auswirkungen von chemischen Anlagen, der Methodik der Ökobilanzierung und der verfahrenstechnischen Grundoperationen wird in dieser Arbeit eine Vorgehensweise zur Prognose von ökologischen Auswirkungen in der Vorstudie zur Verfahrensentwicklung bei chemischen Anlagen entwickelt. Der Datenbedarf als Schwäche der Ökobilanz für den Einsatz in frühen Phasen der Verfahrensentwicklung wird durch die Entwicklung von Kennzahlen vermindert.

1.2 Aufbau der Untersuchung

Zunächst wird in Kapitel 2 das Thema dieser Arbeit in den Lebenszyklus eines verfahrenstechnischen Systems (im Unterschied zum Lebenszyklus eines Produktes) eingebunden. Abbildung 1.2 verdeutlicht den Unterschied zwischen den beiden Lebenszyklen. Die Problemstellung dieser Arbeit lässt sich in den Lebensweg eines verfahrenstechnischen Systems in der Entwicklungsphase einordnen, das betrachtete verfahrenstechnische System dient im Lebenszyklus des Produktes zur Produktion.

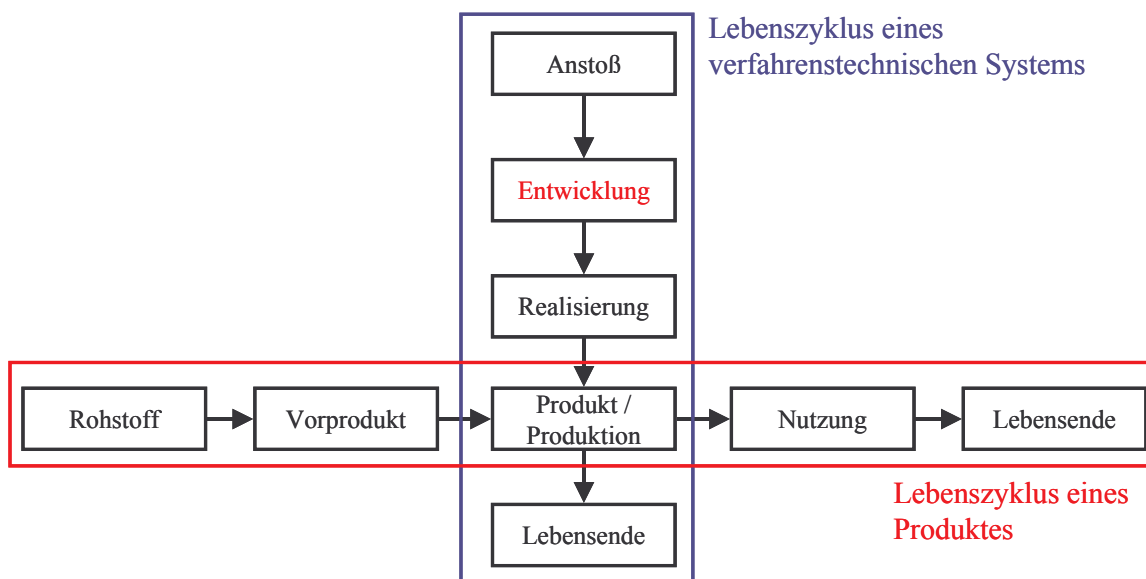


Abbildung 1.2: Flussdiagramm zur Unterscheidung der Lebenszyklen von Produkt und verfahrenstechnischem System

Das weitere Vorgehen in Kapitel 2 folgt dem systemtechnischen Problemlösungszyklus und begreift Verfahrensentwicklung als Abfolge von Zielformulierung, Synthese, Analyse und Bewertung von verschiedenen Lösungsvarianten [24]. Die Analyse steht im Fokus dieser Arbeit. Zielformulierung und Synthese von Lösungen legen die Grundlage für die Informationen, die zur Analyse zur Verfügung stehen und werden deshalb kurz dargestellt. Die Informationen aus der Analyse müssen mit den sich anschließenden Methoden zur Bewertung kompatibel sein, auch die Bewertungsmethoden werden daher kurz dargestellt. Für die Analyse und Bewertung der Lösungsvarianten werden die verschiedenen Dimensionen Technik, Ökonomie und Ökologie unterschieden. Die Struktur des Kapitels 2 folgt dieser Unterscheidung. Eine Untersuchung der Lösungsvarianten auf Nachhaltigkeit würde zusätzlich noch die Analyse und Bewertung der sozialen Dimension beinhalten, diese liegt jedoch nicht im Fokus dieser Arbeit und wird im Ausblick (Kapitel 6.2) angesprochen.

In Kapitel 3 erfolgt die Kritik der vorher vorgestellten Methoden zur Analyse bezüglich ihrer Eignung für die Dimension Ökologie und die Vorstudie der Verfahrensentwicklung. Die Notwendigkeit einer angepassten Vorgehensweise zur Prognose wird verdeutlicht.

In Kapitel 4 schließt sich die Darstellung der Vorgehensweise zur Prognose an. In den Kapiteln 4.1 bis 4.5 werden Systemraum, funktionelle Einheit, Vorgehen bei Neben- bzw. Koppelprodukten und Auswahl der zu prognostizierenden Größen diskutiert. Diese Randbedingungen sind in der Methodik der Ökobilanzierung nicht festgelegt und müssen auf den Einsatz in frühen Phasen der Verfahrensentwicklung in der chemischen Industrie angepasst werden. Kapitel 4.6 zeigt den Einsatz von Grundoperationen als Ordnungssystem zur Zerlegung der Anlage in Module und die Anpassungen, die an bestehenden Ordnungssystemen für die Prognose von Umweltauswirkungen vorgenommen werden müssen. Die zweistufige Vorgehensweise bei der Prognose, die sich aus den vorangegangenen Kapiteln ergibt, wird in Kapitel 4.7 beschrieben. Die anschließend in Kapitel 4.8 entwickelten Kennzahlen zur Prognose sind gültig für den Bereich der organischen Grundstoffchemie und der kunststofferzeugenden Industrie, jeweils Großmengen mit Anlagen zwischen 25.000 t/a und 500.000 t/a. Damit sind Anlagen mit ähnlichen Stoffen im Fokus, die zudem wegen ihrer Größe auch ökologisch relevant sind. Das Kapitel 4.9 stellt Möglichkeiten zur Umsetzung der Vorgehensweise zur Prognose in die Praxis dar.

In Kapitel 5 folgt ein Anwendungsbeispiel aus dem Bereich der kunststofferzeugenden Industrie. Die Umweltauswirkungen der Polymerisation von Polyesteramiden werden prognostiziert und eine Fehlerbetrachtung wird durchgeführt. Ökologische und ökonomische Aspekte werden parallel analysiert und die Ergebnisse zur Entscheidungsunterstützung bezüglich der Wahl des Polymers und der Herstellungsrouten genutzt.

Schließlich werden in Kapitel 6 die Möglichkeiten aber auch die Grenzen der entwickelten Prognose von Umweltauswirkungen diskutiert. Im Ausblick werden Entwicklungen angedeutet, die möglicherweise in den nächsten Jahren in der Analyse bei Verfahrensentwicklungen eingesetzt werden:

- Einbeziehung von Risiken durch Unfälle
- Betrachtung der sozialen Dimension
- Parallele Analyse aller Dimensionen der Nachhaltigkeit in einer Software zur technischen Modellbildung.

2 Grundlagen und Stand der Technik

2.1 Verfahrensentwicklung als Lebensphase eines verfahrenstechnischen Systems

Zur Präzisierung der Problemstellung wird die Prognose von Umweltauswirkungen in den Lebenszyklus eines verfahrenstechnischen Systems eingeordnet. Abbildung 2.1 bietet einen Strukturierungsansatz für die Lebensphasen eines verfahrenstechnischen Systems. Dabei werden der Anstoß, die Entwicklung, die Realisierung, die Nutzung (die Produktion von Gütern) und das Lebensende (Außerdienststellung bzw. Umgestaltung) unterschieden.

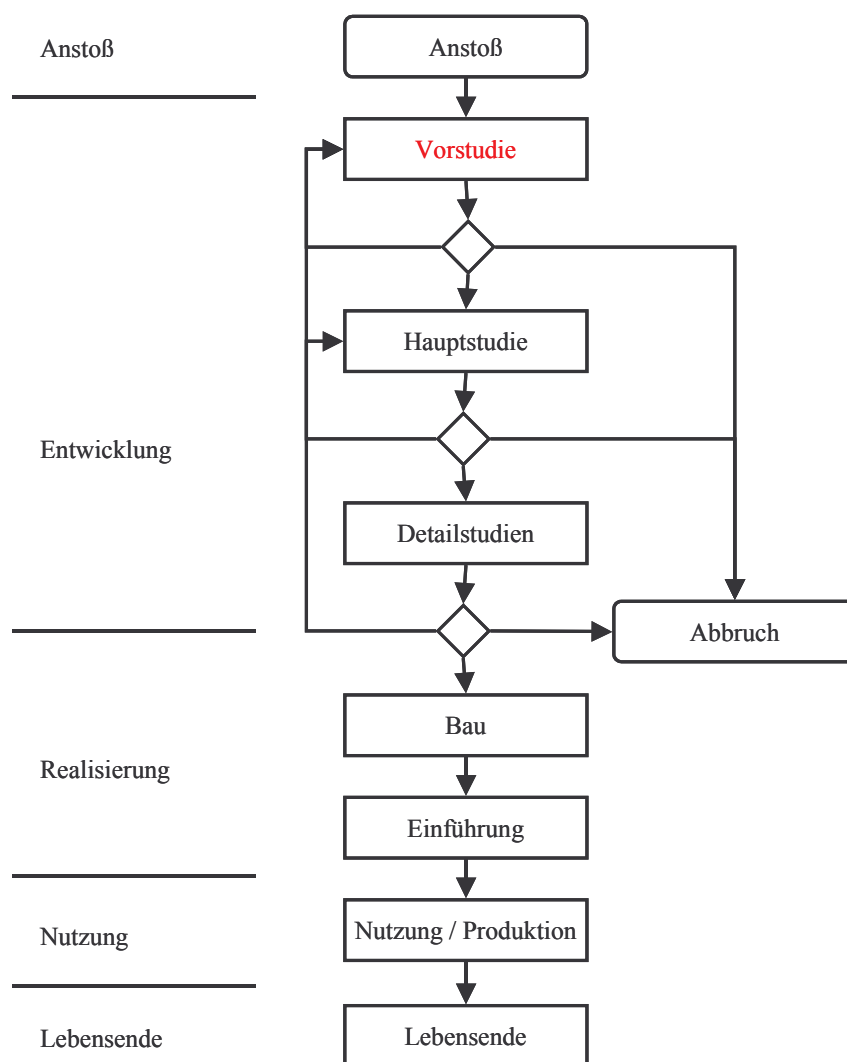


Abbildung 2.1: Flussdiagramm der Lebensphasen eines verfahrenstechnischen Systems, nach [18][100][144]

Die Verfahrensentwicklung kann grob in die drei Konkretisierungsphasen Vorstudie (Konzeptionsphase, concept design, draft design), Hauptstudie (basic design, basic engineering) und Detailstudien (detail design, detail engineering) aufgeteilt werden.

„In der Vorstudie sollen:

- Die Bedürfnisfrage für ein neues System bzw. für die Änderung eines bestehenden Systems geklärt werden,
- Die Systemgrenzen festgelegt werden,
- Die grundsätzlichen Anforderungen festgelegt werden,
- Die grundsätzlichen Lösungsprinzipien und ihre Machbarkeit in technischer, wirtschaftlicher, politischer, sozialer, psychologischer und *ökologischer* Hinsicht geprüft werden,
- Das erfolgversprechendste Lösungsprinzip mit Hilfe *nachprüfbarer Beurteilungskriterien* herausgearbeitet werden.

Der Arbeitsaufwand muss der Lebensphase angepasst sein. Wenig aussichtsreiche Lösungsvarianten sollen bereits verworfen werden, wenn noch kein großer Planungsaufwand entstanden ist, also möglichst schon nach der Vorstudie“ [18].

Die Aufgabenstellung dieser Arbeit beschäftigt sich mit der ökologischen Analyse von Verfahrenskonzepten am Ende der Vorstudie zur Verfahrensentwicklung. Üblicherweise werden Informationen über die jeweiligen Lösungskonzepte in Fließschemata festgehalten, die zeichnerisch den Ablauf, Aufbau und die Funktion einer verfahrenstechnischen Anlage darstellen. Abhängig vom Stand der Verfahrensentwicklung wird zwischen Grundfließschemata, Verfahrenfließschemata und Rohrleitungs- und Instrumentenfließschemata unterschieden. Das Grundfließschema ist die Darstellung des Verfahrens in einfacher Form und wird während der Vorstudie erarbeitet [18].

Verfahrenstechnische Systeme umfassen nach Definition (siehe Glossar) chemische, physikalische, biologische und nukleare Stoffumwandlungen. Um den Rahmen dieser Arbeit nicht zu weit zu fassen und der Vielfalt der Stoffumwandlungsverfahren Rechnung zu tragen, werden im Folgenden nur chemische Anlagen betrachtet. Dies bedeutet das Vorhandensein von mindestens einer chemischen Reaktion zur Stoffumwandlung in der Anlage. Ein Verfahren zur chemischen Stoffumwandlung ist natürlich ohne physikalische Grundoperationen zur Vorbereitung der Reaktionsedukte und zur Aufbereitung der Reaktionsprodukte nicht denkbar. Sie sind Teil der chemischen Anlage und werden mitbetrachtet.

Die Fragestellung bezüglich eines passenden Systemraums für die Prognose von Umweltauswirkungen chemischer Anlagen wird in Kapitel 4.1 betrachtet.

2.2 Verfahrensentwicklung als Problemlösungsprozess

Am Ende der Vorstudie zur Verfahrensentwicklung steht die Frage, ob das Verfahren weiterentwickelt oder abgebrochen werden soll. Zur strukturierten Beantwortung dieser Frage wird die Systemtechnik herangezogen.

Die Systemtechnik (systems engineering) hat das Ziel, „Prinzipien, Methoden und Hilfsmittel zur Analyse, Planung, Auswahl und optimalen Gestaltung komplexer Systeme bereitzustellen“ [18]. Dem Verfahreningenieur ist das Systemkonzept vertraut, die Aufteilung von Verfahren in Grundoperationen ist nichts anderes als eine systemtechnische Untergliederung des Verfahrens. An dieser Stelle wird daher nicht tiefer auf das Systemkonzept eingegangen, Patzak bietet in [101] eine ausführliche Darstellung. Wichtig für diese Arbeit ist der systemtechnische Problemlösungszyklus nach Daenzer [24] (siehe Abbildung 2.2). Er ist geeignet, um den Fokus dieser Arbeit in den Problemlösungsprozess der Verfahrensentwicklung zur Analyse einzuordnen.

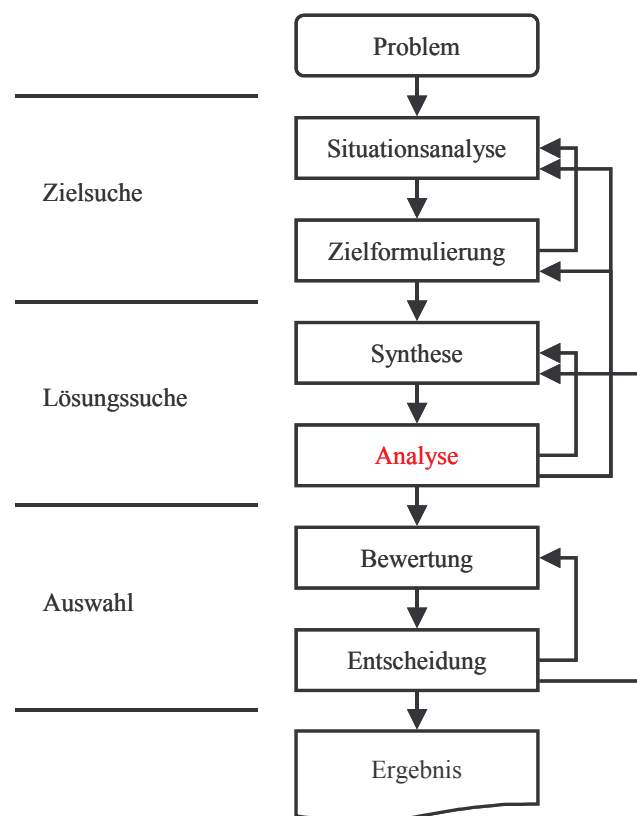


Abbildung 2.2: Flussdiagramm des systemtechnischen Problemlösungszyklus, nach [24]

Besonders in der betriebswirtschaftlichen Literatur findet sich für die Analyse eine große Vielfalt von Begriffen, die oft auch synonym verwendet werden [123][155]:

- Planung ist ein Vorgang der Systematisierung und Entscheidungsvorbereitung. Sie ist intentional, der zukünftige Zustand soll nicht nur vorhergesagt, sondern auch beeinflusst werden (Bestimmung von Soll-Größen).

- Um planen zu können, wird eine Aussage über zukünftige Ereignisse auf einer ausreichenden Informationsbasis benötigt, eine Vorhersage. Hierbei wird unterschieden zwischen Prognosen (auf Basis eines mathematischen Modells), Projektionen (auf Basis subjektiver Erwartungen) und Prophezeiungen (ohne Informationsbasis). Da im Bereich der Betriebswirtschaftslehre und bei der Vorhersage von Umweltauswirkungen nur wenige realwissenschaftliche (am Experiment überprüfbare) Theorien bestehen, können kaum Prognosen in der engen Abgrenzung angewendet werden. Daher werden in diesen Bereichen neben quantitativen, auf theoretischen Modellen beruhenden Methoden auch qualitative, auf Erfahrungen der Vergangenheit basierende Methoden als Prognose bezeichnet [60].
- An der Stelle des Begriffes der Vorhersage wird auch der Begriff der Schätzung verwendet, als Vorhersage, die auf einer wahrscheinlichen Annahme basiert. DIN 276 [90] verwendet für die Kosten im Hochbau die Kostenschätzung als „überschlägige Ermittlung der Kosten“ in frühen Projektphasen.

Für den weiteren Verlauf dieser Arbeit wird der Begriff der Prognose verwendet (siehe auch Glossar) und um Elemente der Planung und der Schätzung erweitert. Danach ist eine Prognose:

- intentional,
- überschlägig und
- beruht auf der Basis von mathematischen Modellen oder subjektiven Erwartungen.

Diese Verwendung des Prognosebegriffs ist für die Vorstudie zur Verfahrensentwicklung nicht nur für Kosten, sondern auch für die Prognose von ökologischen Auswirkungen angemessen. Das intentionale Element ist in der Verfahrensentwicklung deutlich ausgeprägt, denn spätere stark negative Abweichungen von der Prognose können das Verfahren gefährden. Es herrscht in der Vorstudie Informationsmangel. Eine Ermittlung von Kosten oder Umweltauswirkungen muss überschlägig nach dem „top-down“-Prinzip erfolgen (im Unterschied zur detaillierten Ermittlung nach dem „bottom-up“-Prinzip). Zudem stehen in der Vorstudie nicht genügend mathematische Modelle zur Verfügung, so dass auch auf subjektive Erwartungen als Informationsbasis zurückgegriffen werden muss.

Eine Prognose von ökologischen Auswirkungen erfolgt in der Vorstudie zur Verfahrensentwicklung genau dann, wenn verschiedene Verfahrensvarianten synthetisiert sind und eine Entscheidung vorbereitet werden soll, welche der Lösungsvarianten weiterverfolgt werden (vergleiche auch [144]). Die gesuchte Methode muss die Lösungsvarianten analysieren und einer Bewertung zugänglich machen.

2.3 Zielformulierung

In der Situationsanalyse (Ist-Zustand) und der Zielformulierung (Soll-Zustand) müssen die verschiedenen Dimensionen (Technik, Ökonomie, Umweltauswirkungen) und ihre Unter-
aspekte in Eigenschaften ausgedrückt werden, die einer Analyse und Bewertung zugänglich
sind. Dazu ist einerseits „die Zahl der zu betrachtenden Ziele zu beschränken, damit das
mehrdimensionale Zielsystem überschaubar bleibt“ [152]. Andererseits müssen die
verschiedenen Eigenschaften eindeutig, objektiv und nachvollziehbar sein. Diese
Anforderungen werden besonders dann erfüllt, wenn die Eigenschaften quantifiziert werden
können. Es ist vorteilhaft, wenn die Eigenschaften physikalische oder monetäre Einheiten
haben und gemessen bzw. errechnet werden können, aber auch qualitative Eigenschaften
können über Methoden wie die Nutzwertanalyse einer Quantifikation unterzogen
werden [153]. Um eine möglichst rationale und objektive ökologische Bewertung von
Verfahrensvarianten zu ermöglichen, sollen in dieser Arbeit nur quantitativ bestimmbare
Informationen in die Analyse und Bewertung eingehen.

Als Ergebnis der Zielformulierung steht ein technisches, wirtschaftliches und ökologisches
Pflichtenheft. Auf der Basis dieser Pflichtenhefte können die verschiedenen Verfahrens-
varianten analysiert und bewertet werden. Technische und wirtschaftliche Pflichtenhefte
stehen in der Vorstudie zur Verfahrensentwicklung üblicherweise zur Verfügung, ökologische
Pflichtenhefte mit quantifizierten Zielen sind derzeit noch nicht üblich. Statt dessen wird für
die Beschreibung der ökologischen Ziele oft auf die qualitativen und für das jeweilige
Verfahren unpräzisen Unternehmensziele zurückgegriffen, die im Umweltmanagementsystem
des Unternehmens aufgestellt worden sind. Die Ergebnisse dieser Arbeit lassen Rückschlüsse
auf die Ausgestaltung ökologischer Pflichtenhefte für Vorstudien der Verfahrensentwicklung
zu.

2.4 Synthese von Lösungen

2.4.1 Verfahrenstechnische Grundoperationen

Für die Synthese von möglichen Verfahrensvarianten, die das in der Zielformulierung
ausgestaltete Pflichtenheft erfüllen, wird im Allgemeinen auf die verfahrenstechnischen
Grundoperationen zurückgegriffen. Die Grundoperationen sind bekannt und z. B. von Vauck
und Müller [143] oder Gmehling [54] beschrieben. Ein Beispiel einer Systematik der Grund-
operationen der chemischen Verfahrenstechnik nach Vauck und Müller bietet Tabelle 2.1.

Tabelle 2.1: Systematik der Grundoperationen der chemischen Verfahrenstechnik [143]

	mechanisch	elektromagnetisch	thermisch
Trennen	Sedimentieren Zyklonieren Filtrieren Auspressen Zentrifugieren Zerkleinern Klassieren Sortieren Flotieren	Elektroabscheiden Magnetscheiden Elektroscheiden Elektrodialyse Elektroosmose Elektrophorese	Kondensieren Verdampfen Kristallisieren Trocknen Destillieren Extrahieren Sorbieren Permeieren Dialysieren
Vereinigen	Versprühen Begasen Rühren Homogenisieren Kneten Vermengen Dosieren Kompaktieren	-	Auflösen Extrahieren Sorbieren

Um eine angemessene Genauigkeit bei der Analyse und Bewertung eines Verfahrens zu erreichen, ist ein modulares Vorgehen, also eine Zerlegung des Verfahrens in einzelne Teilschritte unabdingbar. Aus den vielfältigen Möglichkeiten der Zerlegung eines Verfahrens in Module spricht den Verfahrenstechniker die Einteilung in verfahrenstechnische Grundoperationen sofort an, sie hat sich zur technischen Analyse und Bewertung bewährt.

Für Wirtschaftlichkeitsanalysen sind vornehmlich andere Möglichkeiten der Zerlegung eines Verfahrens in Module in Gebrauch. Dennoch bietet es sich an, an den Grundoperationen als Möglichkeit zur Zerlegung des Verfahrens festzuhalten. Eine Anpassung des Ordnungssystems der Grundoperationen für die Zwecke der Prognose der Wirtschaftlichkeit des Verfahrens ist allerdings nötig [43].

Für die Analyse und Bewertung von ökologischen Auswirkungen kann das in Tabelle 2.1 vorgestellte Ordnungssystem ebenfalls nicht ohne Anpassungen übernommen werden. Das gewählte Ordnungssystem soll eine eindeutige Zuordnung ermöglichen, um bei Zerlegung der Anlage in Module Fehlerquellen wie Doppelzählungen etc. zu vermeiden. Stoffströme, die zu den ökologischen Auswirkungen eines Verfahrens beitragen, wie z. B. die diffusen Emissionen aus Rohrleitungen und Armaturen, müssen in die Systematik der Grundoperationen integriert werden. Die Eignung der Grundoperationen für die Zwecke der Prognose von ökologischen Auswirkungen wird in Kapitel 4.6. diskutiert und Vorschläge zur Anpassung der Systematik werden gemacht.

2.4.2 Informationsbeschaffung

Bei der Synthese werden oftmals viele verschiedene Lösungsvarianten erarbeitet und müssen entsprechend dokumentiert werden. Es ist daher sinnvoll, festzulegen, welche Informationen

in welchem Umfang zur weiteren Analyse und Bewertung zur Verfügung stehen sollen. „Ein Informationsüberschuss erschwert dem Anwender [...] nicht nur den Überblick, es werden auch unnötige personelle Ressourcen dadurch vergeudet, dass Arbeitszeit zur Ermittlung, Aufbereitung und Speicherung von später nicht mehr benötigten Informationen aufgewendet wird“ [123].

Für die Deckung des Informationsbedarfes stehen projektunabhängige Informationsquellen, Erfahrungswissen von früheren Projekten und Informationen über das gerade entwickelte Verfahren zur Verfügung.

Blaß [18] beschreibt die Verfahrensentwicklung als typisches Interpolationsproblem, denn „es handelt sich [...] meist um die Entwicklung von Prozessen aus bekannten, bewährten Grundoperationen, bei der die ungeheure Vielfalt der Kombinationsmöglichkeiten das dominierende Lösungsproblem darstellt“. Vielfältige Informationen stehen über die einzelnen Stoffe und Grundoperationen projektunabhängig zur Verfügung:

- Lehrbücher zur Verfahrenstechnik, z. B. [111],
- Enzyklopädien der Verfahrenstechnik, z. B. [4][15][55][57],
- Tabellenwerke, z. B. [23][82][85][146],
- Stoffdatenbanken, z. B. [52],
- Lieferformen und Preise aus Herstellerangaben,
- Nachschlagewerke zur Verfahrensökonomie, z. B. [21][151].

Erfahrungswissen von abgeschlossenen Projekten steht nur dann systematisch zur Verfügung, wenn die Projektbeteiligten ihre Erfahrungen systematisieren und geeignet ablegen. Dies geschieht z. B. durch Checklisten oder Datenbanken. „Die Aufarbeitung der vorhandenen Unterlagen von abgeschlossenen Projekten ist eine nicht zu vernachlässigende Aufgabe“ [123]. In Kapitel 4.9 werden Ansätze bezüglich Informationsbedarf, Projektorganisation und Ablage von Informationen aus abgeschlossenen Projekten (also von Messwerten aus dem laufenden Betrieb von Anlagen) für die Prognose von Umweltauswirkungen vorgestellt.

Informationen über das gerade entwickelte Verfahren (vorhandenes Wissen über Systemgrenzen, Edukte, Produkte, Randbedingungen und Nebenwirkungen) werden gewöhnlich in genormten Fließschemata zusammengestellt. Die Fließschemata sind nach EN ISO 10.628 [92] (ehemals DIN 28.004 [91]) genormt. Folgende Informationen müssen nach EN ISO 10.628 im Grundfließschema enthalten sein (Grundinformationen) [92]:

- Benennung der Verfahren (Verfahrensabschnitte, Grundoperationen),
- Benennung der Ein- und Ausgangsstoffe (Stoffe, die die Systemgrenze des Verfahrens überschreiten),
- Fließrichtung der Hauptstoffe zwischen den Verfahren.

Zusätzlich dürfen im Grundfließbild folgende Informationen enthalten sein (Zusatzinformationen) [92]:

- Benennung der Hauptstoffe zwischen den Verfahren (Stoffflüsse innerhalb des Systems),
- Durchflüsse bzw. Mengen der Ein- und Ausgangsstoffe,
- Durchflüsse bzw. Mengen von Energie bzw. Energieträgern,
- Hauptstoffe zwischen den Verfahren von Energie- bzw. Energieträgern,
- Charakteristische Betriebsbedingungen.

Die im Grundfließbild nach Grund- *und* Zusatzinformationen vorhandenen Informationen, bzw. die in der Verfahrensentwicklung zur Erstellung dieser Fließbilder benötigten Informationen werden in dieser Arbeit als vorhanden vorausgesetzt. Die Hauptstoffe zwischen den Verfahren bezeichnen die für die technische Modellbildung und Analyse relevanten Stoffe. Informationen über die für die ökologische Analyse relevanten *Emissionen* sind in einem Grundfließschema nicht enthalten.

2.5 Analyse

Die Analyse dient zur Beschreibung und Systematisierung der Eigenschaften von verschiedenen Lösungsvarianten und bereitet die Bewertung vor.

2.5.1 Technische Analyse

Die technische Analyse von Verfahren geschieht durch ihre mathematische Modellierung. Ein Verfahren ist ein Beziehungsgefüge von Wirkungsabläufen (siehe Glossar), das mathematische Modell eines Verfahrens enthält stets gekoppelte Elemente. Funktionsmodelle beschreiben den mathematischen Zusammenhang zwischen den Eingangsgrößen und den Ausgangsgrößen an jedem Element. Strukturmodelle, wie sie im verfahrenstechnischen Fließbild enthalten sind, beschreiben die Kopplungen zwischen den Elementen.

Funktionsmodelle setzen sich im Allgemeinen aus den folgenden Gleichungen zusammen [18][124]:

- Massenbilanzen,
- Energiebilanzen,
- Phasengleichgewichtsberechnungen,
- Transportgleichungen für Strömung, Wärme- und Stoffübergang,
- Kinetische Gleichungen für den Verlauf der Reaktion.

Dabei ist die Zahl der unabhängigen Gleichungen im Allgemeinen kleiner als die Zahl der Variablen. Die Betriebsvariablen sind die den Betrieb eines Verfahrens charakterisierenden veränderlichen Größen physikalisch-chemischer Natur, wie z. B. Druck, Temperatur, Zusammensetzung oder Massenstrom. Die Stoffvariablen beschreiben die Eigenarten des

stofflichen Systems und hängen zusätzlich von den Betriebsvariablen ab. Die Konstruktionsvariablen charakterisieren Geometrie und konstruktiven Aufbau der Anlagen. Die Gesamtzahl der unabhängigen Variablen F (Freiheitsgrad) ergibt sich dabei als Differenz der Gesamtzahl der Variablen V und der Zahl der unabhängigen Gleichungen G .

Gleichung 2.1: $F = V - G$

Der Freiheitsgrad legt demnach die Anzahl der Variablen fest, über deren Art und Größe der Ingenieur vor dem Start der Analyse entscheiden muss. Für die wirtschaftliche und ökologische Analyse, die nach der technischen Analyse durchgeführt werden und sich der mathematischen Modelle der technischen Analyse bedienen, liegen die unabhängigen Variablen fest.

Der rechentechnische Aufwand für die Funktionsmodelle muss dem jeweiligen Stand der Verfahrensentwicklung angepasst sein. In der Vorstudie sind die folgenden vier Bilanzen für statische durchschnittliche Betriebszustände ein Mindeststandard, denn sie eignen sich auch für überschlägige Rechnungen:

Gleichung 2.2:
$$\sum_{i=1}^n \dot{m}_{i,\alpha} = \sum_{j=1}^r \dot{m}_{j,\omega} \quad \text{Massenstrombilanz}$$

Gleichung 2.3:

$$\sum_{i=1}^n \dot{m}_{i,\alpha} \cdot w_{i,\alpha k} + \dot{m}_{Qk} = \sum_{j=1}^r \dot{m}_{j,\omega} \cdot w_{j,\omega k} + \dot{m}_{Sk} \quad \text{Komponenten-Massenstrombilanz}$$

Gleichung 2.4:

$$\sum_{i=1}^n \dot{H}_{i,\alpha} + \sum_{j=1}^r \dot{Q}_{j,\alpha} + \sum_{k=1}^s \dot{W}_{k,\alpha} + \Delta \dot{H}_R = \sum_{m=1}^t \dot{H}_{m,\omega} + \sum_{p=1}^u \dot{Q}_{p,\omega} + \sum_{q=1}^z \dot{W}_{q,\omega} \quad \text{Enthalpiestrombilanz}$$

Gleichung 2.5:

$$\sum_{i=1}^n \dot{E}_{i,\alpha} + \sum_{j=1}^r \dot{Q}_{j,\alpha} \cdot \frac{T - T_U}{T} + \sum_{k=1}^s \dot{W}_{k,\alpha} + \Delta \dot{E}_R = \sum_{m=1}^t \dot{E}_{m,\omega} + \sum_{p=1}^u \dot{Q}_{p,\omega} \cdot \frac{T - T_U}{T} + \sum_{q=1}^z \dot{W}_{q,\omega}$$

mit $\dot{E} = \dot{H} - \dot{H}_U - T_U(\dot{S} - \dot{S}_U)$ Exergiestrombilanz

Die mathematische Verknüpfung aller Funktionsmodelle erfolgt in einem Strukturmodell. Es enthält alle Kopplungsbeziehungen zwischen den Elementen, der Eingangsstrom eines Elementes j stimmt mit dem Ausgangsstrom des vorhergehenden Elementes i bezüglich allen

Vektorkomponenten überein (Gleichung 2.1). Der Stromvektor \vec{s} beschreibt den Strom bezüglich aller seiner unabhängigen Betriebs- und Stoffvariablen.

Gleichung 2.6: $\vec{s}_j = \vec{s}_i$

Die Handhabung des Modells, bestehend aus Funktions- und Strukturmodell, erfolgt außer bei sehr einfachen Modellen mit EDV-Unterstützung und wird als Simulation bezeichnet. Die Simulation berechnet auf der Basis vorgegebener Werte der unabhängigen Variablen durch Lösung des Gleichungssystems die Werte aller Stoff- und Energieströme des Systems.

„Alle Kostenrechnungen beruhen auf der Kenntnis der Massen- und Energieströme“ [18], daher erfolgen die wirtschaftliche und die ökologische Analyse nach der technischen Analyse. Die Funktionsmodelle und Strukturmodelle der technischen Analyse liegen für die ökonomische und ökologische Analyse folglich vor und können genutzt werden. Es ergibt sich im Idealfall ein konsistentes Modell für alle Dimensionen (Technik, Ökonomie, Ökologie). Synergien bezüglich Aufbau und Handhabung der Modelle treten auf.

Funktionelle Einheit einer technischen Analyse ist üblicherweise eine Anlage. Diese kann bei gegebener Anlagenkapazität einfach auf die funktionelle Einheit Produkt (1 Stück Produkt, 1 kg Produkt) umgerechnet werden.

Der Systemraum von technischen Analysen ist ebenfalls die Anlage („Systemgrenze Betriebszaun“). Um das jeweilige Verfahren an die technischen Randbedingungen des Unternehmens anzupassen, werden vorhandene Anlagenteile oder vorgegebene Stoffeigenschaften durch die Festlegung von unabhängigen Variablen in die Modellbildung einbezogen.

Funktionelle Einheit einer Betriebskostenprognose ist eine Anlage. Diese kann bei gegebener Anlagenkapazität auf die funktionelle Einheit Produkt (1 Stück Produkt, 1 kg Produkt) umgerechnet werden. Bei Verfahrensvarianten mit unterschiedlichen Nebenprodukten wird häufig die funktionelle Einheit Produkt gewählt, um die Verfahren mit Fokus auf das Hauptprodukt vergleichen zu können.

Der Systemraum von Betriebskostenprognosen ist ebenfalls die Anlage („Systemgrenze Betriebszaun“). Um das jeweilige Verfahren von anderen Aktivitäten des Unternehmens freizuschneiden, werden für Betriebsgemeinkosten und kalkulatorische Betriebskosten Preise errechnet bzw. zugewiesen (vergleiche den Begriff der Allokation im Glossar).

Die Ergebnisse aller Analysen eines Verfahrens sind nur für die zu Grunde gelegten Randbedingungen bzw. nur für einen Stichtag gültig. Dies ist auch für technische Analysen zutreffend, denn die technischen Randbedingungen können sich durchaus mit der Zeit ändern. Besonders augenfällig wird diese zeitliche Abhängigkeit bei wirtschaftlichen Analysen, denn Preise entstehen im Wechselspiel von Angebot und Nachfrage und können sich in kurzer Zeit stark ändern (Spot-Marktpreise für wesentliche Rohstoffe, Wechselkursschwankungen, Inflation...). Um Erfahrungswissen von abgeschlossenen Projekten für spätere Studien nutzen zu können, müssen die veränderten Randbedingungen angepasst werden. Um nicht alle Preise neu aufnehmen und alle Berechnungen erneut durchführen zu müssen, bieten sich Preisindices q an, die zur Umrechnung von Preisen von einem Bezugsjahr auf ein anderes genutzt werden können.

Gleichung 2.7:
$$P_2 = P_1 \cdot \frac{q_2}{q_1}$$

Preisindices werden aus statistischen Angaben errechnet, von besonderer Bedeutung für die chemische Industrie sind der Chemical Engineering Plant Cost Index [87] oder der Preisindex für chemische Anlagen [129].

Eine Einteilung der verwendeten Prognosemethoden zur ökonomischen Analyse kann [123] entnommen werden:

- Subjektive Beurteilungsmethoden
- Kennzahlenmethoden
- Verhältnismethoden
- Adaptionismethoden
- Gleichungsmethoden
- Stochastische Methoden

Die einzelnen Kostenprognosemethoden lassen sich nur schwer den Phasen der Verfahrensentwicklung zuordnen, da die Art der benötigten Informationen nicht gleich ist.

Auch informationsintensive Prognosemethoden werden manchmal in einer frühen Phase der Verfahrensentwicklung angewendet und die Informationen, die in einer späteren Phase vorliegen würden, müssen aufwändig erhoben werden [43].

Im Folgenden werden einzelne Prognosemethoden zur ökonomischen Analyse kurz beschrieben, sie bilden die methodische Grundlage für die Prognose von Umweltauswirkungen.

Subjektive Beurteilungsmethoden

Subjektive Beurteilungsmethoden stützen sich auf die Einschätzungen von Experten, die auf dem relevanten Fachgebiet umfangreiches Fachwissen besitzen. Sie können angewendet werden, wenn kaum auswertbare Daten aus abgeschlossenen Projekten vorliegen oder wenn eine Datenbeschaffung zu aufwändig ist.

Bei Einzelbefragungen gibt es keinen Vergleichsmaßstab zur Relativierung und Absicherung der Prognosen, daher werden gern mehrere Experten eingebunden [123]. Bei der Mehrfachbefragung werden mehrere Experten unabhängig voneinander befragt, die Ergebnisse werden dann gemittelt (eventuell wird bei der Mittelung gewichtet oder extreme Prognosen werden außer Acht gelassen). Bei der Teamprognose treffen sich mehrere Experten und diskutieren ihre Einzelprognosen.

Ein Verfahren mit etwas höherem Organisationsaufwand ist die Delphi-Befragung. Hier geben mehrere, untereinander anonym bleibende Experten schriftlich begründete Prognosen ab, die von einem Koordinator gesammelt und ausgewertet werden. Die Ergebnisse der Auswertung werden den Experten mitgeteilt und eine weitere Prognoserunde durchgeführt. Dadurch findet eine Rückkopplung von Informationen statt, jeder Experte kann die eigene Prognose auf der Basis der anderen Prognosen kritisch überprüfen.

Kennzahlenmethoden

Mit Kennzahlenmethoden (Gleichung 2.8) wird versucht, die bei ähnlichen, bereits abgeschlossenen Projekten gewonnenen Erfahrungen auf wenige technische Einflussgrößen zu reduzieren und in Form von Kennzahlen abzubilden.

Gleichung 2.8: $\text{Prognosegröße} = \text{Kennzahl} \cdot \text{Bezugsgröße}$

Damit reduziert sich bei bekannter Kennzahl die Prognose auf die Ermittlung der Bezugsgröße. Bevorzugt werden Bezugsgrößen gewählt, die einfach ermittelt werden können, wie Masse, Grundfläche, umbauter Raum oder Produktionskapazität. Die bekannteste Kennzahlenmethode ist das „Kilokostenverfahren“ [65], bei dem aus der Masse von Anlagenteilen über die Kennzahl Kilokosten die Kosten zur Herstellung des Anlagenteils ermittelt werden. Voraussetzung für alle Kennzahlenmethoden ist, dass die Prognosegröße

und die Bezugsgröße einen plausiblen funktionalen Zusammenhang haben. Das Kilokostenverfahren kann z. B. sinnvoll nur bei Anlagenteilen angewendet werden, bei denen die Materialkosten dominieren und nach Masse abgerechnet werden.

Eine Abwandlung der Kennzahlenmethode, das Kapitalbedarfsverfahren (Gleichung 2.9), wird im Anlagenbau gern verwendet [103][126]. Hierbei wird aus Anlagenkapazität und Kapitalbedarf eines abgeschlossenen Projektes und einem je nach Branche verschiedenen Kostenkapazitäts-Exponent Ψ der Kapitalbedarf für eine neue Anlage errechnet.

$$\text{Gleichung 2.9:} \quad \text{Kapitalbedarf}_1 = \left(\frac{\text{Anlagenkapazität}_1}{\text{Anlagenkapazität}_2} \right)^\Psi \cdot \text{Kapitalbedarf}_2$$

Natürlich ist die Prognose einer Gesamtanlage nach Kennzahlenverfahren ungenau, denn eine einzige Kennzahl hat nicht für alle Einflussfaktoren einen plausiblen funktionalen Zusammenhang. Es bietet sich also an, die Anlage in Teilkomponenten zu zerlegen, für die jeweils eine eigene Prognose mit einer für die Teilkomponente sinnvollen Kennzahl durchgeführt wird (Bauelementverfahren, Gleichung 2.10). Die Teilprognosen können dann zur Gesamtprognose aufaddiert werden.

$$\text{Gleichung 2.10:} \quad \text{Gesamtprognosegröße} = \sum_{i=1}^n \text{Kennzahl}_i \cdot \text{Bezugsgröße}_i$$

Verhältnismethoden

Die Verhältnismethoden basieren auf der Annahme, dass man bei ähnlichen Projekten von einer Konstanz bestimmter Kostenverhältnisse ausgehen kann [126]. Beim Prozentsatzverfahren wird die prozentuale Aufteilung der Kosten auf einzelne Projektphasen als konstant angenommen (z. B. nach Gleichung 2.11), beim Materialkostenverfahren die prozentuale Aufteilung der verschiedenen Kostenarten (z. B. nach Gleichung 2.12) und beim Verfahren der kostenbestimmenden Einzelteile die prozentuale Aufteilung von Hauptapparaten und Zubehör (z. B. nach Gleichung 2.13).

$$\text{Gleichung 2.11:} \quad \text{Baukosten}_1 = \left(\frac{\text{Planungskosten}_1}{\text{Planungskosten}_2} \right) \cdot \text{Baukosten}_2$$

$$\text{Gleichung 2.12:} \quad \text{Herstellkosten}_1 = \left(\frac{\text{Materialkosten}_1}{\text{Materialkosten}_2} \right) \cdot \text{Herstellkosten}_2$$

$$\text{Gleichung 2.13:} \quad \text{Zubehörkosten}_1 = \left(\frac{\text{Apparatekosten}_1}{\text{Apparatekosten}_2} \right) \cdot \text{Zubehörkosten}_2$$

Das Verfahren der kostenbestimmenden Einzelteile ist im Bereich der Kostenermittlung für chemische Anlagen weit verbreitet, da bei der Verfahrensentwicklung die eingesetzten Apparate bereits in der Hauptstudie festgelegt werden und einen hohen Anteil der Investitionskosten ausmachen [71].

Verhältnismethoden sind keine in sich geschlossenen Methoden zur Prognose, denn man muss vorher eine andere Prognosemethode anwenden, um eine Basis für die Prognose nach der Verhältnismethode zu erhalten.

Adaptionsmethoden

Bei den Adaptionsmethoden (Suchmethoden) werden Informationen von abgeschlossenen Projekten auf das zu prognostizierende Projekt übertragen. Dazu ist es notwendig, aus einer großen Zahl von abgeschlossenen Projekten dasjenige auszuwählen, das dem neuen Projekt am ähnlichsten ist. Adaptionsmethoden benutzen meist EDV-gestützte Datenbanken. Bei Anlagenbauprojekten ist die Wahrscheinlichkeit recht gering, dass Projekte sich genau wiederholen. Die Struktur der Datenbank muss einen Zugriff auf Teilkomponenten oder Baugruppen verschiedener Projekte ermöglichen [123].

Gleichungsmethoden

Bei den Gleichungsmethoden werden durch Regressionsanalysen Abhängigkeiten zwischen der zu prognostizierenden Größe und einem oder mehreren technischen Einflussgrößen in Form einer mathematischen Funktion abgebildet. Bei der linearen Einfachregression wird eine lineare Funktion (Gleichung 2.14) durch die „Punktwolke“ des Diagramms mit Ziel- und Einflussgröße gelegt. Die weiter oben beschriebenen Kennzahlenmethoden sind Ergebnis einer linearen Einfachregression.

Gleichung 2.14:
$$y = c_0 + c_1 \cdot x$$

Die Linearisierung der Kostenfunktion stellt im Regelfall eine Vereinfachung dar, die nur für kleine Wertebereiche Gültigkeit besitzt. Um den Gültigkeitsbereich zu erweitern, kann von der linearen auf eine nicht-lineare Einfachregression übergegangen werden (z. B. mit einer quadratischen Funktion), trotzdem bleibt die Genauigkeit der Einfachregression beschränkt.

Bei der Mehrfachregression werden zur Bestimmung der zu prognostizierenden Größe zwei oder mehr Einflussgrößen berücksichtigt, die additiv (Gleichung 2.15) oder multiplikativ (Gleichung 2.16) verknüpft sein können.

Gleichung 2.15:
$$y = c_0 + \sum_{i=1}^n c_i \cdot x_i$$

Gleichung 2.16:
$$y = c_0 \cdot \prod_{i=1}^n (x_i)^{c_i}$$

Die Ermittlung und Lösung einer Prognosegleichung sind trivial, problematisch ist hingegen die Festlegung der maßgeblichen Einflussgrößen. Es gibt eine große Zahl möglicher Einflussgrößen, und die gewählten Größen müssen bekannt und linear unabhängig sein.

Um durch Regression eine aussagefähige Gleichung zu bekommen, benötigt man eine gewisse Zahl von ähnlichen Projekten. Haller [59] gibt Gleichung 2.17 als Anhaltspunkt zur Beantwortung der Frage, ab wie vielen ähnlichen Projekten eine sinnvolle Regression durchgeführt werden kann.

Gleichung 2.17:
$$\text{Anzahl der Projekte} \geq 7 + 3 \cdot (\text{Anzahl der Parameter} - 1)$$

Bei 2 Parametern sind danach schon 10 Projekte notwendig. Dieses Erfahrungswissen ist bei neuartigen Verfahren nicht vorhanden. Regressionsgleichungen sind inflexibel gegenüber Veränderungen, wie sie durch neue Technologien ausgelöst werden können.

Life Cycle Costing

Ein Ansatz zur Analyse von wirtschaftlichen Auswirkungen unter Berücksichtigung des Lebenszyklusansatzes ist die Methode des Life Cycle Costing (LCC). In Anlehnung an die Methodik der Ökobilanz wird meist die funktionelle Einheit Produkt betrachtet und der Systemraum auf den gesamten Produktlebenszyklus ausgedehnt [127][154]. Ein Verdienst des Life Cycle Costing liegt in der Erweiterung des Systemraums um die Kosten für das Lebensende des Produktes bzw. der Anlage. In der Systematik nach Faubel [43] in Abbildung 2.3 sind beispielsweise die Kosten für den Rückbau oder den Umbau der Produktionsanlage nach Ende der Produktion nicht aufgeführt, obwohl diese Kosten durchaus als kalkulatorische Betriebskosten dem Verfahren zugerechnet werden müssten.

Durch das „Rucksack-Prinzip“ bei Preisen, die die Kosten aller Vorketten in der Wertschöpfungskette bereits beinhalten, ist die Analyse von Kosten außerhalb des Systemraums Anlage für die spätere Bewertung des Verfahrens nicht notwendig.

Das Life Cycle Costing wird daher für die unternehmensinterne Analyse in der Verfahrensentwicklung nur für zwei Spezialfälle sinnvoll angewendet [110]:

- Eine Gruppe von Herstellern unternimmt gemeinsam die Entwicklung einer Produktionsroute über mehrere Stufen der Wertschöpfungskette hinweg und versucht, die Kosten für die gemeinsamen Stufen zu analysieren („Total Production Cost“).
- Der Hersteller versetzt sich in die Situation des späteren Nutzers und versucht, die Kosten des Nutzers zu analysieren („Total Cost of Ownership“).

Fehlerrechnung durch stochastische Methoden

„Die Ungenauigkeit der zur Verfahrensauslegung notwendigen Parameter ist ein nicht zu beseitigendes oder zu umgehendes Faktum. Durch Sensitivitätsanalysen müssen die signifikanten Parameter und der Einfluss ihrer Ungenauigkeit auf das angestrebte Ergebnis festgestellt werden“ [18]. Die Kostenprognose in frühen Projektphasen ist aufgrund der schlechten Informationslage mit erheblichen Unsicherheiten behaftet.

Eine Fehlerfortpflanzungsrechnung (z. B. durch die Formel der quadratischen Fehlerfortpflanzung) kann nicht durchgeführt werden. Sie setzt voraus, dass die Funktion von linear unabhängigen Parametern bestimmt wird. Signifikanzmaße können zudem nur bei Differenzierbarkeit der Berechnungsgleichung bestimmt werden. Diese Voraussetzungen sind bei den in der Vorstudie der Verfahrensentwicklung verwendeten Modellen nicht gegeben.

Durch den Charakter der Neuartigkeit bei der Verfahrensentwicklung stehen logisch oder empirisch erhobene Wahrscheinlichkeiten nicht zur Verfügung. Es muss auf subjektive Wahrscheinlichkeiten zurückgegriffen werden. Damit ist eine getrennte Behandlung von systematischen und zufälligen Fehlern nicht sinnvoll. Es ist nicht möglich, für subjektive Wahrscheinlichkeiten systematische Fehler zu quantifizieren. Es wird vielmehr vereinfachend davon ausgegangen, dass die systematischen Fehler im Gesamtsystem zufällig verteilt sind und zusammen mit den zufälligen Fehlern adressiert werden können.

Die Berücksichtigung von Wahrscheinlichkeiten kann auf zwei Arten erfolgen: Bei der ersten Art werden die Wahrscheinlichkeiten bei der Ermittlung von Kosten berücksichtigt (Prognosen ersten Grades), während bei der zweiten Art zusätzlich die Struktur der Anlage stochastischen Einflüssen unterworfen ist (Prognosen 2. Grades) [123]. Die Struktur der Anlage ist bei der Analyse von technisch sinnvollen Verfahren vorgegeben, es sollen lediglich Lösungsvarianten gegenübergestellt und bewertet werden. Damit sind nur Prognosen ersten Grades für die Analyse von Verfahrensvarianten sinnvoll.

Schultz [123] schlägt für die Behandlung von zufälligen Fehlern vor, bei jeder Prognose neben dem eigentlichen Ergebnis auch ein mögliches Minimum und ein mögliches Maximum zu erheben, z. B. in einer Teamprognose. Diese Art entspricht der „Gedankenwelt“ der Experten mehr als die direkte Angabe von Wahrscheinlichkeiten. Die Werte, die die Parameter innerhalb der vorgegebenen Intervalle annehmen, sind allerdings nicht gleich wahrscheinlich. Es kann vereinfachend davon ausgegangen werden, dass eine Wahrscheinlichkeitsverteilung im Intervall vorliegt, die ihre höchste Eintrittswahrscheinlichkeit beim ursprünglich prognostizierten Wert hat. Durch die Annahme einer Wahrscheinlichkeitsfunktion können dann aus den drei Werten die stochastischen Größen wie Erwartungswert und Varianz errechnet werden.

Wenn für die Prognose das Verfahren in Teilkomponenten zerlegt wird und die Teilkomponenten mit verschiedenen Prognosemethoden erhoben werden, dann wird für jede Teilkomponente getrennt eine Wahrscheinlichkeit erhoben und die Gesamtwahrscheinlichkeit errechnet. In Fällen, in denen das verwendete Strukturmodell zu kompliziert sein sollte, um eine analytische Berechnung zu ermöglichen, kann die angenommene Wahrscheinlichkeitsfunktion jeder Teilkomponente genutzt werden, um durch stochastische Simulation die Wahrscheinlichkeitsfunktion des Gesamtverfahrens zu erheben [123]. Dieses Vorgehen entspricht der Monte Carlo-Simulation.

Es wird erwartet, dass die Genauigkeit der ökologischen Analyse im Bereich der Genauigkeit der analogen ökonomischen Methoden liegt. Verschiedene Autoren geben für die Genauigkeit der Kostenprognose Werte an, die Aussagen sind jedoch durchaus nicht einheitlich:

- Blaß [18] und Prinzing et al. [108] geben für die globale Prognose der Investition von Gesamtanlagen ein Fehlerintervall von $\pm 30\text{-}40\%$ an, bei einem Vertrauensintervall von 95% .
- Hirschberg [65] spricht bei der globalen Prognose der Investition von Gesamtanlagen von einem Fehlerintervall von $\pm 30\%$ und empfiehlt die parallele Durchführung mehrerer Methoden zur Kostenprognose, um zu realistischen Werten zu kommen.
- Viola [150] benennt für die globale Prognose der Investition von Gesamtanlagen ein Fehlerintervall von $\pm 25\text{-}30\%$.

Durch die Zerlegung der Anlage in Grundoperationen, die einzeln prognostiziert und aufaddiert werden, ist die Genauigkeit höher als in Prognosen, die Gesamtanlagen als „black-box“ betrachten. „Die Summe der Schätzwerte von vielen Elementen des Gesamtsystems ist nach dem Gesetz des Fehlerausgleichs genauer als die Einzelschätzung des Gesamtsystems“ [18]. Damit kommen verschiedene Autoren zu folgenden Ergebnissen:

- Viola [150] gibt für seine „Rapid Estimating Technique“ für die Prognose von Investitionskosten, die auf der Zerlegung von Anlagen in „major operating steps“ beruht, eine Genauigkeit von $\pm 15\%$ an.
- Onken und Behr [100] und Prinzing et al. [108] sprechen von $\pm 20\%$ für Investitionskosten nach dem Bauelementeverfahren.

Mit der Prognose von Betriebskosten beschäftigen sich nur wenige Autoren:

- Faubel [43] plädiert für eine Aufteilung der Gesamtanlagen in Grundoperationen zur Prognose von Betriebskosten, da diese genauer ist als eine Prognose der Gesamtanlage. Er gibt allerdings keine Fehlerintervalle an.
- Van Oven et al. [142] verwenden eine stochastische Methode (Monte Carlo-Simulation) für die Fehlerrechnung der Prognose von Betriebskosten von einzelnen Anlagenmodulen. Sie arbeiten mit Vertrauensintervallen von 95% , geben aber nur für

einzelne Beispiele Fehlerintervalle an. Die angegebenen Beispiele sind sehr unterschiedlich und liegen im Extrembeispiel bei $-80 / +150\%$.

2.5.3 Ökologische Analyse

Die ökologische Analyse wird im Zusammenhang mit der Verfahrensentwicklung oft erwähnt, aber wenig spezifiziert [18][66][100][143]. Im Vergleich zur ökonomischen Analyse hat die ökologische Analyse den Nachteil, dass die Eigenschaften des Systems nicht in einer Einheit ausgedrückt werden können. Eine Vielzahl möglicher Schutzgüter (menschliche Gesundheit, Biodiversität etc.) und Schwierigkeiten bei der Zuordnung von technischen Einflussgrößen zu den Schutzgütern erschweren die Anwendung.

Sicher ist jedoch, dass die Ökologie zunehmend als Kriterium neben die Wirtschaftlichkeit bei der Analyse und Bewertung von technischen Systemen der Chemieindustrie tritt. Umweltpolitische Trends von Gesetzgeber und Unternehmen erfordern eine Auseinandersetzung mit den Umweltauswirkungen von Verfahren – und dies möglichst schon in einem frühen Stadium der Verfahrensentwicklung:

- Einführung und Zertifizierung von betrieblichen Umweltmanagementsystemen nach EN ISO 14.001 [94] oder EMAS 2 [147]: Für das Umweltmanagement werden zur Quantifizierung von Umweltzielen, zur Erarbeitung der Umsetzung und zur Überprüfung der Ergebnisse Methoden zur Analyse und Bewertung von Umweltauswirkungen benötigt.
- Gesetzliche Anforderungen bei Planung und Betrieb von Anlagen: Für einige Anlagen der chemischen Industrie ist die Durchführung von Analysen der Umweltverträglichkeit in der Planungsphase Teil des Genehmigungsverfahrens der Anlage. Es sind beispielsweise Umweltverträglichkeitsprüfungen (UVP) für den Standort der Anlage [113][115] oder die Einhaltung von Standards der umwelt-freundlichsten verfügbaren Technologie (BAT) [114] gesetzlich vorgeschrieben. Gesetzliche Grenzwerte für umweltschädliche Emissionen der Anlage im Betrieb gibt es schon seit Jahrzehnten (z. B. für den Bereich des Umweltmediums Luft das Bundesimmissionsschutzgesetz BImSchG [19] mit seiner Verwaltungsvorschrift TA Luft [132]). Um teure und aufwändige Nachsorge zur Einhaltung der gesetzlichen Anforderungen zu vermeiden, sollten bereits in der Verfahrensentwicklung die ökologischen Auswirkungen des Verfahrens analysiert werden. Eine Übersicht über die gesetzlichen Anforderungen bezüglich des Umweltschutzes in der chemischen Industrie gibt Pohle [105].
- Politische Zielsetzungen: Viele Anlagen der chemischen Industrie laufen Jahrzehnte lang. Das Einbeziehen von langfristigen politischen Zielsetzungen, die sich in Gesetzen oder Verordnungen andeuten, wie z. B. „Vorrang hat die besser umwelt-

verträgliche Verwertungsart“ im Kreislaufwirtschaftsgesetz (KrW-/AbfG vom 27.9.1994, § 6 Abs. 1, [73]) oder der „Schutz von ökologisch vorteilhaften [...] Verpackungen“ in der Verpackungsverordnung (VerpackV vom 21.8.1998, § 9, [148]), bringt den Unternehmen Planungssicherheit. Im Zweifelsfall wird von den Unternehmen gefordert, die Umweltverträglichkeit bzw. die ökologische Vorteilhaftigkeit zu belegen.

Die wichtigsten Ansätze zur Analyse von Umweltauswirkungen werden im Folgenden kurz beschrieben.

Ökobilanz

Die Ökobilanz ist eine Methode zur Analyse und Bewertung von Umweltauswirkungen von Produkten, Verfahren und Dienstleistungen. Dabei soll als Systemraum möglichst der gesamte Lebenszyklus des untersuchten Systems betrachtet werden. Ökobilanzen sind international genormt durch die Normenreihe EN ISO 14.040 ff. Detaillierte Beschreibungen der Methodik und der praktischen Umsetzung der Methodik sind z. B. in [25][41][58] [62][128] zu finden. Da die Ökobilanz eine grundlegende Methode für den weiteren Verlauf dieser Arbeit ist, werden die wichtigsten Punkte kurz dargestellt. Die Norm EN ISO 14.040 [95] beschreibt die verschiedenen Schritte und die Anwendungsmöglichkeiten einer Ökobilanz (Abbildung 2.4).

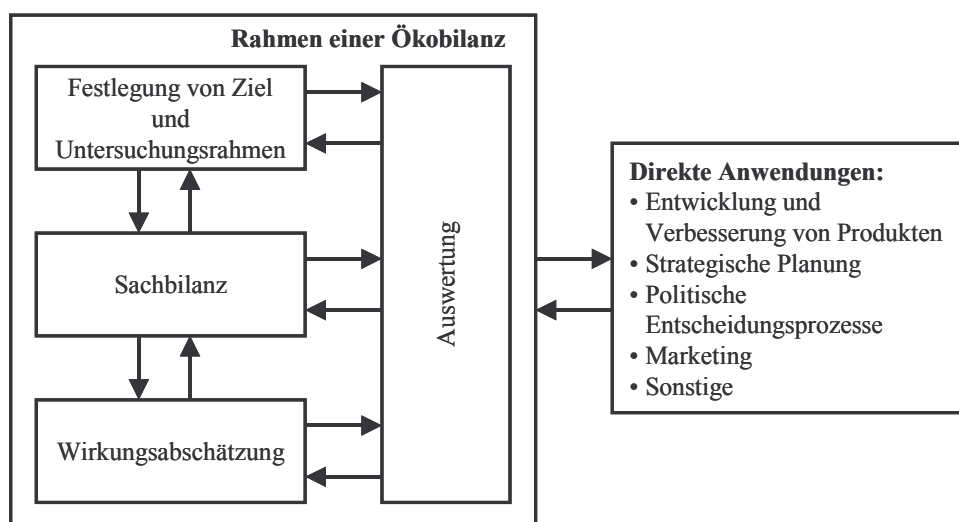


Abbildung 2.4: Bestandteile und Anwendungsmöglichkeiten von Ökobilanzen [95]

Bei der *Festlegung des Ziels und des Untersuchungsrahmens* [96] der Ökobilanz-Studie werden das Erkenntnisinteresse, die funktionelle Einheit und die Systemgrenzen definiert. Funktionelle Einheit ist meist das Produkt, Systemraum möglichst der gesamte Produktlebenszyklus (Produktökobilanz). Hier liegt ein wichtiger Unterschied zur technischen und ökonomischen Analyse, in denen meist der Systemraum Anlage betrachtet wird. Um die

Anwendung der Ökobilanz in Unternehmen und ihre Verwendung in unternehmensbezogenen Umweltmanagementsystemen zu erleichtern, werden auch Ökobilanzen mit dem Systemraum Unternehmen durchgeführt (betriebliche Ökobilanz).

Das System wird mit Funktionsmodellen und Strukturmodellen abgebildet. Oft tritt der Fall auf, dass ein nicht weiter unterteilbarer Verfahrensschritt mehrere Produkte hervorbringt (Multifunktionsverfahren), von denen nur eines im Modell benötigt wird. Für diesen Fall kann entweder das System um die Koppelprodukte erweitert werden (Systemraumerweiterung) oder die Inputs und Outputs des Verfahrensschrittes werden den einzelnen Produkten nach einem Verteilungsschlüssel zugeordnet (Allokation). Für eine ausführliche Darstellung der Behandlung von Multifunktionsverfahren in der Ökobilanz wird auf Ekvall [33] verwiesen.

Das geschaffene Systemmodell wird benutzt, um in einer Stoffstromanalyse, *Sachbilanz* [96] genannt, alle Stoff- und Energieströme quantitativ zusammenzustellen, die in das System eintreten oder es verlassen (Elementarflüsse). Für die meisten Systeme sind die Systemräume recht umfangreich, und die Ökobilanz wird erst durch den Einsatz von Computerprogrammen handhabbar. Es gibt verschiedene Varianten von Computerprogrammen zur Ökobilanzierung, die meistverwendeten sind GaBi [67], SimaPro [106], TEAM [107] und UMBERTO [68].

Diejenigen Flüsse, die als *Elementarflüsse* dem System direkt aus der Umwelt zugeführt werden oder direkt in die Umwelt abgeführt werden (Ressourcen, Emissionen, z. B. Emission von CH₄ in Luft), sind im weiteren Verlauf einer Ökobilanz von besonderem Interesse, denn die Elementarflüsse sind es, die in der *Wirkungsabschätzung* [97] auf ihre potentiellen Umweltauswirkungen hin untersucht werden. Für die in der Festlegung des Ziels und des Untersuchungsrahmens ausgewählten Wirkungsendpunkte („end-point“-Indikatoren, z. B. Klimaveränderung) werden in der Wirkungsabschätzung Umweltwirkungskategorien („mid-point“-Indikatoren, z. B. das Treibhauspotential zur Beschreibung der Klimaveränderung) festgelegt. Die Elementarflüsse werden im Schritt der Klassifizierung einem oder mehreren der Umweltwirkungskategorien qualitativ zugeordnet. Die anschließende Charakterisierung beschreibt die Wirkung der Elementarflüsse auf die jeweiligen Umweltwirkungskategorien quantitativ in Bezug auf eine für die Kategorie charakteristische Referenzsubstanz (z. B. wird 1 kg CH₄-Emission in Luft dem Treibhauspotential zugeordnet und entspricht in dieser Kategorie dem Äquivalent von 21 kg CO₂-Emission in Luft [20]). Die Wirkungsabschätzung dient zur Verdichtung der Sachbilanzergebnisse auf ein interpretierbares Maß von wenigen Kennzahlen, von denen jede eine Umweltwirkungskategorie quantitativ darstellt.

Die *Auswertung* [98] hat das Ziel, die Ergebnisse von Sachbilanz und Wirkungsabschätzung zusammenzufassen und zu interpretieren. Die angewandten Methoden gehören im Problemlösungsprozess zum Schritt der Bewertung und werden in Kapitel 2.6.2 beschrieben.

Abbildung 2.5 gibt eine zusammenfassende Darstellung der Ökobilanz als Abfolge von Modellbildung und Analyse. Zunächst werden in einem Modell über den Systemraum alle

Stoffe und Energien abgebildet (möglichst über den gesamten Produktlebenszyklus). Dabei werden alle Verfahren der Wertschöpfungskette einbezogen, der Analyseschritt „Sachbilanz“ bildet die Summe aller im Systemraum auftretenden Elementarflüsse. Die Elementarflüsse werden in einem weiteren Schritt der Analyse zu Umweltproblemfeldern zugeordnet und in ihrer Wirkung auf die Umweltproblemfelder charakterisiert.

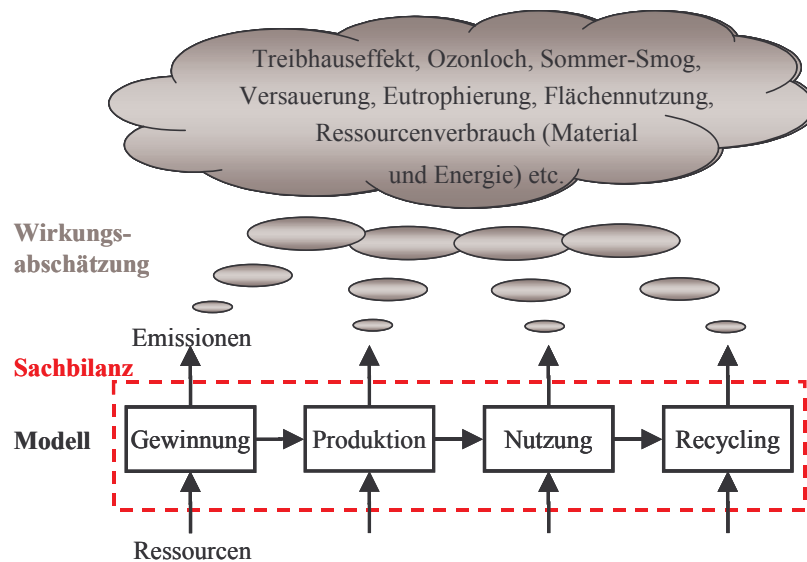


Abbildung 2.5: Vereinfachte Darstellung der Ökobilanz als Abfolge von Modellbildung und Analyse (Sachbilanz und Wirkungsabschätzung)

Der Einsatz der Ökobilanz in frühen Planungsphasen der Produkt- und Verfahrensentwicklung wurde schon im Jahr 1993 angedacht [26], jedoch aus Datenmangel nicht angewendet. Erneutes Interesse an diesem Thema entstand erst einige Jahre später, als 1998 Software für Ökobilanzen erstmals mit umfangreichen Datenbanken zur Verfügung stand. Gediga et al. [49] und Saur et al. [118] beschreiben den Einsatz der Ökobilanz als Werkzeug für Produktentwickler, für das Ökodesign (DfE), ohne jedoch konkrete Handlungsempfehlungen für den Fall zu geben, dass die vorhandenen Datenbanken den Datenbedarf für ein konkretes Produkt nicht decken. Der in frühen Planungsphasen betrachtete Systemraum beschränkt sich meist auf die Herstellung des Produktes, Daten zur Nutzungsphase und dem Lebensende des Produktes sind oft noch so spekulativ, dass sie keine geeignete Grundlage zur Entscheidungsunterstützung bilden. Es besteht dadurch aber die Gefahr, ökologische Probleme nicht zu lösen, sondern in eine andere Phase des Produktlebenszyklus zu verlagern.

Die größte Schwäche der Methode Ökobilanz für den Einsatz in frühen Phasen der Verfahrensentwicklung ist sicher die Datenverfügbarkeit. Als weitere Schwächen werden die mangelnde Integration in die Verfahrensentwicklung und die Schwierigkeit der Interpretation für Entscheider genannt, die keine Experten für Ökobilanzen sind [27].

Vereinfachte Ökobilanzen

Um die Komplexität der Ökobilanz zu vermindern, ohne das grundsätzliche Konzept der Betrachtung von Elementarflüssen über den gesamten Produktlebenszyklus zu verändern, wurden vereinfachte Ökobilanzmethoden wie z. B. „Material Input per Service Unit“ (MIPS) und „Kumulierter Energieaufwand“ (KEA) entwickelt. Beim MIPS-Konzept wird das gesamte Modell der Stoff- und Energieströme in Massenflüsse umgerechnet [122], bei KEA sind es allein die Energien, die betrachtet werden [145]. Beide Methoden verringern den Aufwand zur Datenerhebung und Interpretation, indem sie sich auf jeweils eine Dimension möglicher Umweltauswirkungen beschränken.

Subjektive Beurteilungsmethoden

Subjektive Beurteilungsmethoden finden für die Prognose von Umweltauswirkungen ihren Ausdruck vor allem in „Daumenregeln“ und Checklisten von Experten. Teilweise beziehen diese Checklisten den gesamten Produktlebenszyklus unter Bezug auf durchgeführte Ökobilanzen ein (z. B. [80] für die Auswahl möglicher nachwachsender Rohstoffe für die chemische Industrie).

Kennzahlenmethoden

Zur Überwindung der Schwierigkeiten, die mit der Verwendung von Ökobilanzen in der Produkt- und Verfahrensentwicklung assoziiert werden, können verschiedene Arten von Kennzahlenmethoden verwendet werden [27] (siehe Abbildung 2.6):

- Kennzahlen für durchschnittliche Umweltauswirkungen von bestimmten Gruppen von Materialien oder Verfahren
- Kennzahlen auf der Ebene der technischen Einflussgrößen
- Kennzahlen, die auf der Basis der Regressionsanalyse den Zusammenhang von technischer Einflussgröße und Umweltwirkung beschreiben

Diese Prognosemethoden werden momentan vor allem im Bereich des Öko-Designs (DfE) von Produkten aus dem Bereich der Elektronikindustrie und des Maschinenbaus angewendet, um das Datenproblem der Ökobilanz bei verschiedenen alternativen Konstruktionen zu lösen. Die methodischen Unterschiede der verschiedenen Kennzahlenmethoden zur ökologischen Analyse im Vergleich zur Ökobilanz sind in Abbildung 2.6 schematisch dargestellt.

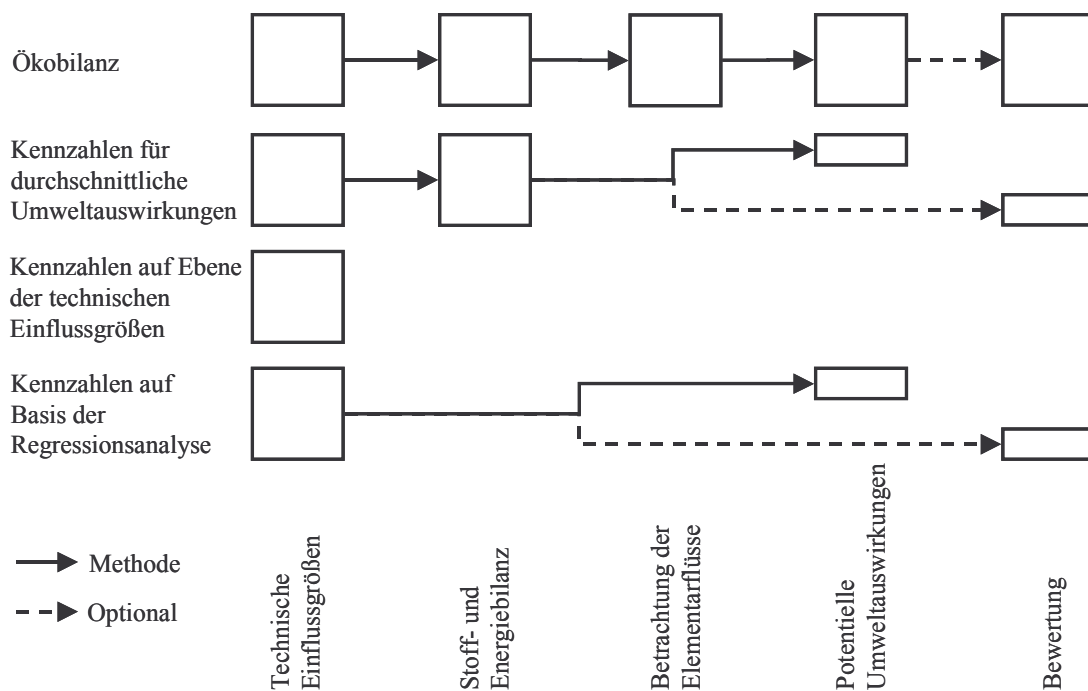


Abbildung 2.6: Schematische Darstellung der methodischen Unterschiede verschiedener Kennzahlenmethoden zur ökologischen Analyse im Vergleich zur Ökobilanz, nach [27]

Kennzahlen für durchschnittliche Umweltauswirkungen von Materialien oder Verfahren kommen zum Einsatz, wenn die Umweltauswirkungen von relativ komplexen Produkten, die aus vielen Einzelteilen oder Materialien bestehen, bestimmt werden sollen. Aus der Materialzusammensetzung des Produktes lassen sich über durchschnittliche Umweltauswirkungen der einzelnen Materialien (Öko-Profile der Materialien) erste Aussagen bezüglich der Umweltfreundlichkeit ableiten. Beispiele für die Verwendung dieser Art von Kennzahlen in der Produktentwicklung sind Materialauswahl-Computerprogramme wie IDEMAT [112] oder EUROMAT [45].

Kennzahlen auf der Ebene der technischen Einflussgrößen (z. B. Recyclingquoten) sind für die ökologische Analyse wenig geeignet. Sie treffen keinerlei Aussagen über potentielle Umweltwirkungen. Die Auswahl der Kennzahlen ist subjektiv, eine Zuordnung der Kennzahlen zu Schutzgütern oder Umweltproblemfeldern erfolgt nicht. Trotzdem werden diese Kennzahlen in frühen Planungsphasen verwendet, denn sie operieren direkt mit technischen Einflussgrößen und verlangen nur minimalen Aufwand zur Bereitstellung von Informationen. Kennzahlensysteme, die direkt auf die Vorstudie der Verfahrensentwicklung bei chemischen Anlagen abzielen, sind von Eissen und Metzger [31][32] und Biwer [17] publiziert. Breiter angelegte Kennzahlensysteme der Global Reporting Initiative [53] und der EU [34] sind für den Gebrauch in Umweltmanagementsystemen entwickelt worden und bieten eine Zuordnung der Kennzahlen zu Umweltproblemfeldern, geben aber keine Informationen über die Relevanz der Kennzahlen in Bezug auf die Umweltproblemfelder.

Kennzahlen, die auf der Basis der Regressionsanalyse den Zusammenhang von technischer Einflussgröße und Umweltwirkung beschreiben, nutzen Kennzahlen auf der Ebene der technischen Einflussgrößen und beschreiben deren Auswirkungen auf Umweltproblemfelder. Die Relationen zwischen technischen Einflussgrößen und Umweltwirkungen werden durch Regressionsanalysen aus einer möglichst großen Zahl ähnlicher Projekte bestimmt, bei denen eine Ökobilanz den Zusammenhang zwischen Einflussgröße und potentieller Umweltauswirkung hergestellt hat.

Meinders veröffentlichte ein kennzahlengestütztes Checklistsensystem auf der Basis von Regressionsanalysen für die Elektronikindustrie [86], Duflou et al. entwickelten ein Kennzahlensystem für den Maschinenbau [28][30]. Elektronikindustrie und Maschinenbau haben gemeinsam, dass sie sich auf einen Fundus von grundlegenden Konstruktionselementen stützen, der in der Produktentwicklung immer wieder aufgegriffen und auf die spezielle Aufgabe angepasst wird.

Geisler beschreibt eine Methode zur Abschätzung von Umweltauswirkungen auf Sachbilanzebene für chemische Verfahren zur Herstellung von Feinchemikalien in späteren Phasen der Verfahrensentwicklung [50][51]. Der Fokus dieser Arbeit ist mit der vorliegenden Arbeit nicht direkt vergleichbar, denn in späteren Phasen der Verfahrensentwicklung ist das Verfahren bereits weitgehend bekannt und die Problematik besteht darin, die zur Herstellung benötigten Stoffströme abzuschätzen. Über die benötigten Stoffe liegen für Feinchemikalien oft keine Ergebnisse von durchgeführten Ökobilanzen vor.

Für die Umsetzung in der Praxis werden Kennzahlensysteme auf Basis von durchschnittlichen Umweltauswirkungen oder Regressionsanalysen meist ohne explizite Darstellung der potentiellen Umweltauswirkungen verwendet. Es werden direkt bewertete Ergebnisse wie der Eco-Indicator [56] ausgegeben. Dies beruht auf der Ausrichtung dieser Kennzahlensysteme auf die Elektronikindustrie und den Maschinenbau, in denen die Produktentwicklung meist von Konstrukteuren ohne Expertenwissen im Umweltbereich und unter hoher Arbeitsteilung durchgeführt wird.

Adaptionsmethoden

Auch Adaptionsmethoden für die Prognose von ökologischen Auswirkungen sind bekannt. Das Computerprogramm LEADS z. B. sucht anhand von Materialzusammensetzung und Zusammensetzung des Produkts aus typischen Bauteilen ein möglichst ähnliches Produkt der Elektronikindustrie, für das eine Ökobilanz existiert [116].

Fehlerrechnung durch stochastische Methoden

Nachdem das betrachtete System für die Ökobilanz in einem (Software-)Modell beschrieben worden ist, steht das Modell auch zur Fehlerrechnung zur Verfügung. Für eine angenommene Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eingangsinformationen beschreibt die Monte Carlo-

Simulation bei einer genügend großen Anzahl von Läufen die Wahrscheinlichkeitsfunktion des Gesamtsystems für zufällige Fehler exakt [22]. Die Monte Carlo-Simulation ist in verschiedenen Computerprogrammen zur Ökobilanzierung möglich [67][106]. Es wird eine Normalverteilung der Wahrscheinlichkeitsfunktion für die in das System eintretenden Informationen angenommen [157].

Umweltverträglichkeitsprüfung

Die Umweltverträglichkeitsprüfung (UVP) ist keine Methodik im eigentlichen Sinne, sondern ein Instrument bei der behördlichen Genehmigung bestimmter Bauvorhaben (wie z. B. bestimmter chemischer Anlagen), das viele methodische Hilfsmittel umfassen kann [48]. Der Gebrauch von einzelnen Methoden ist nicht festgelegt und hängt von ihrer Eignung für den speziellen Anwendungsfall ab.

Die UVP ist vom Ansatz her sehr breit und umfasst die Schutzgüter Boden, Wasser, Luft, Ökosysteme, Landschaftsbild, Mensch und Kulturgüter. Die Umsetzung der UVP ist stark auf den Standort der Anlage hin ausgerichtet (Systemraum Standort) und verlangt einen Detailreichtum an Informationen, der in frühen Phasen der Verfahrensentwicklung noch nicht gegeben ist. Eine UVP ist üblicherweise umfangreich und wird erst dann von Unternehmen in Auftrag gegeben, wenn die Entscheidung für die Realisierung eines Verfahrens bereits getroffen ist und die Errichtung der Anlage an einem bestimmten Standort behördlich genehmigt werden muss. Sie wird im Folgenden nicht weiter betrachtet.

Zusammenfassung

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass viele ökologische Prognosemethoden sich auf durchgeführte Ökobilanzen stützen, um einen Zusammenhang zwischen technischen Einflussgrößen und potentiellen Umweltauswirkungen herzustellen. Durch diesen Rückgriff auf die Ökobilanz kann auch von den einfach durchzuführenden Methoden der Systemraum Produktlebenszyklus adressiert werden. Prognosemethoden ohne die methodische Grundlage Ökobilanz leiden regelmäßig unter einem Erklärungsnotstand bezüglich der Auswahl ihrer Kennzahlen und der Relevanz der Kennzahlen für die Umweltproblemfelder.

2.6 Bewertung

Die Bewertung als Schritt im Problemlösungszyklus stellt die Verbindung zwischen der möglichst objektiven Analyse und dem subjektiven Schritt der Entscheidung her. Sie verlässt also den Boden der Objektivität, subjektive Wertvorstellungen fließen in die Bewertung ein. Die Bewertung ist zur Vorbereitung der Entscheidung unerlässlich, um die zugrunde liegenden Wertvorstellungen transparent zu machen und auf strukturierte Weise in die Entscheidung einzubinden. Die in dieser Arbeit entwickelte Methode zur Analyse von Umweltauswirkungen muss mit einer der Bewertungsmethoden kompatibel sein.

2.6.1 Technische und ökonomische Bewertung

Die technische Bewertung von Lösungsvarianten findet in vielen Fällen nicht statt. Wenn alle Lösungsvarianten das Pflichtenheft in ähnlichem Maß erfüllen und eine ökonomische bzw. ökologische Bewertung vorhanden ist, wird sie nicht benötigt.

Die Prognose von wirtschaftlichen und ökologischen Auswirkungen ist jedoch mit Arbeitsaufwand verbunden, daher wird manchmal bei Verfahren mit dominanten Energiekosten eine thermodynamische Bewertung vorgenommen, um diesen Aufwand zu sparen. In der Regel wird die Exergie als thermodynamische Zustandsgröße zur Bewertung herangezogen [18] und über eine Exergiebilanz (Gleichung 2.5) bestimmt.

Bei unterschiedlichem Erfüllungsgrad des Pflichtenheftes, oder wenn technische Eigenschaften der Lösungsvarianten nicht oder nicht früh genug in Kosten oder Umweltauswirkungen ausgedrückt werden können (Sicherheit, Zuverlässigkeit etc.), muss man auf Methoden zurückgreifen, die verschiedene technische Eigenschaften quantitativer wie qualitativer Natur bewerten können. Die bekannteste ist die Nutzwertanalyse, bei der die unabhängigen Eigenschaften des Systems mit Bewertungsfaktoren unterschiedlich gewichteten Teilzielen zugeordnet werden. Die Nutzwertanalyse hat eine Vielzahl von Varianten und ist z. B. in [153][162] beschrieben.

Die ökonomische Analyse hat im Vergleich zur technischen oder ökologischen Analyse den Vorteil, dass nahezu alle Eigenschaften des Systems als Kosten oder Erlöse in einer Währungseinheit (wertmäßiger Kostenbegriff) ausgedrückt werden können. Die ökonomische Bewertung wird dadurch wesentlich erleichtert. In Kapitel 2.5.2 ist bezüglich der ökonomischen Analyse nur von der zeitunabhängigen Prognose der Betriebskosten die Rede. Dies impliziert, dass die Produkte der verschiedenen Lösungsvarianten bezüglich ihrer Erlöse gleichwertig sind und dass die Kosten und Erlöse zeitunabhängig gleich bewertet werden. Bei Lösungsvarianten mit unterschiedlichen Erlösen (z. B. bei verschiedenen Produktqualitäten) sind nicht die Kosten sondern der erzielbare Gewinn zu bewerten. Und bei signifikanten zeitlichen Veränderungen von Kosten und Erlösen sind die mit Durchschnittswerten über die Lebensdauer der Anlage gebildeten einperiodischen Methoden wie Kostenvergleich und Gewinnvergleich durch mehrperiodische oder dynamische Methoden zu ersetzen, die den Zeitpunkt von Geldflüssen bewerten.

Die ökonomische Bewertung ist nicht Gegenstand dieser Arbeit und wird daher nicht weiter vertieft. Weiterführende und auf die Bedürfnisse der Chemieindustrie zugeschnittene Informationen findet man z. B. in [1][12][61][71][125].

2.6.2 Ökologische Bewertung

Für die ökologische Bewertung sind verschiedene Methoden eingeführt. Saur zählt in [119] einige Methoden auf und beschreibt ihre Eignung anhand eines Kriterienkataloges. Die Norm EN ISO 14.043 zur Auswertung von Ökobilanzen [98] schreibt keine dieser Methoden vor, sondern verlangt nur die kritische Diskussion der gewählten Methode. Es wird hier nicht auf die Methoden zur ökologischen Bewertung eingegangen, sondern nur die „Environmental-Theme-Methode“ kurz vorgestellt. Saur stellt fest, „dass die ökologische Bewertung [mit dieser Methode] am besten realisiert werden kann“ [119] und hebt ihre internationale Akzeptanz hervor.

Den Einstieg in die „Environmental-Theme-Methode“ zur ökologischen Bewertung hat die ökologische Analyse der Ökobilanz bereits vorgezeichnet. Elementarflüsse der Sachbilanz werden Umweltproblemfeldern qualitativ zugeordnet, um anschließend die potentiellen Umweltauswirkungen je Elementarfluss zu quantifizieren (vergleiche Kapitel 2.5.3). Die so entstandenen Kennzahlen (je eine pro Umweltproblemfeld) müssen bei der Bewertung noch untereinander gewichtet werden, um zu einem ökologischen Einzelwert-Indikator zu kommen. Dies gelingt besser, wenn die Kennzahlen vor der Bewertung normiert werden. „Dies geschieht durch die Ermittlung der speziellen Bedeutung [der Kennzahlen] im Gesamtkomplex, wie z. B. durch Inbezugsetzung zur weltweiten Gesamtbelastung oder die pro Kopf-Beiträge in der nationalen Volkswirtschaft. [...] Im letzten Schritt, der Bewertung, wird die wechselseitige Einstufung der ausgewählten Problemfelder und der hierfür kalkulierten Einzelbeträge vor dem Hintergrund der zuvor erfolgten Normierung vorgenommen. Dieser Schritt ist eine subjektive Priorisierung der Einzelergebnisse“ [119].

Für die Bewertung können die im Umweltmanagementsystem des Unternehmens aufgestellten ökologischen Unternehmensziele oder Meinungsumfragen bei den am Unternehmen interessierten Kreisen als Anhaltspunkt dienen. Firmeneigene Bewertungsschlüssel zur ökologischen Bewertung (und teilweise auch zur dimensionsübergreifenden Bewertung) sind im Bereich der Chemieindustrie z. B. von den Firmen BASF [117], BAYER [13] und DOW [47] publiziert. Ferner existieren unternehmensunabhängige Bewertungsschlüssel von Expertengremien [37][56][135].

2.6.3 Dimensionsübergreifende Bewertung

Neben der Bewertung der einzelnen Dimensionen wird in manchen Fällen eine dimensionsübergreifende quantitative Bewertung durchgeführt, um die der Entscheidung zugrunde liegenden Wertvorstellungen transparent zu machen.

Die Nutzwertanalyse wurde schon bei der technischen und ökologischen Bewertung genannt und eignet sich ebenfalls für dimensionsübergreifende Bewertungen. „Es ist [allerdings] häufig nicht wünschenswert, eine einzelne, hochaggregierte Nutzwertdarstellung anzustreben,

da dadurch ein zu hoher Verdichtungsgrad von Detailinformationen entsteht, der keine Rückschlüsse auf Einzelcharakteristika zulässt. Zur Erhöhung der Transparenz und der Glaubwürdigkeit der Vorgehensweise werden mehrere spezifische Kennwerte für getrennte Analysegebiete gebildet und diese gegeneinander abgewogen“ [46]. Aus der Betriebswirtschaftslehre ist diese Art von grafischer Zusammenschau der Einzelergebnisse als Portfolio-Analyse bekannt. Die Portfolio-Analyse zur dimensionsübergreifenden Bewertung von Technik, Ökonomie und Ökologie wurde z. B. von Eyerer et al. angewendet [41][119]. Eine Portfolio-Analyse zur Bewertung der Dimensionen Ökonomie und Ökologie ist die Ökoeffizienz-Analyse [117].

Eine andere Methode zur dimensionsübergreifenden Bewertung ist die Monetarisierung. Hierbei werden ökologische bzw. technische Eigenschaften des Systems in Währungseinheiten ausgedrückt. Dem Produktlebenszyklusgedanken folgend werden auch solche Kosten mit einbezogen, die das Unternehmen als Auftraggeber der Verfahrensentwicklung gar nicht bezahlen muss, weil ein anderer in der Wertschöpfungskette oder die Gesellschaft sie trägt (Internalisierung externer Kosten). Eine Integration der Monetarisierung von Umweltauswirkungen in die Systematik der Ökobilanzierung ist z. B. von Franzeck beschrieben [46].

Alle Varianten der Monetarisierung werden von Bartmann [9] kritisiert, weil sie mit großen Unsicherheiten verbunden sind und die Wertvorstellungen, die mit der Monetarisierung verbunden sind, nicht explizit dargestellt werden. Die Internalisierung externer Kosten ist zudem als Entscheidungsgrundlage für ein Unternehmen recht theoretisch, da das Unternehmen die externen Kosten nicht selbst tragen muss. Sie wird daher eher als Instrument zur volkswirtschaftlichen Bewertung verstanden und nicht zur unternehmensinternen Bewertung von Produkt- oder Verfahrensalternativen [9].

3 Kritik bestehender Analysemethoden

In Kapitel 3 erfolgt die Kritik der in Kapitel 2.5 vorgestellten Methoden zur Analyse bezüglich ihrer Eignung für die Dimension Ökologie und die Vorstudie der Verfahrensentwicklung bei chemischen Anlagen. Die Analysemethoden müssen mit den am Ende der Vorstudie vorhandenen Informationen über die synthetisierten Lösungsvarianten auskommen. Die aufbereiteten Lösungsvarianten müssen die passenden Informationen zur weiteren ökologischen und dimensions-übergreifenden Bewertung liefern.

3.1 Anforderungen an die Analysemethoden

Die Methoden zur Analyse lassen sich bezüglich ihrer Anforderungen an Ressourcen (Informationen, materielle Ressourcen, personelle Ressourcen), der Art ihrer Durchführung und der Qualität ihres Ergebnisses charakterisieren [123]. Die Anforderungen für die Anwendung in der Vorstudie zur Verfahrensentwicklung werden im Folgenden herausgearbeitet:

- Benötigte Informationen
 - Die Verfügbarkeit der Informationen (vorhanden, beschaffbar, nicht beschaffbar) ist ein wesentliches Kriterium.
 - Die Art der Informationen (z. B. Messwert) ist unerheblich, auch subjektives Expertenwissen soll einbezogen werden.
 - Die Qualität der Information nach Gehalt (Genauigkeit), Sicherheit (Eintrittswahrscheinlichkeit) und Aktualität sind wichtig; die Vollständigkeit (bzw. Relevanz) ist für die Eingangsinformationen ein sekundäres Kriterium, es kommt vielmehr auf die Vollständigkeit und Relevanz des Ergebnisses an.
 - Die Quantität der Information nach Anzahl der Variablen oder der Anzahl der Datensätze (evtl. große Zahl von Varianten) wird durch den Einsatz von EDV unerheblich.
 - Die Häufigkeit des Zugriffs zur Information ist bei EDV-gestützten Methoden unerheblich.
- Materielle Ressourcen
 - Aufwendungen für materielle Ressourcen wie Computer sind im Vergleich zu den Aufwendungen zur Informationsbeschaffung unerheblich.
- Personelle Ressourcen
 - Die Komplexität des Verfahrens bestimmt die notwendige Qualifikation der Bearbeiter. Verfahren mit hohen Anforderungen an den Bearbeiter sind fehlergefährlich, wenn die Anforderungen nicht erfüllt werden können.
 - Der zeitliche Aufwand zur Bearbeitung ist bei der Bearbeitung von vielen möglichen Lösungsvarianten ein entscheidender Kostenfaktor.

- Durchführung der Methode
 - Die Schnelligkeit der Durchführung ist durch den Einsatz von EDV für alle Methoden gesichert und damit unerheblich.
 - Die Benutzerfreundlichkeit ist wichtig und sollte hoch sein (strukturiert, nur so viele Ergebniszahlen wie notwendig). Es ergibt sich bei diesem Kriterium eine Überschneidung mit den Anforderungen an die Qualifikation der Bearbeiter.
 - Die Flexibilität der Methode ist wegen des Neuheitscharakters der Verfahrensentwicklung wichtig.
 - Die Möglichkeit, die Methode modular zu bearbeiten, ist wegen der hohen Komplexität von verfahrenstechnischen Anlagen wichtig.
 - Mögliche Redundanzen in der Datenhaltung sind beim Einsatz von EDV unwichtig.
 - Eine Eindeutigkeit der Zuordnung von Eingangsinformationen zu Ausgangsinformationen kann im vorliegenden Fall nicht gefordert werden, denn dies würde die Flexibilität zu stark beeinträchtigen.
- Qualität des Ergebnisses
 - Die Art des Ergebnisses ist wichtig, denn es soll an bestehende Methoden zur Bewertung angebunden werden.
 - Die Vollständigkeit und Relevanz des Ergebnisses ist entscheidend.
 - Aktualität ist für Ergebnisse kein sinnvolles Kriterium, alle gerade errechneten Ergebnisse sind per se aktuell.
 - Der Gehalt (die Genauigkeit) des Ergebnisses, ausgedrückt in Reliabilität (robust gegen zufällige Störgrößen) und Validität (robust gegen systematische Fehler) ist wichtig.
 - Die Sicherheit (Eintrittswahrscheinlichkeit) des Ergebnisses ist eine wichtige Information.
 - Das Ergebnis muss unternehmensintern interpretierbar und transparent sein.

Aus den genannten Anforderungen ergibt sich eine Matrix zur Bewertung der bestehenden Methoden im folgenden Kapitel.

3.2 Bewertung bestehender Analysemethoden

Im Folgenden werden die bestehenden ökonomischen und ökologischen Ansätze hinsichtlich ihrer Eignung für die Prognose von Umweltauswirkungen in der Vorstudie der Verfahrensentwicklung anhand der im vorigen Kapitel aufgestellten Kriterien bewertet. Eine Übersicht gibt Tabelle 3.1, dabei bedeutet:

+ → geeignet 0 → bedingt geeignet - → nicht geeignet

Tabelle 3.1: Bewertung der Analyseverfahren auf ihre Eignung für die Prognose von Umweltauswirkungen in der Vorstudie der Verfahrensentwicklung

	Ökobilanz	Vereinfachte Ökobilanzen (MIPS/KEA)	Subjektive Beurteilungsmethoden	Kennzahlenmethoden aus durchschn. Umweltauswirkungen	Kennzahlenmethoden aus technischen Einflussgrößen	Kennzahlenmethoden aus Regressionen (Gleichungsmethoden)	Verhältnismethoden	Adaptionsmethoden	Subjektive stochastische Methoden
Ressourcen									
Qualität der Informationen	-	-	+	0	0	0	0	0	+
Verfügbarkeit der Informationen	-	-	+	+	+	+	+	+	+
Qualifikation der Bearbeiter	-	-	-	+	+	+	+	+	-
Zeitlicher Aufwand	-	-	+	+	+	+	+	+	+
Durchführung									
Flexibilität	+	+	+	-	-	-	-	0	+
Modularität	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Ergebnis									
Art	+	+	+	+	-	+	+	+	0
Vollständigkeit/Relevanz	+	-	-	0	-	0	0	0	-
Gehalt	+	+	-	0	0	0/+	0	0	-
Sicherheit	-	-	-	-	-	-	-	-	+
Transparenz	+	+	-	0	0	0	0	0	-

Tabelle 3.1 zeigt, dass die optimale Methode zur Prognose von Umweltauswirkungen in der Vorstudie zur Verfahrensentwicklung bei chemischen Anlagen nicht existiert. Eine Kombination verschiedener Verfahren wäre geeignet, um alle Anforderungen zu erfüllen.

Ökobilanz

Die größte Schwäche der Methode Ökobilanz für den Einsatz in frühen Phasen der Verfahrensentwicklung ist sicher die Datenverfügbarkeit. Die Anforderungen an die Qualität der Daten sind hoch, und die Verfügbarkeit dieser Daten in frühen Phasen der Verfahrensentwicklung ist nicht gegeben. Zudem sind die Anforderungen an die Qualifikation der Bearbeiter und der Zeitaufwand zur Durchführung der Methode hoch.

Dem steht die hervorragende Eignung der Ökobilanz bezüglich der Durchführung der Methode und der Qualität des Ergebnisses gegenüber. Aussagen bezüglich der Sicherheit des Ergebnisses lassen sich durch eine Kombination der Ökobilanz mit subjektiven stochastischen Methoden, wie der Monte Carlo-Simulation, erreichen. Eine Kombination von geeigneten Methoden zur Beschaffung der notwendigen Ressourcen (besonders der Informationen) mit der Ökobilanz ist geeignet, die Aufgabenstellung dieser Arbeit zu lösen.

Vereinfachte Ökobilanzen

Die vereinfachten Ökobilanzen wie z. B. MIPS oder KEA teilen die Nachteile der Ökobilanz bezüglich der Anforderungen an die Ressourcen. Die Beschränkung auf lediglich einen Aspekt der möglichen Umweltauswirkungen vereinfacht die Modellbildung und Analyse nicht wesentlich, schränkt aber die Qualität des Ergebnisses bezüglich Vollständigkeit bzw. Relevanz stark ein. Vereinfachte Ökobilanzen sind für die Anwendung in der Vorstudie der Verfahrensentwicklung daher nicht zielführend.

Subjektive Beurteilungsmethoden

Die subjektiven Beurteilungsmethoden sind hinsichtlich der Anforderungen an die Qualität und der Verfügbarkeit von Informationen bestens für die Prognose von Umweltauswirkungen in frühen Phasen der Verfahrensentwicklung geeignet. Die Qualifikation der Bearbeiter muss allerdings hoch sein („Experten“), denn von ihrem Wissen ist das Ergebnis direkt abhängig.

Die Flexibilität der subjektiven Beurteilungsmethoden ist ein Pluspunkt für ihre Anwendung in frühen Phasen der Verfahrensentwicklung. Sie sind auch in Fällen vollständig neu entwickelter Technologien oder im Fall von besonders ausgeprägtem Mangel an Informationen geeignet.

Die Qualität des Ergebnisses ist für die subjektiven Beurteilungsmethoden ein entscheidender Nachteil. Vollständigkeit und Gehalt der Ergebnisse können nicht sichergestellt und überprüft werden, denn die Transparenz der Ergebnisse ist ebenfalls gering.

Kennzahlenmethoden auf Basis von durchschnittlichen Umweltauswirkungen

Alle Kennzahlenmethoden haben ihre Stärke in Anwendungsfällen, in denen eine Anzahl ähnlicher Projekte zur Verfügung steht und bezüglich ihrer Umweltauswirkungen ausgewertet wurde. Die zur Durchführung der Methode benötigten Ressourcen sind sehr gering und die

Qualifikation der Bearbeiter muss nicht so hoch sein wie bei den subjektiven Beurteilungsmethoden. Dies schränkt die Flexibilität ein, denn für neue Technologien stehen keine ausgewerteten ähnlichen Projekte zur Verfügung. Bezüglich Vollständigkeit, Gehalt und Transparenz sind die Kennzahlenmethoden auf die ihnen zugrunde liegenden ähnlichen Projekte angewiesen und können nur eine mittlere Qualität erreichen.

Die Kennzahlenmethoden auf Basis von durchschnittlichen Umweltauswirkungen sind besonders geeignet für Lösungsvarianten, die aus bekannten Einzelteilen modular zusammengesetzt sind. Durch die Bildung von durchschnittlichen Kennzahlen für jedes Modul lassen sich die Umweltauswirkungen für das Gesamtsystem recht gut bestimmen. Nicht umsonst werden Kennzahlen auf Basis von durchschnittlichen Umweltauswirkungen erfolgreich für modular aufgebaute Produkte der Elektronikindustrie und des Maschinenbaus in der Produktentwicklung eingesetzt. Die Entwicklung chemischer Verfahren ist durch die Einteilung in Grundoperationen ebenfalls modular aufgebaut. Die Nutzung von Grundoperationen zur Bildung von Kennzahlen auf Basis durchschnittlicher Umweltauswirkungen erfolgt in Kapitel 4.8.

Kennzahlenmethoden auf Basis von technischen Einflussgrößen

Kennzahlen auf der Ebene der technischen Einflussgrößen treffen keinerlei Aussagen über potentielle Umweltwirkungen. Die Auswahl der Kennzahlen ist subjektiv, eine Zuordnung der Kennzahlen zu Schutzgütern oder Umweltproblembereichen erfolgt nicht. Ein vollständiges und für die weitere Bewertung geeignetes Ergebnis ist auf diese Weise nicht erreichbar. Da diese Kennzahlen zudem im Vergleich zu den anderen Kennzahlenmethoden keinen Vorteil bezüglich Verfügbarkeit von Ressourcen und Durchführung der Methode bieten, werden sie für die Lösung der Aufgabenstellung als nicht sinnvoll erachtet.

Kennzahlenmethoden auf Basis von Regressionen (Gleichungsmethoden)

Im Vergleich zu den Kennzahlenmethoden auf Basis von durchschnittlichen Umweltauswirkungen sind die Gleichungsmethoden etwas besser geeignet, um genaue Ergebnisse zu erzeugen. Durch die Möglichkeit zu nicht-linearen Regressionen oder Mehrfachregressionen lässt sie sich bei Vorhandensein einer genügenden Anzahl von ähnlichen Projekten ein mit der Ökobilanz vergleichbar genaues Ergebnis erzeugen.

Problematisch an Gleichungsmethoden ist die Festlegung der maßgeblichen Einflussgrößen. Für die Abschätzung von Umweltauswirkungen in der Verfahrensentwicklung sinnvolle Einflussgrößen werden in Kapitel 4.8 erarbeitet.

Verhältnismethoden

Die Verhältnismethoden teilen die Stärken und Schwächen der Kennzahlenmethoden, denn sie operieren mit Kennzahlen auf der Basis von Verhältnissen. Ob die Verhältnismethoden für

die Prognose von Umweltauswirkungen in der Verfahrensentwicklung bei chemischen Anlagen eine sinnvolle Ergänzung zu anderen Methoden sind, wird in Kapitel 4.8 untersucht.

Adaptionsmethoden

Adaptionsmethoden sind auf das Vorhandensein einer modular nutzbaren Datenbank von ähnlichen Projekten angewiesen. Diese existiert momentan für die Verfahrensentwicklung chemischer Anlagen nicht. Die Adaptionsmethoden werden darum in dieser Arbeit nicht weiter betrachtet. Sollten aber in der Zukunft verstärkt Informationen über bestehende Anlagen z. B. in einer unternehmensinternen Datenbank zugänglich sein, dann können die Adaptionsmethoden an die Seite der Kennzahlenmethoden treten. Die Adaptionsmethoden teilen die Stärken und Schwächen der Kennzahlenmethoden, sind aber flexibler. Es müssen keine Kennzahlen gebildet werden, die Projekte können direkt verglichen werden. Für gänzlich neue Technologien sind Adaptionsmethoden allerdings genauso wenig geeignet wie Kennzahlenmethoden.

Subjektive stochastische Methoden

Die subjektiven stochastischen Methoden sind als einzige in der Lage, Aussagen bezüglich der Eintrittswahrscheinlichkeit der Ergebnisse zu machen. Sie sollten daher in Kombination mit anderen Methoden zur Analyse als Ergänzung benutzt werden.

Zusammenfassung

- Die optimale Methode zur Prognose von Umweltauswirkungen in der Vorstudie zur Verfahrensentwicklung bei chemischen Anlagen existiert noch nicht. Eine Kombination verschiedener Verfahren wäre geeignet, um alle Anforderungen zu erfüllen.
- Vereinfachte Ökobilanzen und Kennzahlenmethoden auf Basis von technischen Einflussgrößen eignen sich nicht zur Lösung der Aufgabenstellung und werden nicht weiter betrachtet.
- Die Ökobilanz ist (mit Ausnahme der subjektiven Verfahren) die methodische Basis für alle geeigneten Prognoseverfahren.
- Einige Methoden wie die Kennzahlenmethoden auf der Basis von durchschnittlichen Umweltauswirkungen, Kennzahlenmethoden auf Basis von Regressionen und Verhältnismethoden sind in der Vorstudie zur Verfahrensentwicklung bei chemischen Anlagen noch nicht benutzt und auf die besonderen Randbedingungen angepasst worden.

Im folgenden Kapitel wird auf der Basis von Ökobilanzierung und Kennzahlenmethoden eine Methode zur Prognose von ökologischen Auswirkungen in der Vorstudie zur Verfahrensentwicklung bei chemischen Anlagen entwickelt.

4 Prognose von Umweltauswirkungen bei der Entwicklung chemischer Anlagen

Es erfolgt zunächst die Anpassung der Ökobilanzmethodik an die Erfordernisse der vorliegenden Problemstellung. Der Systemraum, die funktionelle Einheit und das Vorgehen bei Nebenprodukten werden festgelegt. Dann erfolgen notwendige Anpassungen der Systematik der Grundoperationen. Schließlich werden eine daraus abgeleitete Vorgehensweise zur Prognose und Kennzahlen zu ihrer Umsetzung dargestellt.

4.1 Wahl des Systemraums

Während bei technischen und ökonomischen Analysen der Verfahrensentwicklung der Systemraum „Verfahren“ bzw. „Anlage“ weitgehend feststeht, muss für die ökologische Analyse ein passender Systemraum erst festgelegt werden. Für Ökobilanzen ist nach EN ISO 14.041 [96] die Wahl des Systemraums nicht vorgeschrieben, er wird je nach Anwendungsfall festgelegt und begründet. Da als funktionelle Einheit bei Ökobilanzen meist ein Produkt (oder Service) betrachtet wird (*Produktökobilanz*), umfasst die Systemgrenze möglichst den gesamten Produktlebenszyklus (vergleiche Abbildung 1.2, Seite 15) und damit die gesamte Technosphäre.

Die Betrachtung des gesamten Produktlebenszyklus hat den Vorteil, dass keine Verlagerung von Umweltauswirkungen in andere Phasen des Produktlebens erfolgen kann. Damit können kaum Umweltprobleme auftreten, die nicht bereits in der Entscheidung für ein Herstellungsverfahren einbezogen wurden.

Nachteilig an der Betrachtung des gesamten Produktlebenszyklus als Systemraum ist der Aufwand für die Beschaffung und Verarbeitung der notwendigen Informationen. Nicht nur die direkten Lieferanten und Kunden des Unternehmens müssen zur Informationsgewinnung einbezogen werden, sondern die gesamte Wertschöpfungskette. Die Möglichkeiten zur Beeinflussung (und damit auch die Verantwortung) des Unternehmens sind allerdings außerhalb des eigenen Unternehmens nur begrenzt. Direkte Lieferanten und Kunden können nach Umweltgesichtspunkten ausgewählt werden (green purchasing), dies gelingt bei indirekten Lieferanten- oder Kundenbeziehungen meist nicht mehr.

Um die Anwendung der Ökobilanz in Unternehmen und ihre Verwendung in unternehmensbezogenen Umweltmanagement-Systemen zu erleichtern, werden Ökobilanzen auch mit dem Systemraum „Unternehmen“ durchgeführt (*betriebliche Ökobilanz*). Bei den betrieblichen Ökobilanzen tritt das Problem auf, dass die vom Unternehmen indirekt ausgelöst und möglicherweise wichtigen Umweltauswirkungen außerhalb des Unternehmens vernachlässigt werden [88]. Durch die (zufällige) Unternehmensstruktur wird das Ergebnis stark beeinflusst. Beispielsweise sind bei Unternehmen mit einer hohen Fertigungstiefe die direkt im

Unternehmen hervorgerufenen Umweltauswirkungen bei gleichen Verfahren höher als in Unternehmen mit geringer Fertigungstiefe. Für die Auswahl von Verfahrensalternativen ist der Systemraum Unternehmen folglich nicht geeignet.

Die Durchführung einer betrieblichen Ökobilanz mit dem Systemraum Unternehmen (*Kernbilanz*) und eine Erweiterung mit allen vom Unternehmen indirekt beeinflussbaren Umweltauswirkungen (*Komplementärbilanz*) kann das Problem lösen. Der Systemraum der Komplementärbilanz ist allerdings umstritten. Müller-Wenk und Braunschweig schlagen die Einbeziehung der Vorketten zur Energieversorgung und der Nachketten zur Abwasser- und Abfallbehandlung in die Komplementärbilanz vor [88], andere Autoren empfehlen die Berücksichtigung „aller relevanten“ Vor- und Nachketten [44][121]. Im Extremfall wird hier die gesamte Herstellungsphase der vom Unternehmen hergestellten Produkte einbezogen („cradle to gate“-Bilanz). Nutzungsphase und Lebensende der Produkte sind für gewöhnlich nicht Teil einer betrieblichen Ökobilanz. Auch bei einer Verwendung von Komplementärbilanzen ist die betriebliche Ökobilanz für die Verfahrensauswahl nicht geeignet. Durch den Fokus auf das Unternehmen werden alle vom Unternehmen hergestellten Produkte berücksichtigt, nicht nur die Produkte des fraglichen Verfahrens.

Die Überlegungen für die betriebliche Ökobilanz gelten in gleicher Weise für die Standortbilanz. Auch sie hängt von der (zufälligen) Struktur des Unternehmensstandortes ab, umfasst alle am Standort hergestellten Produkte und ist damit für die Verfahrensauswahl ungeeignet.

Die ökologische *Verfahrensbilanz* als Analogon zur technischen und ökonomischen Analyse umfasst als Systemraum nur das Verfahren selbst, also nur diejenigen Umweltauswirkungen, die direkt mit dem Verfahren zusammenhängen und direkt vom Unternehmen beeinflusst werden können. Die Verfahrensbilanz unterliegt nicht den Einflüssen der Struktur von Unternehmen bzw. Standort und sonstigen äußeren Einflüssen. Der Systemraum ist klein, der Aufwand zur Informationsbeschaffung daher gering.

Dem steht als Nachteil die geringe Aussagekraft des Ergebnisses zur Entscheidungsunterstützung gegenüber. Bezogen auf die Umweltauswirkungen der gesamten Wertschöpfungskette ist die Relevanz eines einzelnen Verfahrens naturgemäß klein. Als Beispiel mag hier die Polymerisation von Ethen zu Polyethylen (PE) dienen, bei der das direkt in der Anlage zur Polymerisation (Suspensionsverfahren im Rührkesselreaktor) verursachte Eutrophierungspotential (als Beispiel für eine Umweltauswirkung) nur bei ca. 10 % der gesamten Herstellungskette von PE liegt [67].

Die Wahl des Verfahrens legt aber andererseits einige der Vor- und Nachketten weitgehend fest und schränkt für weitere Vor- und Nachketten die möglichen Szenarien ein. Für das Beispiel Polymerisation von Ethen zu PE bedeutet dies z. B., dass das Suspensionsverfahren im Rührkesselreaktor in flüssiger Phase stattfindet, Prozesswasser und NaOH benötigt und

Emissionen in Wasser erzeugt, wohingegen das Gasphasenverfahren im Fließbettreaktor kein Prozesswasser oder NaOH benötigt und keine Emissionen in Wasser erzeugt [5]. Die vom Verfahren direkt und indirekt beeinflussten Umweltauswirkungen müssen daher beide in die Analyse einbezogen werden.

Abbildung 4.1 verdeutlicht die verschiedenen oben beschriebenen Systemräume noch einmal systematisch. Auf der linken Seite der Abbildung sind die Vorketten des Verfahrens abgebildet (Wertschöpfungsketten von Vorprodukten, Energieerzeugung, Betriebsmitteln, Herstellung der Anlage, Umweltauswirkungen der Mitarbeiter durch Berufsverkehr etc.). Auf der rechten Seite sind alle Nachketten des Verfahrens abgebildet (Produkte, Nebenprodukte, Abfälle, Lebensende der Anlage etc.). Aus jedem der abgebildeten Verfahren können Elementarflüsse die Systemgrenze Technosphäre überschreiten. Sie sind aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht abgebildet.

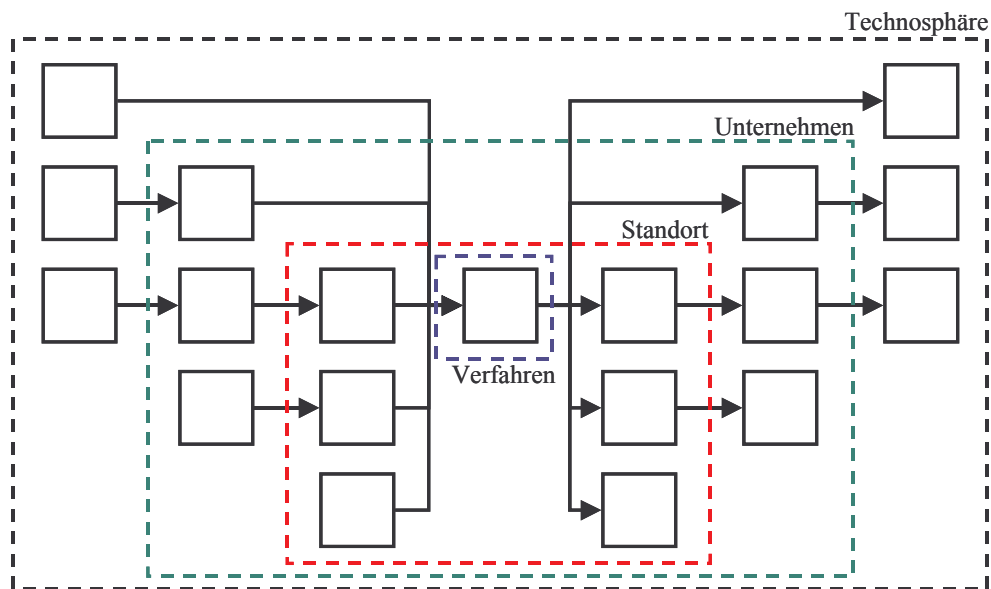


Abbildung 4.1: Systematische Darstellung verschiedener Systemräume für die ökologische Analyse eines Verfahrens

Fazit aus den Gedanken der letzten Abschnitte ist, dass der Systemraum „Verfahren“ für die *detaillierte ökologische Prognose* für frühe Phasen der Verfahrensentwicklung am sinnvollsten ist. Der Aufwand zur Informationsbeschaffung ist für diesen Systemraum handhabbar. Die Anlage zur Stoffumwandlung wird betrachtet, (zufällig) am selben Standort befindliche oder zum selben Unternehmen gehörende Anlagen zur Bereitstellung von Vorprodukten und Energien, Behandlung von Abfällen etc. sind nicht Teil des Systemraums. Sie würden die Vergleichbarkeit der Ergebnisse zu sehr einschränken [43].

Dies entspricht dem Vorgehen bei der ökonomischen Analyse, in der die direkten Kosten (also die Kosten ohne Hilfs- und Nebenanlagen) im Mittelpunkt der Prognose stehen, weil sie die relevantesten sind und vom Unternehmen am leichtesten beeinflusst werden können [1][103][149].

Eine Abgrenzung des Verfahrens von Hilfs- und Nebenanlagen kann anhand des Grundfließbildes getroffen werden, Hilfs- und Nebenanlagen werden meist für mehrere Verfahren des Standortes gemeinsam genutzt und im Grundfließbild nicht dargestellt. Damit umfasst das Verfahren (ebenso wie der Systemraum zur ökologischen Prognose) „alle notwendigen Stufen des Herstellungsprozesses von der Vorbereitung der Einsatzstoffe über die chemische Reaktion, bis hin zur Aufbereitung der Endprodukte. Das chemische Verfahren [...] endet dort, wo das angestrebte Produkt erstmals in der geforderten Spezifikation anfällt“ [43].

Allerdings muss der gesamte Produktlebenszyklus bzw. der Teil des Lebenszyklus, der vom Produzenten direkt und indirekt beeinflusst werden kann, als Systemraum für die *Entscheidungsunterstützung* einbezogen werden. Das Verfahren legt Art und Menge der Edukte und Produkte fest – und damit auch die Vor- und Nachketten. Ein vollständiges und relevantes Ergebnis der Analyse lässt sich nur durch die Einbeziehung aller vom Unternehmen beeinflussbaren Vor- und Nachketten sicherstellen.

Die Vorgänge außerhalb des Systemraums Verfahren müssen einer detaillierten Analyse nicht zugänglich sein und sie müssen auch nicht den speziellen Gegebenheiten an einem konkreten Standort entsprechen. In frühen Planungsphasen sind Standort, Lieferanten und Kunden noch nicht konkret bekannt. Es ist für die in dieser Arbeit bearbeitete Problemstellung ausreichend, dass Wissen über die indirekten Umweltauswirkungen als aggregierte Ökoprofile in Form einer „black-box“ vorliegt.

Es ist für diese Arbeit statthaft, das Vorhandensein von Informationen über Vor- und Nachketten als gegeben vorauszusetzen. In den letzten zwei Jahrzehnten sind schon sehr viele Herstellungsrouten mit einer Ökobilanz untersucht worden und stehen zumindest als „black-box“ zur Verfügung bzw. können von Dienstleistern bezogen werden. „Black-box“ Datensätze sind z. B. in Form von Datenbanken als Bestandteile von Ökobilanzierungs-Software [67][68][106][107] zugänglich. Nicht vorliegende Verfahren können ebenso wie das zu untersuchende Verfahren durch eine Prognose bestimmt werden.

Für den weiteren Verlauf dieser Arbeit werden Informationen über Umweltauswirkungen für folgende Vor- und Nachketten als vorhanden vorausgesetzt:

- Vorprodukte,
- Betriebsstoffe,
- Hilfsstoffe,
- Energieversorgung,

- Behandlung von Abfällen durch Entsorgung bzw. Verwertung,
- Behandlung von Abwasser.

Die Informationen über Umweltauswirkungen dieser Vor- und Nachketten seien in einer Ökobilanz modelliert und sollen als Ökopprofile in Form einer „black-box“ zur Verfügung stehen. Als Analogie für dieses Vorgehen kann man die ökonomische Analyse anführen. Der Systemraum Verfahren wird einer detaillierten Kostenprognose unterworfen. Und durch das „Rucksack-Prinzip“ bei Preisen werden die Kosten aller relevanten Vor- und Nachketten der Wertschöpfungskette, die vom Verfahren indirekt beeinflusst werden, als „black-box“ in die Kostenprognose einbezogen.

Die Nachketten für Nutzung und Lebensende der Produkte sind kein sinnvoller Teil des Systemraums für die Verfahrensauswahl in der chemischen Industrie. Diese stellt nämlich für gewöhnlich keine Produkte für Endverbraucher her, sondern Stoffe, die für verschiedenste Anwendungen in Produkten für Endverbraucher genutzt werden können. Damit ist der Einfluss des gewählten Verfahrens auf Nutzung und Lebensende des Produktes klein. Für diese Phasen des Produktlebenszyklus müsste eine Vielzahl von Szenarien analysiert und bewertet werden, die alle relevanten Möglichkeiten des Einsatzes in Produkten abdeckt. Für die Entscheidungsunterstützung in frühen Phasen der Verfahrensentwicklung ist dieses Vorgehen nicht zielführend.

Abbildung 4.2 stellt den Informationsbedarf für die ökonomische und ökologische Analyse systematisch dar. Für die ökonomische Analyse werden von allen preisbehafteten Stoff- und Energieflüssen die Preise als aggregierte Information benötigt. Emissionen verursachen meist keine Kosten (allerdings ist mit dem Emissionshandel von Treibhausgasen ein Anfang für eine Preisbildung von Emissionen gemacht). Für die ökologische Analyse werden von allen Materialien (Vorprodukte, Betriebsstoffe, Hilfsstoffe), Energien, Abfällen und Abwässern detaillierte Informationen benötigt, die allerdings zweckmäßig zu einer „black-box“ zusammengefasst sein können. Die Umweltauswirkungen der Arbeitskraft und der Investitionen sind bei großen Chemieanlagen meist nicht relevant, (vergleiche Kapitel 4.8.2). Von den Co-Produkten und den Emissionen sind als aggregierte Information nur Preis und Menge bzw. die Menge erforderlich.

4.2 Wahl der funktionellen Einheit

Die Wahl der funktionellen Einheit als Basis für den Vergleich zwischen unterschiedlichen Lösungsvarianten soll den Nutzen des Verfahrens darstellen und quantifizierbar machen [96]. Als funktionelle Einheit kommen für den vorliegenden Anwendungsfall zwei Möglichkeiten in Frage: Das (Haupt-)Produkt in physikalischen Größen wie z. B. [Stück] oder [kg] und die Anlage in [Anlage/Jahr].

Die Produktsicht ist gegenüber der Anlagensicht vorteilhaft, weil Anlagen verschiedener Größe und Auslastung miteinander verglichen werden können. Außerdem kann die Produktsicht Verfahren mit unterschiedlichen Nebenprodukten mit Fokus auf das Hauptprodukt vergleichbar machen. Bei den so gewonnenen Werten muss allerdings Anlagengröße, Auslastung und Nebenprodukte als Information mitprotokolliert werden, um die Vergleichbarkeit bei der Nachkalkulation und den Aufbau einer Erfahrungsdatenbank zu ermöglichen.

Die Ergebnisse der technischen und ökonomischen Analyse können bei gegebener Anlagenkapazität (und gegebenenfalls Auslastung) leicht auf die funktionelle Einheit Produkt umgerechnet werden. Damit ist für die funktionelle Einheit Produkt die Konsistenz zwischen den verschiedenen Dimensionen der Analyse gewährleistet.

Die *Herstellung der Anlage* muss je nach Relevanz auch prognostiziert werden, ist aber bei Anlagen zur Herstellung von chemischen Grundstoffen mit ihren hohen Durchsätzen meist nicht relevant im Vergleich zu den Umweltauswirkungen der Stoffströme, die durch die Anlagen laufen (siehe auch Kapitel 4.8.2). Dies ist analog zur Kostensituation bei chemischen Anlagen, bei denen ebenfalls die variablen Betriebskosten während der Nutzungsphase der Anlage die fixen Kosten für Errichtung und Lebensende der Anlage meist weit übersteigen [1][103][149]. Herstellkosten von Anlagen sind nur deswegen ein so großes Thema bei der Kostenprognose, weil sie am Anfang als großer Posten anfallen und erst im Laufe der Zeit durch Abschreibungen refinanziert werden. Dazu ist oft ein Kredit nötig, der genau geplant werden muss [43]. Bei ökologischen Betrachtungen entfällt dieser Grund. Bei Anlagen zur Herstellung von Feinchemikalien mit sehr geringen Durchsätzen ist die Herstellung der Anlage aber eventuell mit relevanten Umweltauswirkungen verbunden und muss dann in die Prognose einbezogen werden.

Die *Nutzungsdauer* der Anlage spielt nur dann eine Rolle, wenn Herstellung, Instandhaltung oder Lebensende der Anlage relevante Umweltauswirkungen haben. In diesem Falle werden die Umweltauswirkungen über die gesamte Lebensdauer der Anlage auf die hergestellten Produkte verteilt. Das Einbeziehen von Herstellung und Lebensende der Anlage entspricht dem Vorgehen bei Neben- bzw. Koppelprodukten, das in Kapitel 4.3 behandelt wird.

Das Vorgehen bei der ökonomischen Analyse ist anders, dort werden Abschreibungen für die Herstellung der Anlage nur in einem Zeitraum von typischerweise 10 Jahren auf die Produkte

umgelegt. Danach erfolgt die Bildung einer stillen ökonomischen Reserve, die z. B. für die Kosten des Lebensendes der Anlage genutzt werden kann. Das Bilden von stillen Reserven für Umweltauswirkungen ist nicht sinnvoll.

Für Ökobilanzen ist laut EN ISO 14.041 [96] bzw. ISO/TR 14.049 [99] das Vorgehen für verschiedene Nutzungsarten der Anlage nicht vorgeschrieben, es wird je nach Anwendungsfall festgelegt und die Wahl begründet. Es wird jedoch empfohlen, instationäre Vorgänge bei der Nutzungsphase der Anlage (An- und Abfahren der Anlage, regelmäßig wiederkehrende Ausnahmezustände) einzubeziehen, also den durchschnittlichen Betrieb in einem bestimmtem Zeitintervall statt des Regelbetriebs zu betrachten [128]. Für nicht-kontinuierlich arbeitende chemische Anlagen ist dies besonders notwendig. In dieser Arbeit wird der durchschnittliche Betrieb innerhalb eines Jahres betrachtet, exklusive aller Unfälle. Dies entspricht den Normalkosten der ökonomischen Analyse.

Die Abbildung von ökologischen Risiken durch *Unfälle* ist derzeit üblicherweise nicht Teil von Ökobilanzen und wird auch hier nicht betrachtet. Das ist allerdings eine Ungenauigkeit, denn von Unfällen können erhebliche Umweltwirkungen (und Kosten) ausgehen. Einen Ausblick auf die mögliche Einbeziehung von Risiken in die ökologische Analyse gibt Kapitel 6.2.

Das *Lebensende der Anlage* (Rückbau oder Umbau zu neuer Nutzung) ist analog zur Herstellung der Anlage für chemische Grundstoffe meist nicht relevant. Sollte das Lebensende der Anlage relevante Umweltauswirkungen haben, ist es analog zur Herstellung der Anlage in die Prognose einzubeziehen.

4.3 Vorgehen bei Neben- bzw. Koppelprodukten

Für Ökobilanzen ist laut EN ISO 14.041 [96] das Vorgehen bei Neben- bzw. Koppelprodukten nicht vorgeschrieben, es wird je nach Anwendungsfall festgelegt und die Wahl begründet. Grundsätzlich stehen nach [96] zwei Möglichkeiten offen, die Systemraumerweiterung und die Allokation. Es soll für ähnliche Produkte eine einheitliche Methode angewendet werden.

Bei der *Systemraumerweiterung* wird der Systemraum des zu untersuchenden Systems so erweitert, dass alle Nebenprodukte mit abgebildet werden. Damit wird die ursprüngliche funktionelle Einheit verändert; dies ist zur Interpretation der Analyseergebnisse für die Entscheidungsunterstützung nicht förderlich.

Durch die Annahme, dass durch die Produktion der Nebenprodukte im vorliegenden Verfahren andere Herstellungsverfahren für diese Nebenprodukte substituiert werden können, werden Gutschriften über die ökologischen Auswirkungen dieser eingesparten alternativen Herstellungsverfahren verteilt (*Systemraumerweiterung durch Substitution*).

Dies setzt das Vorhandensein eines alternativen Herstellungsverfahrens voraus, das seinerseits keine Nebenprodukte erzeugt und für das eine Ökobilanz vorliegt. Dieser Fall wird selten eintreten. Die Systemraumerweiterung ist generell für die Anwendung in frühen Phasen der Verfahrensentwicklung nicht sinnvoll, es werden zu viele Informationen über andere Herstellungsverfahren benötigt, die keinen direkten Erkenntnisgewinn bezüglich des untersuchten Verfahrens bringen.

Bei der *Allokation* (Verteilung) werden die Input- und Outputflüsse eines Moduls den verschiedenen Produkten nach einem Verteilungsschlüssel zugeteilt. Verschiedene Verteilungsschlüssel auf Basis von physikalischen oder nicht-physikalischen Eigenschaften der Produkte existieren (Masse, Energiegehalt, Marktwert etc.). Es soll durch den Verteilungsschlüssel das Verursacherprinzip zum Ausdruck kommen. Der *Marktwert* bringt den Grund konsistent sinnvoll zum Ausdruck, denn jedes Verfahren wird letztendlich aus ökonomischen Gründen durchgeführt (Lindeijer und Huppel in [58]). Allerdings hat der Marktwert als Verteilungsschlüssel auch Nachteile. Er ist z. B. im Gegensatz zu den physikalischen Eigenschaften zeitabhängig und muss bei rein ökologischen Analysen zusätzlich erhoben werden. Eine grundsätzliche Lösung für die Wahl des sinnvollsten Verteilungsschlüssels ist nicht zu erwarten, in der Betriebswirtschaftslehre werden ebenfalls seit langem verschiedene Allokationsmethoden angewendet, z. B. zur Zuweisung der Gemeinkostenanteile auf verschiedene Produkte.

In dieser Arbeit, die bewusst aus Gründen der Konsistenz und des zeitlichen Aufwandes zur Informationsgewinnung die Nähe zur ökonomischen Analyse sucht, wird die Allokation nach Marktwert verwendet. Aus der ökonomischen Analyse mit der funktionellen Einheit Produkt stehen die Marktwerte ohne zusätzlichen Aufwand zur Verfügung.

4.4 Auswahl der zu prognostizierenden Größen

Neben Systemraum, funktioneller Einheit und Vorgehen bei Nebenprodukten, muss auch die Art der zu prognostizierenden Größen festgelegt werden. Die Größen sollen verschiedenen Anforderungen genügen:

- Sie sollen aus den vorhandenen Informationen bestimmbar sein.
- Sie sollen von technischen Experten angewendet werden können, da sie die technische sowie meist auch die ökonomische Analyse durchführen, bzw. bei der Durchführung eine wichtige Rolle spielen.
- Der Aufwand zur Erhebung soll handhabbar sein.
- Die prognostizierten Größen sollen für existierende Methoden zur ökologischen und dimensionsübergreifenden Bewertung geeignet sein.

Nach Kapitel 2.6 ist die „Environmental-Theme-Methode“ am besten geeignet, um die weitere Bewertung durchzuführen. Danach gibt es drei Arten von Größen, die zur ökologischen Prognose genutzt werden können:

- Prognose von Stoff- und Energieströmen, die die Bilanzgrenze überschreiten. Diese Ströme werden durch die Wirkungsabschätzung der Ökobilanz den entsprechenden Umweltproblemfeldern quantitativ zugeordnet.
- Direkte Prognose von Wirkungskategorien, Vorwegnahme der Wirkungsabschätzung
- Prognose von Kennzahlen, aus denen Stoffströme oder Wirkungskategorien indirekt bestimmt werden können

Bei der Prognose von Strömen gilt, dass eine Vielzahl von Stoff- und Energieströmen existieren, die jeweils einzeln prognostiziert werden müssen. Dies ist nachteilig, denn es bedeutet einen hohen Aufwand zur Erhebung der Größen. Andererseits handelt es sich bei den Stoff- und Energieströmen um reale Größen, die technischen Experten direkt vertraut sind und auch im Moment gemessen und als Informationen abgelegt werden. Auch Stoffströme, die keinen Einfluss auf den ökonomischen Erfolg eines Verfahrens haben, werden gemessen, wenn es sich um gesetzlich limitierte Emissionen handelt oder der betreffende Stoff in der gesellschaftlichen Diskussion einen hohen Stellenwert hat. Der European Chemical Industry Council stellt in [39] eine Auswahl von momentan gemessenen Emissionswerten in der chemischen Industrie dar. Wichtige Verfahrensparameter wie Druck und Temperatur dienen auch bei der Prognose von Stoff- und Energieströmen als Parameter bei der Prognose z. B. durch Regressionen.

Bei der direkten Prognose von Wirkungskategorien müssen nur wenige Werte prognostiziert werden. Die hohe Abstraktionsebene dieser Werte mit Einheiten wie z. B. [kg CO₂-Äquivalente] ist jedoch für technische Experten nicht naheliegend und wird auf Ebene von Grundoperationen derzeit nicht erhoben. Damit stehen zunächst keine Referenzwerte zur Plausibilitätsprüfung der prognostizierten Größen zur Verfügung. Ein weiterer entscheidender Nachteil einer direkten Prognose von Wirkungskategorien ist, dass Charakterisierungsfaktoren und Wirkungskategorien wissenschaftlichen und methodischen Änderungen unterworfen sind. Für manche Substanzen existieren z. B. noch keine Charakterisierungsfaktoren, obwohl die Stoffe im Verdacht stehen, negative Auswirkungen bezüglich Umweltproblemfeldern zu haben. Bestimmte Wirkungskategorien wie z. B. die Toxizität sind derzeit noch in der methodischen Entwicklung, die Charakterisierungsfaktoren mancher Substanzen für die Toxizität schwanken je nach angewandeter Methode stark. Diese möglichen methodischen Änderungen sollten die Nutzbarkeit von abgelegten Informationen für Nachkalkulationen nicht beeinträchtigen und die zu prognostizierenden Größen müssen frei von solchen Einflüssen gehalten werden. Damit ist die direkte Prognose von Wirkungskategorien ungeeignet für den betrachteten Anwendungsfall.

Für die Prognose von Kennzahlen für Wirkungskategorien sind Regressionsrechnungen auf Basis von vollständigen Ökobilanzen nötig, um herauszufinden, ob die Kennzahl das Problem adäquat beschreibt [27]. Es sind Kennzahlen für alle relevanten Umweltproblemfelder nötig und es besteht die Problematik der Auswahl. Es ist daher schwer, aussagekräftige Kennzahlen zu finden. Das komplexe Problem der Prognose von Umweltauswirkungen sollte nicht unzulässig trivialisiert werden. Es müssen bei festgelegten Kennzahlen allerdings nur wenige Werte prognostiziert werden. Die technischen Einflussgrößen, die den Kennzahlen üblicherweise als Parameter dienen, werden gemessen, als Informationen abgelegt und sind gut geeignet für technische Experten.

Das Fazit dieser Überlegungen ist, dass in dieser Arbeit die Stoff- und Energieströme für die Prognose herangezogen werden. Kennzahlen (wie die in Kapitel 4.8.2 entwickelten) erleichtern an denjenigen Stellen die Prognose, die für das Endergebnis nicht entscheidend sind. Die direkte Prognose von Wirkungskategorien sollte unterbleiben, sie ist anfällig gegenüber methodischen Änderungen, die das zu betrachtende Verfahren nicht direkt betreffen und die Vergleichbarkeit von abgeschlossenen Projekten erschweren.

Die Prognose von Stoff- und Energieströmen mit ihrem hohen Aufwand zur Erhebung der Größen wirft die Frage nach geeigneten Abschneidekriterien auf, durch die evtl. einige der Ströme nicht prognostiziert werden müssen. Die großen Unterschiede bei den Charakterisierungsfaktoren zwischen verschiedenen Stoffen (z. B. unterscheiden sich die Charakterisierungsfaktoren zwischen CO₂ und SF₆ um den Faktor 10.000 als Extremfall für die Wirkungskategorie GWP₁₀₀) machen es sehr schwer, sinnvolle Abschneidekriterien auf Mengengrundlage für die Stoffe anzugeben. Allgemein ist es in der Entwicklungsphase der Vorstudie nicht sinnvoll, gezielt Stoffe wegen Unwichtigkeit abzuschneiden. Die Prognose der Umweltauswirkungen dient dazu, mögliche Probleme auch von Emissionen mit geringer Menge frühzeitig zu erkennen und in die Überlegungen der weiteren Planung einzubeziehen

4.5 Auswahl der betrachteten Umweltproblemfelder

Ein weiterer Aspekt der Auswahl der zu prognostizierenden Größen sind die betrachteten Umweltproblemfelder bzw. Wirkungskategorien. Eine mögliche Vereinfachung der Prognose besteht darin, für die Chemieindustrie relevante Wirkungskategorien zu identifizieren und den Fokus auf diejenigen Stoff- und Energieströme zu legen, die zu diesen Wirkungskategorien beitragen.

Die Auswahl der Wirkungskategorien erfolgt durch Vorgaben des Gesetzgeber und dem Stand des Wissens von Experten, der Gesellschaft und des Unternehmens.

Zielvorgaben des Gesetzgebers bezüglich der Umweltauswirkungen von Industrie und Gesellschaft sind in den internationalen Übereinkommen von Kyoto [139], Montreal [138], und Göteborg [137] festgelegt. In diesen internationalen Übereinkommen sind die Ziele der

Staaten bezüglich der Umweltproblemfelder Treibhauseffekt, Ozonabbau, Versauerung, Überdüngung und Sommersmog festgeschrieben. Die Übereinkommen werden vom „6. Umweltaktionsprogramm der Europäischen Gemeinschaft“ [16] in einen allgemeinen Rahmen von umweltpolitischen Zielvorstellungen eingebunden. Die Umweltprioritäten dieses Programms sind:

- Klimaveränderung
- Natur und Biodiversität
- Umwelt, Gesundheit und Lebensqualität
- Natürliche Rohstoffe und Abfälle

Speziell auf die Belange der Chemieindustrie zugeschnitten sind die „Integrated Pollution Prevention and Control (IPPC) Reference Documents“ der EU-Kommission. Sie bilden durch die Beschreibung der besten verfügbaren Technologien die Vorgaben für den Bau von Anlagen, z. B. im Bereich der organischen Grundstoffindustrie [72].

Zielvorgaben der Gesellschaft werden durch Umfragen oder durch Expertenkommissionen wie der Enquete-Kommission „Schutz des Menschen und der Umwelt“ des Deutschen Bundestages [36] geäußert.

Die Zielvorgaben von Gesetzgeber und Gesellschaft sind die Grundlage für Sammlungen von Wirkungskategorien und ihrer Charakterisierungsfaktoren, wie die der Universität Leiden (CML-Faktoren, [20]) und die von Pré Consultants (Eco-Indicator, [56]). Man muss sich für eine der beiden Sammlungen entscheiden, da verschiedene methodische Ansätze verwendet werden. Für die chemische Industrie ist momentan die Sammlung der Universität Leiden sinnvoller (Stand 2004), denn es werden mehr chemische Stoffe als Elementarflüsse mit Charakterisierungsfaktoren angesprochen als in der Sammlung von Pré Consultants.

Neben diesen Zielvorgaben gibt es eine Reihe von Stoffen, die in der Industrie selbst als umweltgefährdend angesehen werden. Emissionen wie Phosphorverbindungen und Stickstoffverbindungen in Wasser, Schwermetalle in Wasser, SO₂, NO_x, CO₂ und VOC in Luft, sowie die Mengen an Abfall und Sonderabfall werden von der Chemieindustrie als umweltgefährdend eingestuft und durch Messungen zugänglich gemacht [39]. Diese Stoffe und die ihnen zugeordneten Umweltproblemfelder müssen in die Prognose von Umweltauswirkungen für chemische Anlagen einbezogen werden. Reine Mengenangaben für Abfall und Sonderabfall sagen allerdings nichts über die möglichen Umweltauswirkungen dieser Ströme aus. Szenarien für verschiedene Wege der Entsorgung sollten Aussagen über die dabei benötigten Ressourcen und emittierten Schadstoffe machen und sich in das in der Ökobilanz übliche methodische Vorgehen einpassen.

Neben den verschiedenen Zielvorgaben kommt es für die Entscheidungsunterstützung maßgeblich auf die Stabilität der Ergebnisse an. Die Entscheidung bezieht sich schließlich auf Anlagen, die eine Betriebsdauer von minimal 10 Jahren aufweisen sollen (üblicher Zeitraum

der ökonomischen Abschreibung). Dementsprechend dürfen die Entscheidungen nicht auf der Grundlage von wissenschaftlich und methodisch unausgereiften Wirkungskategorien wie der Toxizität gefällt werden [42].

Auf Grund einer Relevanzanalyse und Erfahrungen mit Projekten in der chemischen und kunststofferzeugenden Industrie werden die folgenden Wirkungskategorien aus der Sammlung der Universität Leiden [20] bei der Prognose von Umweltauswirkungen in der Vorstudie der Verfahrensentwicklung für Chemieanlagen einbezogen:

- Abiotischer Ressourcenverbrauch (Abiotic Depletion Potential ADP) in [kg Sb - Äquivalenten]. Beherrschendes Thema bezüglich Ressourcenverbrauch in der chemischen und kunststofferzeugenden Industrie ist der Verbrauch an nicht regenerierbaren energetischen Ressourcen (also Öl, Kohle, Gas). Dieser lässt sich anschaulich durch den Primärenergieverbrauch (Verbrauch von nicht regenerierbaren energetischen Ressourcen in [MJ]) angeben. Zur besseren Vergleichbarkeit der Ergebnisse mit den Erzeugnissen anderer Industrien ist es allerdings sinnvoll, die international eingeführte Wirkungskategorie ADP zu verwenden. Wenn die nicht regenerierbaren energetischen Ressourcen das ADP dominieren, sind die Verhältnisse von verschiedenen Lösungsvarianten in beiden Darstellungsformen ähnlich. Der abiotische Ressourcenverbrauch in der chemischen Industrie findet indirekt statt, da die Anlagen z. B. Strom und Dampf benötigen, aber nicht direkt die energetischen Ressourcen.
- Versauerungspotential (Acidification Potential AP) in [kg SO₂ -Äquivalenten]. Saure Gase wie H₂S, NH₃, HF, HCl, HBr und HCN, organische Halogenverbindungen, SO₂ und NO_x mit ihren Säuren H₂SO₄ und HNO₃ tragen zur Versauerung bei.
- Überdüngungspotential (Eutrophication Potential EP) in [kg PO₄³⁻ -Äquivalenten]. Die Überdüngung wird vor allem durch Phosphat und Stickstoffverbindungen hervorgerufen, der chemische Sauerstoffbedarf (CSB) dient häufig als Summenindikator.
- Treibhauspotential (Global Warming Potential GWP) in [kg CO₂ -Äquivalenten]. der Treibhauseffekt wird durch CO₂, CH₄, N₂O und halogenhaltige organische oder anorganische Verbindungen hervorgerufen. Das Treibhauspotential ist in der chemischen Industrie im Vergleich zu anderen Industrien ein eher untergeordnetes großes Problem [40]. Es sollte aber trotzdem wegen seiner hohen gesellschaftlichen Relevanz nicht ausgelassen werden.
- Sommersmogpotential (Photochemical Ozone Creation Potential POCP) in [kg C₂H₄ - Äquivalenten]. Der Sommersmog ist in der organischen Chemie ein relevantes Thema, denn hier tragen neben organischen Halogenverbindungen auch viele verschiedene andere flüchtige organische Substanzen zur Wirkungskategorie bei.

Zusätzlich sind folgende Wirkungskategorien für manche Verfahren relevant:

- Flächennutzung (Land Use) in [m^2/a] besonders bei der Verwendung von nachwachsenden Rohstoffen (zur Relevanz der Flächennutzung bei der Herstellung von Grundchemikalien aus nachwachsenden Rohstoffen siehe [7]).
- Ozonabbaupotential (Ozone Depletion Potential ODP) in [kg R 11 -Äquivalenten] für den Fall, dass halogenierte Kohlenwasserstoffe im Verfahren eine Rolle spielen.

Wegen des derzeitigen wissenschaftlichen und methodischen Entwicklungsstandes sind die Wirkungskategorien der Toxizität momentan noch ungeeignet für die Entscheidungsunterstützung. Dies ist augenfällig, weil es für einige chemische Stoffe (noch) keine Charakterisierungsfaktoren gibt. Der methodischen Entwicklung und der Verfügbarkeit von Daten sollte allerdings nicht vorgegriffen werden. Es ist sinnvoll, alle auftretenden Stoffe in die Dokumentation aufzunehmen, um die Informationen für spätere Auswertungen mit anderen Schwerpunkten verfügbar zu machen. Bei Bedarf ist eine Auswertung von Einzelstoffen mit bekannter Toxizität natürlich auf der Ebene von Ergebnissen der Sachbilanz möglich [6]. Gängige Wirkungskategorien für die Toxizität sind:

- Humantoxizitätspotential (Human Toxicity Potential HTP) in [kg DCB -Äquivalenten].
- Aquatisches Ökotoxizitätspotential (Aquatic Ecotoxicity Potential AETP) in [kg DCB -Äquivalenten].
- Terrestrisches Ökotoxizitätspotential (Terrestrial Ecotoxicity Potential TETP) in [kg DCB -Äquivalenten].

Eine Wirkungskategorie Radioaktive Strahlung (Radioactive Radiation RAD) in [Bq I 129 -Äquivalenten] aus [20] ist für die chemische Industrie beim derzeitigen Wissensstand vergleichsweise wenig relevant und muss daher nicht betrachtet werden.

Die bereits angesprochene Relevanzanalyse der Wirkungskategorien für die gesamte Herstellung der Stoffe (inklusive aller Vor- und Nachketten, Systemraum Entscheidungsunterstützung), durchgeführt an 60 Stoffen der organischen Grundstoffchemie und der kunststofferzeugenden Industrie zeigt Abbildung 4.3 für die ausgewählten fünf Wirkungskategorien ADP, EP, POCP, GWP und AP. Die Darstellung ist normiert auf die durchschnittlichen Umweltauswirkungen in Europa innerhalb eines Jahres (Bezugsjahr 2001). Dies erlaubt, die Wirkungskategorien dimensionslos in einem Diagramm darzustellen und bezüglich ihrer relativen Wirkung in Europa zu vergleichen. Die durchschnittlichen Umweltauswirkungen je Wirkungskategorie sind eingezeichnet. Eine Auflistung der betrachteten 60 Stoffe befindet sich in Anhang C (Seite 130).

Die vorgestellten Wirkungskategorien werden in Kapitel 5 zur Ergebnisdarstellung verwendet. Sie können bei Bedarf problemlos einer ökologischen Bewertung nach der „Environmental-Theme-Methode“ (vergleiche Kapitel 2.6.2) und danach einer weitergehenden dimensionsübergreifenden Bewertung (vergleiche Kapitel 2.6.3) unterzogen werden.

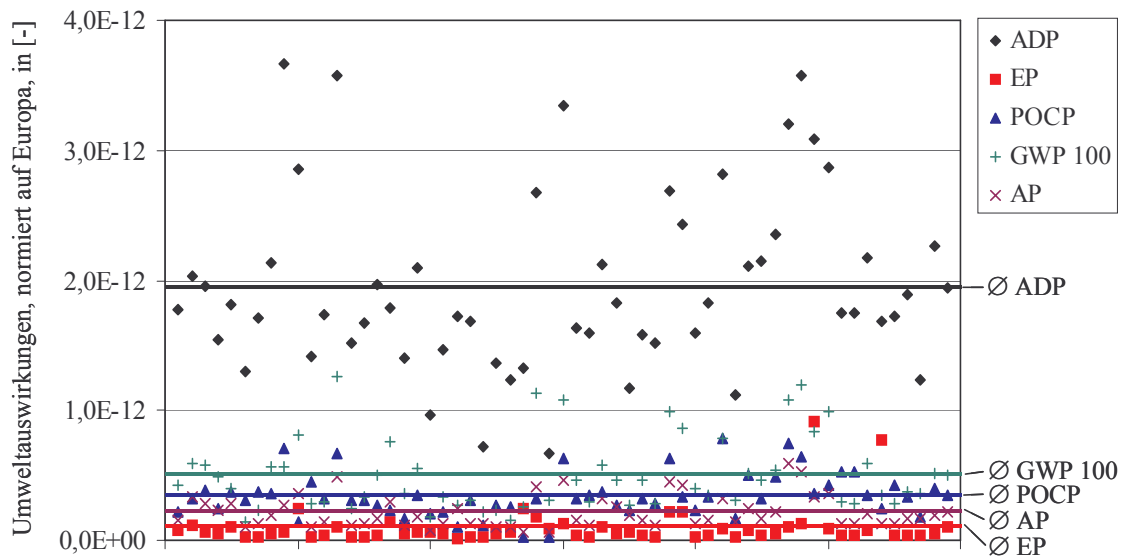


Abbildung 4.3: Umweltauswirkungen der Herstellungsrouten (Systemraum Entscheidungsunterstützung) von je 1 kg von 60 Stoffen der organischen Chemie und kunststoffherzeugenden Industrie, Darstellung der Wirkungskategorien ADP, EP, POCP, GWP und AP, normiert auf Europa [75]

Der Ressourcenverbrauch (Wirkungspotential ADP) ist im Vergleich zu den anderen Wirkungskategorien auffällig hoch. Dies liegt unter anderem daran, dass die im Material eingebundene Energie (die sogenannte Feedstock-Energie) bei der Herstellung der Materialien voll berücksichtigt wird. Ein Teil dieser Energie kann nach der Nutzungsphase des Materials durch Recycling (thermisch, rohstofflich, stofflich) zurückgewonnen werden.

Die starke Streuung der Werte für die einzelnen Wirkungskategorien in Abbildung 4.3 macht deutlich, dass direkte Prognosen von Wirkungskategorien als Vorwegnahme der Wirkungsabschätzung oder Prognosen der gesamten Herstellungskette als „black-box“ keinesfalls erfolgen sollten. Das Verfahren muss statt dessen in Module zerlegt werden, die eine präzisere Betrachtung erlauben. Dies erfolgt im nächsten Kapitel.

4.6 Grundoperationen als Ordnungssystem zur Zerlegung der Anlage in Module

4.6.1 Einführung

In Kapitel 4.1 wird festgelegt, den Systemraum „Verfahren“ zu prognostizieren. Eine Prognose der Anlage als „black-box“ ist dafür die einfachste Möglichkeit. Dieses Vorgehen ist für eine erste Abschätzung nützlich, wenn noch *vor* der Vorstudie zur Verfahrensentwicklung erste Überlegungen zu den Umweltauswirkungen der Anlage angestellt werden sollen.

Die Entscheidung *nach* der Vorstudie, die Verfahrensentwicklung fortzuführen oder abubrechen, verlangt eine genauere Entscheidungsgrundlage. Fehlentscheidungen können teuer werden. Zudem erlaubt der Stand der Informationen in der Vorstudie präzisere Prognosen. Eine Prognose des Systemraums Verfahren als „black-box“ ist für den betrachteten Zweck dieser Arbeit zu ungenau, das Verfahren wird für die Prognose in Module unterteilt, die getrennt analysiert werden.

4.6.2 Anpassung des Ordnungssystems

Bei Kostenprognosen geht man häufig modulweise vor, indem Kosten zu Gruppen von Kostenarten zusammengefasst und jeweils einzeln prognostiziert werden. Eine andere Möglichkeit schlägt Faubel vor, der eine Unterteilung der Anlage in Grundoperationen nicht nur für die technische, sondern auch für die ökonomische Analyse einführt [43]. Durch dieses Vorgehen wird die Lücke der ökonomischen Analysemethoden geschlossen, die zwischen der grob überschlägigen Prognose der Anlagenkosten als „black-box“ und der detaillierten Kostenermittlung in den Detailstudien der Verfahrensentwicklung besteht. Dies gilt analog für die ökologische Analyse.

Das Ordnungssystem der Grundoperationen soll dabei eine eindeutige Zuordnung aller Bestandteile des Verfahrens ermöglichen, um Probleme bei der Zerlegung der Anlage in die Module zu vermeiden (Doppelzählungen etc.).

Verschiedene Systeme zur Systematisierung der Grundoperationen werden bei Faubel auf ihre Eignung für die ökonomische Analyse untersucht. Die Systematik nach Quarg et al. [109], die speziell für die technische Analyse der Projektierung von Anlagen entwickelt wurde und innerhalb der Hauptgruppen die Grundoperationen anhand des Aggregatzustandes der eintretenden Stoffe unterscheidet, entspricht den Anforderungen der ökonomischen Analyse am besten. Sie muss aber an einigen Stellen noch modifiziert werden. Diese Modifikationen werden im Folgenden kurz dargestellt und ihre Eignung für die ökologische Analyse diskutiert:

- Faubel nimmt bei seiner Modifikation die chemische Stoffumwandlung in die Systematik der Grundoperationen auf [43], denn die chemische Stoffumwandlung determiniert einen großen Teil der notwendigen Stoff- und Energieströme. Eine weitergehende Unterteilung und Systematisierung der chemischen Stoffumwandlung, z. B. in verschiedene Reaktionstypen oder Reaktortypen, erscheint für die ökonomische Analyse nicht notwendig. Eine Ermittlung der Mengen der auftretenden Stoffströme der Reaktion über Stöchiometrie, Ausbeute und Selektivität der Reaktion als die relevanten variablen Kosten ist nach Faubel für die ökonomische Analyse der chemischen Stoffumwandlung ausreichend.
- Aus Gründen der eindeutigen Zuordnung aller Verfahrensschritte in die Systematik werden die bei Quarg et al. vorhandenen eigenständigen Grundoperationen des Zerteilens und des Agglomerierens den übergeordneten Grundoperationen der Stofftrennung und der Stoffvereinigung zugeordnet.
- Lagerung und Verpackung von Erzeugnissen, Roh- und Hilfsstoffen werden gemäß der von Faubel definierten Systemgrenze nicht als Bestandteil des Verfahrens angesehen und aus der Systematik der Grundoperationen ausgeschlossen.

Die Einteilung der Grundoperationen je nach Aggregatzustand in der Systematik von Quarg et al. [109] bzw. Faubel [43] ist auch für die *ökologische Analyse* geeignet [74][75]. Die Zuordnung der Elementarflüsse zu den Umweltproblemfeldern (Wirkungskategorien) erfolgt nach dem Aggregatzustand. Die drei Aggregatzustände werden in nachgelagerten Umwelttechnologien unterschiedlich behandelt.

Die Einbeziehung der chemischen Stoffumwandlung in die Systematik der Grundoperationen für die Zwecke der ökologischen Analyse ist genauso wie für die ökonomische Analyse angebracht. Die Stoff- und Energieströme des Verfahrens werden maßgeblich von den chemischen Stoffumwandlungen festgelegt. Die Kenntnis der chemischen Reaktionen bildet die Grundlage für die Prognose der vor- und nachgelagerten Verfahrensschritte innerhalb der Systemgrenze.

Eine weitergehende Unterteilung und Systematisierung der chemischen Stoffumwandlung ist, analog zur ökonomischen Analyse, nicht sinnvoll. Die Art der Reaktion bringt keinen zusätzlichen Erkenntnisgewinn und die Art des Reaktors ist in der Vorstudie zur Verfahrensentwicklung meist noch nicht bekannt.

Es ist sinnvoll, die Grundoperationen des Zerteilens und des Agglomerierens den übergeordneten Grundoperationen der Stofftrennung und der Stoffvereinigung zuzuordnen. Die eindeutige Zuordnung aller Verfahrensschritte in die Systematik erleichtert die Ablage von Informationen aus abgeschlossenen Projekten und ihre Verwendung zur Prognose.

Verpackung und Lagerung von Erzeugnissen ebenso wie die Lagerung von Roh- und Hilfsstoffen sind analog zur ökonomischen Analyse ebenfalls nicht Bestandteil des Systemraums der ökologischen Analyse (vergleiche Kapitel 4.1). Die Relevanz der Umweltauswirkungen aus der Lagerung und Verpackung von Erzeugnissen der chemischen Industrie ist zudem gegenüber den Umweltauswirkungen der Stoff- und Energieströme selbst klein. In Extremfällen von bekannter Umweltrelevanz der Lagerung und Verpackung (z. B. bei Lagerung unter sehr geringen Temperaturen, die sehr energieintensiv sein kann), können die Umweltauswirkungen als „black-box“ in die Entscheidungsunterstützung einbezogen werden, ohne Teil des Systemraums der detaillierten Prognose sein zu müssen.

Diffuse Emissionen, die im Normalbetrieb entstehen, sind ökologisch relevant, werden aber in allen bisherigen Ordnungssystemen nicht explizit aufgeführt, weil sie technisch und ökonomisch keine relevanten Auswirkungen haben. Sie sollen, um nicht vernachlässigt zu werden, konsistent in das System der Grundoperationen einbezogen werden. Die diffusen Emissionen werden als eine „Grundoperation“ bei der Handhabung von Stoffen eingeordnet, weil sie an Verbindungselementen bei Ortswechseln von Stoffen zwischen Verfahrensabschnitten bevorzugt auftreten (an Dichtungen etc.). Eine Einordnung der diffusen Emissionen in *jede* der Grundoperationen ist systematisch statthaft, aber unpraktischer. Die diffusen Emissionen zeichnen sich dadurch aus, dass sie sich einzelnen definierten Stellen der Anlage nicht oder nur mit unverhältnismäßig hohem Messaufwand zuordnen lassen. Eine Prognose der diffusen Emissionen wird unter Berücksichtigung des Aggregatzustandes der Emission für die Gesamtanlage und nicht für jeden einzelnen Verfahrensabschnitt erfolgen.

Als Ergebnis der Überlegungen der letzten Abschnitte ergibt sich eine Systematik der Grundoperationen für die ökologische Analyse (Abbildung 4.4), die in Kapitel 5 verwendet wird. Die abgebildete Systematik unterteilt die Grundoperationen in ca. 30 Untergruppen. Diese Anzahl ist ein sinnvoller Kompromiss zur Unterteilung des Verfahrens in der Vorstudie zur Verfahrensentwicklung. Eine weitere Unterteilung der Grundoperationen bis hin zu verschiedenen Apparatetypen ist in diesem Stadium der Verfahrensentwicklung noch nicht sinnvoll, die Auswahl der Apparate erfolgt meist erst in einer späteren Phase.

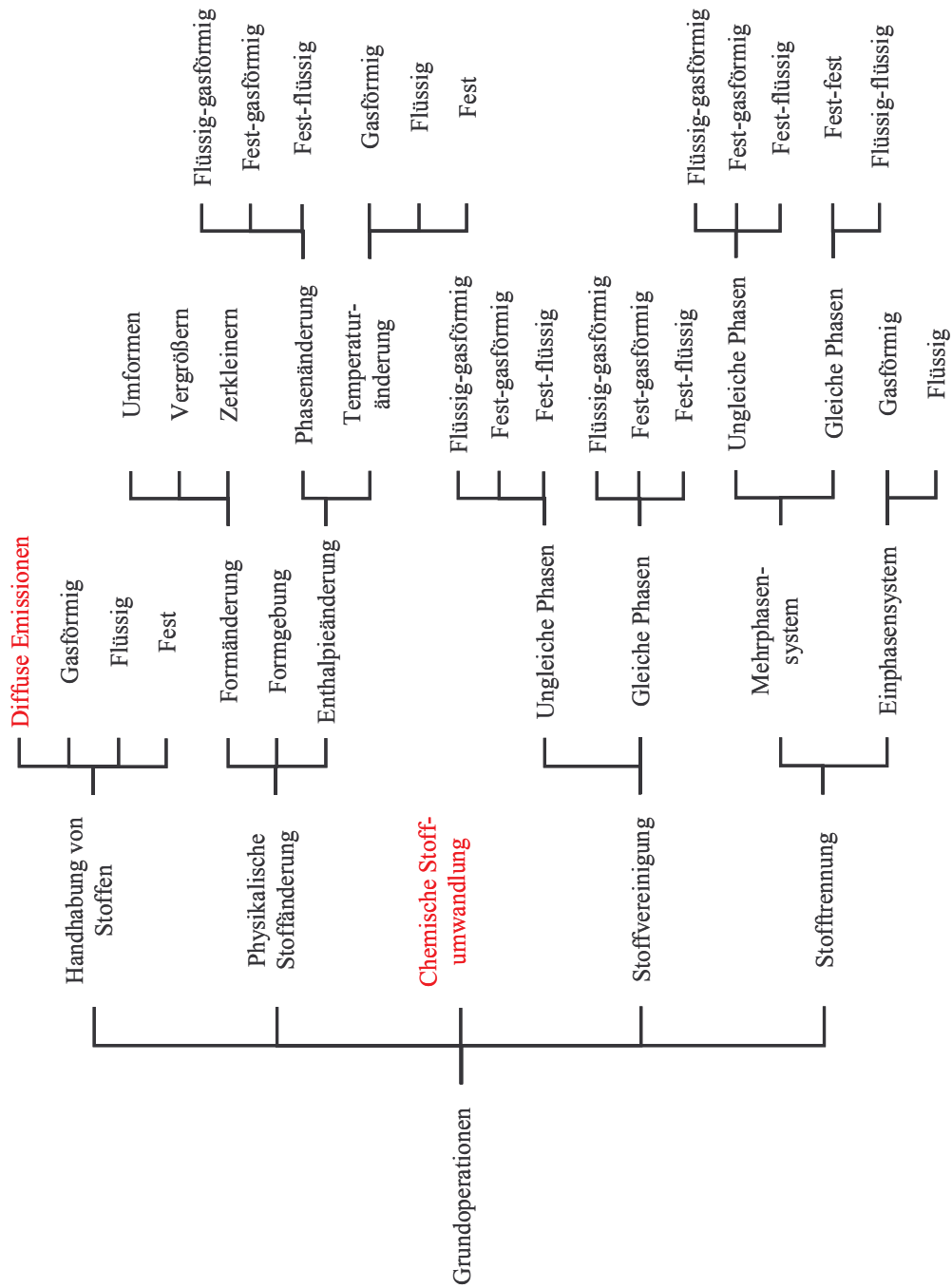


Abbildung 4.4: Systematik der verfahrenstechnischen Grundoperationen für die Verwendung in der ökologischen Analyse [75], nach [43]

4.7 Vorgehen bei der Prognose

Aufgrund der in den vorangegangenen Kapiteln getroffenen Festlegungen bezüglich der Methodik erfolgt das Vorgehen bei der Prognose von Umweltauswirkungen in der Vorstudie zur Verfahrensentwicklung zweckmäßig in zwei Schritten:

1. Zuerst erfolgt auf der Basis des technischen Modells eine *Prognose des Verfahrens* mit der Anlage als Systemgrenze und unter Ausschluss von Hilfs- und Nebenanlagen sowie weiterer Verarbeitungsschritte des fertigen Produktes wie Verpackung und Lagerung. Alle Stoff- und Energieströme, die die Systemgrenzen überschreiten, werden in ihrer Menge bestimmt (vergleiche Kapitel 4.4). Ein besonderes Augenmerk richtet sich auf die direkten Emissionen sowie der Menge und Zusammensetzung der Abfälle und des Abwassers, denn sie werden in der technischen und ökonomischen Analyse nicht oder nur ungenügend betrachtet. Stoffe bzw. Energien, die an mehreren Stellen der Anlage anfallen, werden in einer Sachbilanz der Anlage zu einem Wert zusammengefasst. Die Ergebnisse dieser Sachbilanz der Anlage werden dokumentiert.
2. Für die *Entscheidungsunterstützung* wird der Systemraum um die Herstellung aller Materialien und Energien und die Entsorgung aller Abfälle und Abwässer erweitert. Es wird von diesem erweiterten Systemraum eine Sachbilanz angefertigt. Bei Vorliegen von Informationen über die Vor- und Nachketten als „black-box“ auf Ebene der Sachbilanz können die Sachbilanzergebnisse der Anlage und der Vor- und Nachketten direkt addiert werden. Die Ergebnisse der Sachbilanz werden dokumentiert und eine Wirkungsabschätzung wird durchgeführt (vergleiche Kapitel 4.5 für die Auswahl der betrachteten Wirkungskategorien). An die Wirkungsabschätzung können sich je nach Bedarf noch Schritte der ökologischen und der dimensionsübergreifenden Bewertung anschließen (Kapitel 2.6).

Abbildung 4.5 stellt die Abfolge von Schritten zur Prognose sowie die benötigten Informationen grafisch dar.

Die Funktionelle Einheit ist für beide Schritte der Prognose identisch, das (Haupt-)Produkt wird in physikalischen Größen wie [kg] oder [Stück] betrachtet (vergleiche Kapitel 4.2).

Für den Fall, dass das Verfahren mehr als ein Produkt erzeugt, wird dem Hauptprodukt (der funktionellen Einheit) ein Anteil an den Umweltlasten gemäß einer Allokation nach Marktwert zugewiesen (vergleiche Kapitel 4.3).

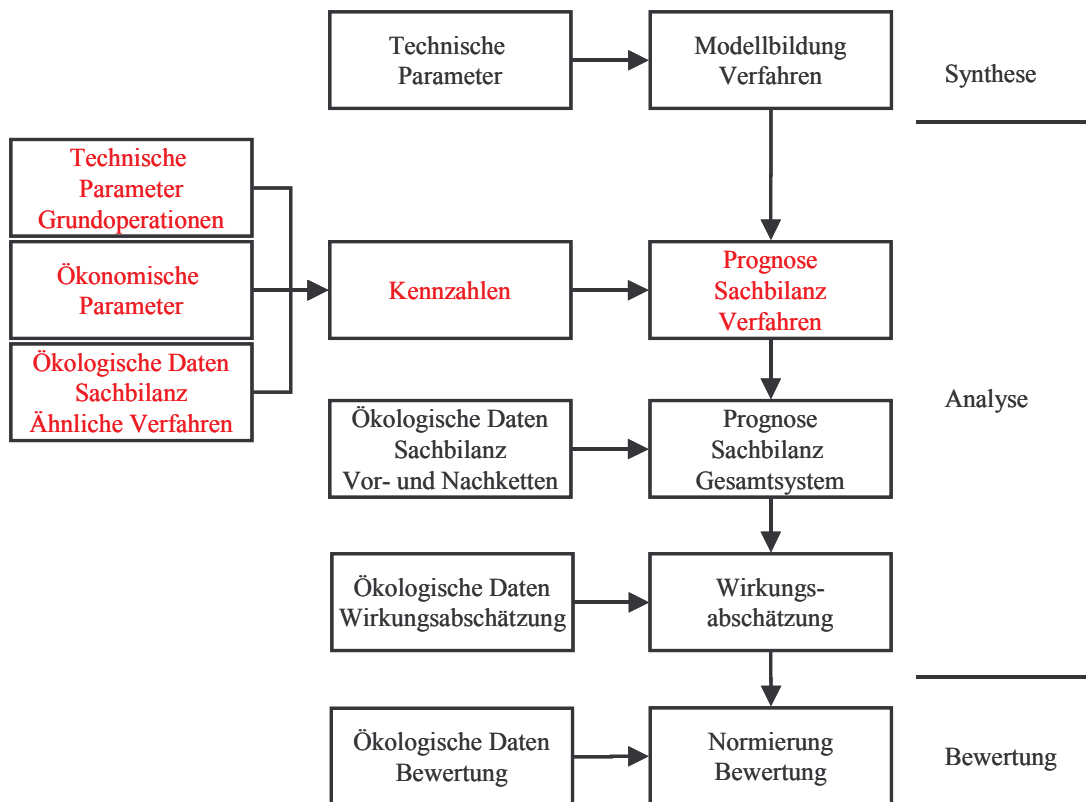


Abbildung 4.5: Vorgehen bei der Analyse als Abfolge von Prognose der Sachbilanz des Verfahrens mit Hilfe von Kennzahlen, Erweiterung des Systemraums um die Vor- und Nachketten und Wirkungsabschätzung

Ein Schwerpunkt dieser Arbeit liegt auf dem Vorgehen bei der Prognose des Verfahrens. Das Ergebnis der Prognose wird genauer, wenn das Verfahren dabei nicht als „black-box“ betrachtet, sondern in Module aufgeteilt wird, die getrennt prognostiziert werden. Welche der in Abbildung 4.4 (Seite 70) systematisierten Grundoperationen werden dazu betrachtet ?

- Chemische Stoffumwandlungen determinieren als das „Herz“ der Anlage die Stoffströme. Die Ausbeute und Selektivität der Reaktion sowie die charakteristischen Reaktionsbedingungen sind wichtige Parameter für die Prognose der Umweltauswirkungen.
 - Stofftrennungen erzeugen (außer bei Rückführungen) Nebenprodukte oder Abfälle/Abwasser.
 - Stoffvereinigungen bestimmen das Verhältnis der Eingangsstoffströme.
 - Physikalische Stoffänderungen benötigen Energie.
 - Die Handhabung von Stoffen benötigt Energie, zusätzlich sind die diffusen Emissionen in diese Gruppe eingeordnet.
- Alle Gruppen von Grundoperationen sind zu betrachten, keine der Gruppen kann grundsätzlich wegen mangelnder Relevanz vernachlässigt werden.

Die Aufteilung der Anlage in die Grundoperationen basiert auf der Dokumentation des technischen Modells der Anlage dem Grundfließschema mit Grund- und Zusatzinformationen nach EN ISO 10.628 [92]. Die Angaben dieser Abbildung stellen den Stand der Informationen dar, der in der Vorstudie der Verfahrensentwicklung als Ergebnis der technischen Modellbildung und als Voraussetzung für die ökologische Analyse mindestens vorliegt. Das Stoffgerüst der Anlage ist am Ende der Vorstudie der Verfahrensentwicklung bezüglich der Hauptstoffe über die chemischen Stoffumwandlungen mit ihren Stöchiometrien, Ausbeuten und Selektivitäten festgelegt. Die unabhängigen Variablen des Verfahrens (Gleichung 2.1, Seite 25) liegen fest; die charakteristischen Betriebsbedingungen (Temperatur, Druck) sind bekannt. Vorliegende Informationen aus der technischen Modellbildung und der ökonomischen Analyse werden benutzt, um einen möglichst hohen Präzisionsgrad zu erzielen.

Mit den chemischen Stoffumwandlungen als Ausgangspunkt wird Grundoperation für Grundoperation prognostiziert. Über die chemischen Stoffumwandlungen und den resultierenden Hauptstoffströmen sind die anderen Grundoperationen bezüglich ihrer charakteristischen Stoffströme in ihrer Art und Größe festgelegt, da die Grundoperationen im Strukturmodell über die Stromvektoren miteinander verknüpft sind (Gleichung 2.6, Seite 26). Dies bedeutet, dass in der Prognose der einzelnen Grundoperationen zusätzlich zu den Hauptstoffströmen noch folgende Informationen ermittelt werden:

- Emissionen,
- Energieströme wie Prozessdampf, thermische Energie und Strom,
- Stoffströme von nachrangigen Hilfs- und Betriebsstoffen,
- Umweltauswirkungen durch den Bau der Anlage und die Mitarbeiter.

Die *Emissionen* sind für die Prognose der Umweltauswirkungen von besonderer Bedeutung, denn sie werden in der technischen Modellbildung wegen ihrer geringen Mengenströme und in der ökonomischen Analyse wegen ihres fehlenden Marktpreises nicht betrachtet. Massenbilanzen (Gleichung 2.2, Seite 25) sind nur bedingt zur Ermittlung geeignet, da auch Emissionen mit sehr geringen Massenströmen, die im Vergleich zu den Hauptstoffströmen der Anlage in der Rechenungenauigkeit untergehen, relevante Umweltauswirkungen erzeugen können. Komponenten-Massenbilanzen (Gleichung 2.3, Seite 25) sind besser geeignet. Sie erlauben die gezielte Verfolgung einzelner Elemente, die als Teil einer Emission Umweltauswirkungen erzeugen, auf ihrem Weg durch die Grundoperationen der Anlage.

Die *Energieströme* werden in technischen oder ökonomischen Analysen mit hohem Detaillierungsgrad bereits betrachtet. Allerdings ist die eingesetzte Energie für manche Verfahren von untergeordneter wirtschaftlicher Bedeutung und wird bei technischen oder ökonomischen Analysen in frühen Phasen der Verfahrensentwicklung oft vernachlässigt. Die Umweltauswirkungen der Energieströme sind hingegen meist von hoher Bedeutung und

erfordern eine Betrachtung in der ökologischen Analyse. Da die charakteristischen Betriebsbedingungen (Temperatur, Druck) bekannt sind, ist eine Ermittlung der benötigten Energie für jede Grundoperation über Enthalpiebilanzen (Gleichung 2.4.; Seite 25) möglich.

Die Stoffströme von nachrangigen (nicht durch die chemischen Stoffumwandlungen direkt determinierten) *Hilfs- und Betriebsstoffen* wie z. B. Lösungsmittel oder Kühlwasser sind in ihrer ökologischen Bedeutung sehr unterschiedlich. Als erster Anhaltspunkt für die ökologische Relevanz eines Stoffstromes kann die ökonomische Relevanz herangezogen werden. Zumindest alle Stoffe, die durch Preis oder eingesetzte Menge eine Betrachtung in der ökonomischen Analyse rechtfertigen, sollten auch in die ökologische Analyse aufgenommen werden. Allgemein ist es in der Entwicklungsphase der Vorstudie nicht sinnvoll, gezielt Stoffe wegen Unwichtigkeit abzuschneiden, um später möglicherweise auftretende Probleme frühzeitig erkennen zu können.

Die Umweltauswirkungen durch den *Bau der Anlage* und die *Mitarbeiter* sind für chemische Anlagen im starken Kontrast zu den ökonomischen Auswirkungen meist von untergeordneter Bedeutung. Diese Aussage gilt für Anlagen mit hohem Durchsatz, wie in Kapitel 4.8.2 für Anlagen der organischen Grundstoffchemie und der kunststoffherstellenden Industrie gezeigt wird, aber nicht uneingeschränkt. Bei kleineren Anlagen der Spezialchemie sollten Abschätzungsrechnungen analog zu Kapitel 4.8.2 durchgeführt werden, um eine mögliche ökologische Relevanz zu überprüfen.

Die Relevanz der einzelnen Grundoperationen bezüglich der Analyse der Umweltauswirkungen ist nicht gleich groß. Je nach Relevanz kann eine andere Methode verwendet werden, um die Stoff- und Energieströme zu prognostizieren. Die informationsaufwändigen aber präziseren Kennzahlenmethoden auf Basis von Regressionen sind für die relevanten Stoff- und Energieströme sinnvoll. Weniger relevante Stoff- und Energieströme können mit weniger benötigten Informationen auf der Basis der so prognostizierten Stoff- und Energieströme durch Verhältnisverfahren oder durch Kennzahlenmethoden auf Basis von durchschnittlichen Umweltauswirkungen bestimmt werden. Subjektive Beurteilungsverfahren sollten Fällen mit besonderem Informationsmangel und neuen Technologien vorbehalten bleiben, bei denen noch nicht genug Informationen für die Anwendung einer Kennzahlenmethode vorliegen. Die Entwicklung passender Kennzahlen zur Verminderung des Informationsbedarfs erfolgt im nächsten Kapitel.

4.8 Entwicklung von Kennzahlen zur Prognose

4.8.1 Einführung

Die in dieser Arbeit bisher gemachten Aussagen zu den Voraussetzungen und dem methodischen Vorgehen bei der Prognose der Umweltauswirkungen von Anlagen sind für die gesamte chemische Industrie gültig. Wenn es jedoch an die Entwicklung von quantitativen Kennzahlen geht, dann sind die Verfahren der chemischen Industrie zu vielfältig, um branchenweit gültige und aussagekräftige Kennzahlen zu entwickeln. Um den Rahmen dieser Arbeit nicht zu weit zu fassen und der Vielfalt der Verfahren Rechnung zu tragen, werden im Folgenden Kennzahlen für Anlagen der *organischen Grundstoffchemie* und der *kunststoffherzeugenden Industrie* betrachtet. Es handelt sich dabei um die Herstellung von Großmengen mit Anlagengrößen zwischen 25.000 t/a und 500.000 t/a. Diese Gruppe von Anlagen bietet eine gute Basis für die Entwicklung von Kennzahlen, denn sie ist ähnlich bezüglich einer Reihe von Kriterien:

- Die Anlagen arbeiten mit ähnlichen Stoffen, nämlich organischen Molekülen und Makromolekülen.
- Es treten alle Aggregatzustände der organischen Stoffe auf.
- Die Vielfalt der verwendeten Grundoperationen ist groß genug für eine umfassende Betrachtung.
- Die Anlagen haben eine ähnliche Größe bezüglich ihres Durchsatzes.
- Sie sind wegen ihrer Größe ökologisch relevant.
- Die Anlagen stehen unter Aufsicht der Behörden (TA Luft [132])
- Sie haben einen gleichmäßig hohen Stand der Sicherheitstechnik und Umwelttechnik.
- Die Informationsbasis für diese Gruppe von Anlagen ist groß genug für die Durchführung von Regressionsrechnungen

Die in dieser Arbeit entwickelten Kennzahlen basieren auf Daten von 60 Produkten der organischen Grundstoffchemie und der kunststoffherzeugenden Industrie aus *Westeuropa Ende der 1990er Jahre*. Die Datenbasis ist damit nach Gleichung 2.17 (Seite 32) groß genug für die Durchführung von Regressionsrechnungen mit mehreren Einflussgrößen. Das Thema der örtlichen und zeitliche Gültigkeit von Kennzahlen zur Prognose von Umweltauswirkungen wird in Kapitel 4.8.3 näher betrachtet.

4.8.2 Entwicklung von Kennzahlen

Direkte Emissionen

Für den Betreiber der Anlage sind die direkten Emissionen des Verfahrens besonders wichtig, denn für sie ist er direkt verantwortlich, und sie entstehen am Standort. Eine Relevanzanalyse der direkten Emissionen für die betrachteten Verfahren, durchgeführt an 60 Produkten der organischen Grundstoffchemie und der kunststofferzeugenden Industrie zeigt Abbildung 4.6 für die in Kapitel 4.5 ausgewählten fünf Wirkungskategorien ADP, AP, EP, GWP und POCP. Die Darstellung ist normiert auf die durchschnittlichen Umweltauswirkungen in Europa innerhalb eines Jahres (Bezugsjahr 2001). Damit können die Wirkungskategorien dimensionslos in einem Diagramm darstellt und bezüglich ihrer relativen Wirkung in Europa verglichen werden. Die durchschnittlichen Umweltauswirkungen je Wirkungskategorie sind eingezeichnet. Eine Auflistung der betrachteten 60 Verfahren befindet sich in Anhang C (Seite 130).

Die Darstellung der Umweltauswirkungen der *direkten* Emissionen aus Abbildung 4.6 erlaubt einen Vergleich mit den *gesamten* Umweltauswirkungen aus Abbildung 4.3 (Seite 66). Der Einfluss der direkten Emission auf die gesamte Entscheidungsunterstützung ist so hoch, dass sie keinesfalls vernachlässigt werden dürfen: In den Umweltproblemfeldern Sommersmog (POCP) und Überdüngung (EP) treten bei den untersuchten Verfahren bis zu 65 % der gesamten Umweltauswirkungen als direkte Emissionen auf.

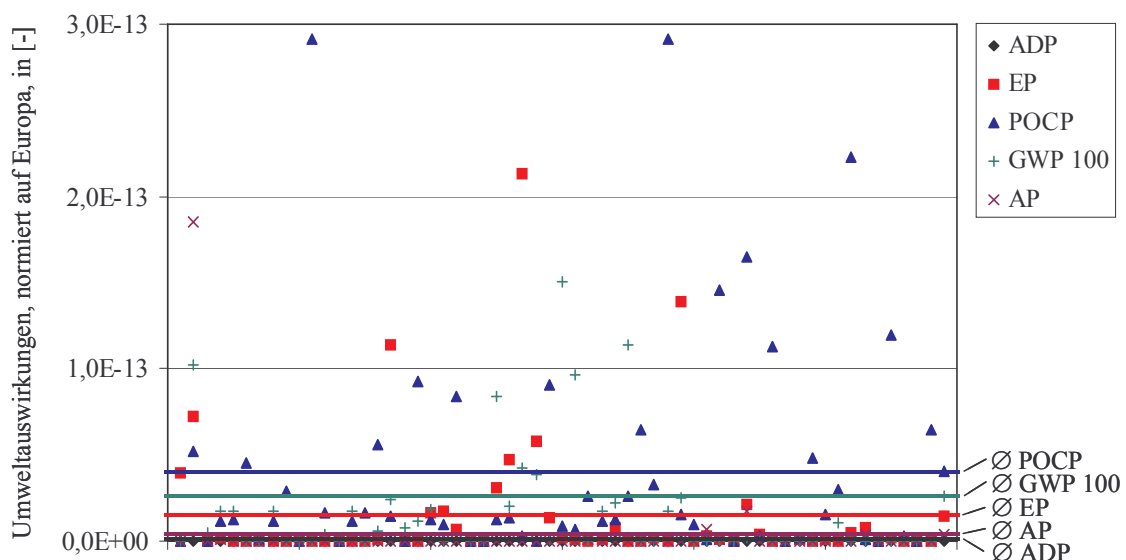


Abbildung 4.6: Umweltauswirkungen der direkten Emissionen von Verfahren zur Herstellung von je 1 kg von 60 Stoffen der organischen Grundstoffchemie und kunststofferzeugenden Industrie, Darstellung der Wirkungskategorien ADP, EP, POCP, GWP und AP, normiert auf Europa [75]

Auffällig ist, dass das Umweltproblemfeld Ressourcenverbrauch (ADP) für die betrachteten Branchen der organischen Grundstoffchemie und der kunststoffherzeugenden Industrie keine Relevanz im Systemraum Verfahren hat. Es handelt sich um verarbeitende Industrie, die Ressourcen (hauptsächlich Erdöl und Erdgas) treten bereits in verarbeiteter Form in den Systemraum Verfahren ein. Trotzdem sollte das Umweltproblemfeld Ressourcenverbrauch in der Auswertung betrachtet werden. Die Relevanzanalyse für den Systemraum Entscheidungsunterstützung in Abbildung 4.3 zeigt die Bedeutung dieses Umweltproblemfeldes für die organische Grundstoffchemie und die kunststoffherzeugende Industrie deutlich.

Verfahrensbedingte (definierte) Emissionen entstehen als Teil von Abgas, Abfall oder Abwasser, allerdings nicht unbedingt direkt am Standort.

Nur bei Beteiligung von Prozesswasser oder bei Entstehung von Wasser in der chemischen Reaktion können *Emissionen in Wasser* entstehen. Kühlwasser kommt nicht direkt mit den chemischen Substanzen in Berührung und enthält folglich keine Emissionen (abgesehen von Abwärme, die ein lokales Problem darstellen kann). Abwasser wird nicht ungereinigt in die Umwelt abgegeben, sondern in einem Klärwerk behandelt. Am Standort entstehen keine direkten Emissionen, aber Menge und Zusammensetzung des Abwassers müssen für die Entscheidungsunterstützung aufbereitet werden. Transferkoeffizienten zur Zuweisung der Emissionen in Wasser aus dem Klärwerk auf das einzelne Verfahren existieren als Bestandteil von Datenbanken zur Ökobilanzierung, z. B. in [67].

Schwersiedende Flüssigkeiten und Feststoffe fallen als *Abfall* und nicht als Emissionen an (Ausnahme: Staubförmige Emissionen). Abfall wird nicht direkt in die Umwelt abgegeben, sondern auf Deponien oder durch Verbrennung, Vergasung, Pyrolyse etc. behandelt. Analog zum Abwasser entstehen also am Standort keine direkten Emissionen. Transferkoeffizienten zur Zuweisung der Emissionen aus Deponien und Abfallbehandlungsanlagen auf das einzelne Verfahren existieren als Bestandteil von Datenbanken zur Ökobilanzierung, z. B. in [67].

Im Abgas können Gase und Feststoffe (Staub) als *Emissionen in Luft* abgegeben werden.

Feststoffe spielen als Emissionen in Luft in den betrachteten Branchen der chemischen Industrie nur eine untergeordnete Rolle. Nur 10 % der betrachteten 60 Anlagen emittieren Staub, es sind dies die Anlagen mit pneumatischem Transport von Feststoffen. Die Emissionen von Staub in Luft wirken nach heutigem Kenntnisstand nur auf das Umweltproblemfeld Humantoxizität und werden nach den Ausführungen von Kapitel 4.5 in den Auswertungen zur Entscheidungsunterstützung nicht betrachtet. Eine Kennzahl auf der Basis von durchschnittlichen Umweltauswirkungen der Staub emittierenden Anlagen (Gleichung 4.1) ist ausreichend, sie gilt für Anlagen mit pneumatischem Transport von Feststoffen. Für alle anderen Anlagen sind die Staub-Emissionen vernachlässigbar.

$$\text{Gleichung 4.1: } \dot{m}_{\text{Staub}} = 3 \cdot 10^{-5} \cdot \dot{m}_{\text{Feststoff}}$$

Die *gasförmigen Emissionen* des Verfahrens sind eine relevante Größe, weil in den Umweltproblemfeldern Sommersmog (POCP) und Überdüngung (EP) bei den untersuchten Verfahren bis zu 65 % der gesamten Umweltauswirkungen als gasförmige Emissionen auftreten. Damit sind Kennzahlen zu ihrer Bestimmung nicht präzise genug. Die Ermittlung erfolgt durch Massenstrombilanzen (Gleichung 2.2) und Komponenten-Massenstrombilanzen (Gleichung 2.3).

Emissionen in den Boden treten für die betrachteten 60 Anlagen der organischen Grundstoffchemie und der kunststofferzeugenden Industrie nicht auf. Eine Kennzahl zur Prognose dieser Emissionen wird folglich nicht benötigt. Eine Betrachtung der durch Unfälle hervorgerufenen Altlasten erfolgt in dieser Arbeit gemäß Kapitel 4.2 nicht.

Neben den verfahrensbedingten Emissionen sind die *diffusen Emissionen* in der chemischen Industrie relevant. BASF gibt z. B. für den Standort Ludwigshafen 400 Anlagen mit ca. 2.000.000 diffusen Quellen an. Die diffusen Quellen hatten dort im Jahr 1996 einen Anteil von 18 % an den organischen Emissionen [10].

Diffuse Emissionen entstehen überwiegend an statischen und bewegten Dichtungen [63]:

- Armaturen: 44 % (überwiegend statische Dichtungen),
- Flansche: 28 % (statische Dichtungen),
- Pumpen: 22 % (bewegte Dichtungen),
- Kompressoren: 6 % (bewegte Dichtungen).

Die diffusen Emissionen hängen von der Zahl der Dichtungen, der Durchflussmenge und dem Druck ab. Vereinfachend wird davon ausgegangen, dass die diffusen Emissionen einer bewegten Dichtungen ebenso hoch sind wie die einer statischen Dichtung. Kennzahlen für die Prognose von diffusen Emissionen aus Flanschen geben [134] und [70] als mittlere Emissionsmengen pro mittlerer Dichtlänge für verschiedene statische Dichtungsarten und -geometrien. Aus dieser Angabe, einer mittleren Dichtlänge pro Dichtung und der Zahl der Dichtungen in der Anlage lässt sich mit Gleichung 4.2 der Massenstrom der diffusen Emissionen $\dot{m}_{E_i, \text{diffus}}$ des Stoffes i für die statischen Dichtungen ermitteln. Die Zahl der Dichtungen wird aus der Zahl der Grundoperationen der Anlage ermittelt, denn sie ist proportional zur Zahl der Grundoperationen.

Gleichung 4.2: $\dot{m}_{E_i, \text{diffus}} = L \cdot l_{\phi} \cdot D_{\phi} \cdot GO_i$

- Übliche Dichtungsmaterialien der chemischen Industrie sind Aramidfasern, PTFE und Graphit. Als Abschätzung wird für diese Dichtungsmaterialien mit einer Leckagerate $L = 10^{-7}$ kg/s·m gerechnet [63]. Dies entspricht bei einer durchschnittlichen jährlichen

Laufzeit der Anlage von 8000 h/a und einer durchschnittlichen Dichtungslänge l_{ϕ} von 0,3 m einer Emission von 0,85 kg/a pro Flansch.

- Die Zahl der Dichtungen wird aus der Zahl der Grundoperationen GO_i bestimmt, die vom jeweiligen Stoff i als Gas oder Flüssigkeit durchströmt wird. Die durchschnittliche Zahl der Dichtungen pro Grundoperation beträgt für die untersuchten Anlagen $D_{\phi} = 50$.

Eine weitere Möglichkeit zur Ermittlung der diffusen Emissionen ist die Nutzung von Verhältniskennzahlen in Bezug zu den verfahrensbedingten Emissionen. Bathen et al. [10] geben für VOC-Emissionen aus allgemeinen chemischen Anlagen eine Verhältniskennzahl von 0,2 für Anlagen ohne besonderen Wartungsaufwand an (Gleichung 4.3). Diese Art der Ermittlung von diffusen Emissionen ist nicht speziell auf die Randbedingungen der organischen Grundstoffchemie und kunststofferzeugenden Industrie zugeschnitten, kann aber als Plausibilitätsüberprüfung der Ermittlung nach Gleichung 4.2 genutzt werden.

$$\text{Gleichung 4.3: } \dot{m}_{E_i, \text{diffus}} = 0,2 \cdot \dot{m}_{E_i, \text{definiert}} \quad [10]$$

Energieströme

Thermische Energie (bzw. Dampf) wird in einer Anlage an folgenden Stellen benötigt:

- Grundoperationen zur chemischen Stoffumwandlung
- Grundoperationen zur Stofftrennung
- Grundoperationen zur physikalischen Stoffänderung.

Aus der Gruppe der physikalischen Stoffänderung kommen die Untergruppen Formänderung und Formgebung in den betrachteten Anlagen nicht vor. Es handelt sich bei den Grundoperationen zur physikalischen Stoffänderung um die Enthalpieänderungen.

Die im Verfahren benötigte thermische Energie ist eine relevante Größe. Bei den untersuchten Verfahren werden bis zu 65 % der Umweltauswirkungen für das Umweltproblemfeld Treibhauseffekt in den betrachteten Anlagen durch thermische Energie (bzw. Dampf) verursacht. Damit sind Kennzahlen zur Bestimmung der thermischen Energie zu unpräzise. Eine Ermittlung der benötigten thermischen Energie \dot{Q}_{α} erfolgt durch Berechnung der Enthalpiestrombilanzen (Gleichung 2.4) für jede Grundoperation (jeweils Systemgrenze Grundoperation).

Die Bestimmung der Enthalpie der Stoffströme $\dot{H}_{i,\alpha}$ bzw. $\dot{H}_{i,\omega}$ ist problemlos möglich, da aus der technischen Analyse des Verfahrens die charakteristischen Temperaturen und die Stoffeigenschaften (Wärmekapazität c_p) bekannt sind.

Der Strom der Reaktionsenthalpie $\Delta\dot{H}_R$ der chemischen Stoffumwandlungen des Verfahrens ist ebenfalls bekannt. Bei Phasenübergängen von flüssig zu gasförmig kommt der Strom der Verdampfungsenthalpie $\Delta\dot{H}_V$ hinzu, die als Stoffeigenschaft bekannt ist.

Der durch mechanische oder elektrische Leistung eingebrachte bzw. abgegebene Enthalpiestrom ($\dot{W}_{i,\alpha}$ bzw. $\dot{W}_{i,\omega}$) ist für alle untersuchten Grundoperationen nicht ergebnisrelevant und kann für die Bestimmung der thermischen Energie vereinfachend vernachlässigt werden. Die Bestimmung der im Verfahren benötigten elektrischen Energie erfolgt später in diesem Kapitel.

Die Abwärmeströme $\dot{Q}_{i,\omega}$ der Grundoperationen sind aus den verfügbaren Informationen nicht direkt ableitbar, sondern müssen indirekt aus Gleichung 4.4 über die Wärmedurchgang und Wärmestrahlung aus den charakteristischen Temperaturen ermittelt werden [3].

$$\text{Gleichung 4.4: } \dot{Q}_{\omega} = k_{\phi} \cdot A_{\phi} \cdot (T - T_U) + \varepsilon_{\text{Stahl}} \cdot \sigma \cdot A_{\phi} \cdot (T^4 - T_U^4)$$

Die durchschnittlichen Werte betragen für die untersuchten Grundoperationen $k_{\phi} \cdot A_{\phi} = 0,35 \text{ kW/K}$ und $\varepsilon_{\text{Stahl}} \cdot \sigma \cdot A_{\phi} = 7,5 \cdot 10^{-10} \text{ kW/K}^4$.

Die in einer Anlage benötigte Menge *elektrische Energie* setzt sich aus folgenden Komponenten zusammen:

- Strombedarf der Grundoperationen zur Handhabung von Stoffen (z. B. Pumpen, Verdichter, der Feststofftransport erfolgt in den betrachteten Anlagen über pneumatische Förderung, also mit Verdichtern).
- Strombedarf der Grundoperationen zur Stoffvereinigung (z. B. Rührermotoren).
- Strombedarf der Grundoperationen zur Stofftrennung (z. B. Elektroabscheider). Grundoperationen zur Stofftrennung mit elektrischem Wirkungsprinzip kommen in den betrachteten Anlagen nicht vor.
- Indirekte Aufwendungen für Produktion und Betrieb (z. B. Licht, Prozessleittechnik).

Eine chemische Anlage der betrachteten Branchen hat einen durchschnittlichen Stromverbrauch von $1 \text{ MJ/kg}_{\text{Produkt}}$. Der durch den Stromverbrauch hervorgerufene Anteil der Umweltauswirkungen beträgt außer für zwei sehr stromintensive Verfahren für die untersuchten Anlagen und fünf Wirkungskategorien weniger als 10 % der gesamten Umweltauswirkungen. Es ist der Bedeutung dieser Umweltauswirkungen nicht angemessen, die Ermittlung des Stromverbrauches für jede Grundoperation aufwändig einzeln durchzuführen. Für die Ermittlung des spezifischen Stromverbrauchs einzelner Pumpen etc. fehlen zudem im Stadium der Vorstudie zur Verfahrensentwicklung Angaben wie z. B. die Förderhöhe, die erst in späteren Planungsphasen festgelegt werden.

Statt dessen bietet sich eine Betrachtung der Gesamtanlage an, bei der die elektrische Leistung der Gesamtanlage $\dot{W}_{el,Anlage}$ mit Gleichung 4.5 über die Grundoperationen mit relevantem Stromverbrauch GO_{el} (Grundoperationen zur Handhabung von Stoffen plus Grundoperationen zur Stoffvereinigung) ermittelt wird. Der Stromverbrauch der Grundoperationen ist proportional zum Durchsatz, die Stromverbrauchskennzahl s wird mit dem spezifischen Durchsatz \dot{m}_i des charakteristischen Stoffstroms i der Grundoperation multipliziert. Die Stromverbrauchskennzahl s beträgt für die untersuchten Anlagen $s = 50$ [kW·s/kg]. Die indirekten Aufwendungen für Licht etc. sind gegenüber dem Stromverbrauch der Grundoperationen bei den untersuchten Verfahren unerheblich (< 5 %) und können vernachlässigt werden.

Gleichung 4.5:
$$\dot{W}_{el,Anlage} = \sum_{i=1}^{GO_{el}} s \cdot \dot{m}_i$$

Stoffströme

Das Stoffgerüst der Anlage ist durch die in der Vorstudie zur Verfahrensentwicklung vorliegenden Informationen bezüglich der Hauptstoffe über die chemische Stoffumwandlung mit Stöchiometrie, Ausbeute und Selektivität festgelegt. Die Stoffströme von nachrangigen (nicht durch die chemischen Stoffumwandlungen direkt determinierten) *Hilfs- und Betriebsstoffen* wie z. B. Lösungsmittel oder Kühlwasser sind in ihrer Menge und der ökologischen Bedeutung ihrer Bereitstellung für das Verfahren sehr unterschiedlich. Alle Stoffe, die durch Preis oder eingesetzte Menge eine Betrachtung in der ökonomischen Analyse rechtfertigen, sind in Art und Menge aus diesen Analysen bekannt und können problemlos in der ökologischen Analyse betrachtet werden. Dies sind vor allem Lösungsmittel, die eine tragende Rolle für die Durchführung einer Grundoperation spielen. Bei den untersuchten Anlagen treten folgende Hilfs- und Betriebsstoffe auf:

- Säuren (H_2SO_4 , HCl, HNO_3 ...) sind nicht umweltrelevant (< 1 % der Umweltlasten für die untersuchten Anlagen und Wirkungskategorien), wenn sie nicht stöchiometrisch an einer chemischen Reaktion teilnehmen. In chemischen Reaktionen werden die Säuren nicht über eine Kennzahl als Hilfsstoff bestimmt, sondern aus der Stöchiometrie, Ausbeute und Selektivität der Reaktion.
- Basen (NaOH) sind analog zu den Säuren nicht umweltrelevant (< 1 % der Umweltlasten), wenn sie nicht stöchiometrisch an einer chemischen Reaktion teilnehmen.
- Kühlwasser ist, trotz teilweise großer eingesetzter Mengen, außer in der Ressourcenproblematik für Süßwasser nicht umweltrelevant (< 0,2 % der Umweltlasten). Die Ressource Süßwasser ist in Mitteleuropa nicht limitiert und wird von der

chemischen Industrie (z. B. im Vergleich mit der Landwirtschaft) nur in untergeordneten Mengen genutzt.

- Prozesswasser ist analog zum Kühlwasser nicht umweltrelevant (< 0,2 % der Umweltlasten).
- Der Verbrauch von organischen Lösungsmitteln (Hexan, Cyclohexan, Chlorbenzol...) in den Verfahren ist relevant (bis zu 5 % der Umweltlasten), obwohl in allen Fällen eine Rückgewinnung der Lösungsmittel stattfindet. Bei der Prognose müssen die Grundoperationen zur Rückgewinnung einbezogen und aus der Ausbeute der Trennschritte ein Verbrauch des Lösungsmittels errechnet werden.
- Inertgas (N₂) ist nicht umweltrelevant (< 0,5 % der Umweltlasten).
- Katalysatoren werden nicht stöchiometrisch verbraucht. Die eingesetzte Menge ist so gering, dass die Katalysatoren keine relevanten Umweltauswirkungen verursachen.

Die Umweltauswirkungen durch den Einsatz von *Materialien zur Wartung* der Anlagen können analog zu den Umweltauswirkungen durch den Bau der Anlage (siehe weiter unten in diesem Kapitel) aus ökonomischen Kenngrößen bestimmt werden.

Umweltauswirkungen durch Bau der Anlage und Mitarbeiter

Eine grobe Abschätzung der durch den *Bau der Anlage* hervorgerufenen Umweltauswirkungen U_{Anlage} kann mit Gleichung 4.6 aus den Investitionskosten, dem Anteil der Materialkosten an den Investitionskosten und den Kosten je Material erfolgen. Es wird damit die Menge des benötigten Materials berechnet und mit den spezifischen Umweltauswirkungen pro Materialmasse multipliziert.

Gleichung 4.6:
$$U_{\text{Anlage}} \approx \text{Investitionskosten}_{\text{Anlage}} \cdot \sum_{i=1}^n \frac{y_{i\Phi} \cdot u_i}{P_{i\Phi}}$$

- Die Investitionskosten der Anlage werden der ökonomischen Prognose entnommen.
- Der durchschnittliche Anteil der einzelnen Materialkosten an den Investitionskosten $y_{i\Phi}$ ist in Veröffentlichungen zur Kostenprognose beschrieben (z. B. gesamter Materialkostenanteil 50 %, bestehend aus 15 % für Eisen- und Stahlerzeugnisse und 35 % für Apparate und Maschinen [71][129]). Als Vereinfachung werden wiederum 15 % der Kosten für Apparate und Maschinen als Kosten für Eisen- und Stahlerzeugnisse angesehen.
- Die durchschnittlichen Kosten je Material $P_{i\Phi}$ werden den aktuellen Veröffentlichungen der statistischen Ämter entnommen (z. B. [141]).
- Die spezifischen Umweltauswirkungen pro Material u_i werden aus durchgeführten Ökobilanzen für Konstruktionsmaterialien aus Datenbanken entnommen (z. B. [67]).

Die Umweltauswirkungen durch den auf diese Weise abgeschätzten Bau der Anlage sind bei allen 60 untersuchten Verfahren nicht relevant für die Entscheidungsunterstützung. Auch für investitionsintensive Verfahren ist, bei einer angenommenen Nutzungsdauer der Anlage von 20 Jahren, der durch den Bau der Anlage hervorgerufene Anteil der Umweltauswirkungen für die untersuchten fünf Wirkungskategorien $< 1\%$ der gesamten Umweltauswirkungen. Eine Prognose der Umweltauswirkungen durch den Bau der Anlage ist in den Branchen der organischen Grundstoffchemie und der kunststofferzeugenden Industrie nicht notwendig.

Über den *Rückbau der Anlagen* existieren nicht genug Informationen für eine Prognose.

Die Umweltauswirkungen durch den Einsatz von *Materialien zur Wartung* der Anlagen können analog zu den Umweltauswirkungen durch den Bau der Anlage bestimmt werden, indem statt der Investitionskosten die Wartungskosten betrachtet werden (Gleichung 4.7). Da die Wartungskosten im Vergleich zu den Investitionskosten von untergeordneter Bedeutung sind, sind die Umweltauswirkungen durch die Wartung der Anlage bei allen 60 untersuchten Verfahren nicht relevant für die Entscheidungsunterstützung.

$$\text{Gleichung 4.7: } U_{\text{Wartung}} \approx \text{Wartungskosten}_{\text{Anlage}} \cdot \sum_{i=1}^n \frac{y_{i\Phi} \cdot u_i}{P_{i\Phi}}$$

Eine grobe Abschätzung der Umweltauswirkungen, die durch die *Mitarbeiter* hervorgerufen werden $U_{\text{Mitarbeiter}}$, erfolgt durch den Mitarbeiterverkehr. Der Mitarbeiterverkehr ist ein relevanter Faktor der Umweltauswirkungen der Mitarbeiter, der vom Unternehmen verursacht wird. Aus der Prognose der Zahl der direkten Mitarbeiter, der Prognose der Zahl der indirekten Mitarbeiter und einer angenommenen Fahrleistung können mit Gleichung 4.8 die Umweltauswirkungen bestimmt werden.

$$\text{Gleichung 4.8: } U_{\text{Mitarbeiter}} \approx (M_d + M_{\text{ind}}) \cdot d_{\Phi} \cdot \text{km}_{\Phi} \cdot v_{\Phi} \cdot \rho_{\text{Kraftstoff}} \cdot u_{\text{Kraftstoff}}$$

- Die Zahl der direkten Mitarbeiter M_d ist aus der ökonomischen Prognose bekannt.
- Die Prognose der Zahl der indirekten Mitarbeiter M_{ind} erfolgt über eine Verhältnisskennzahl aus der Zahl der direkten Mitarbeiter, z. B. mit 30 % Personal extra für Instandhaltung, 15 % extra für Produktkontrolle und 50 % extra als Overhead [140].
- Als durchschnittliche Fahrleistung km_{Φ} wird z. B. 50 [km / Person · Tag], als durchschnittlicher Verbrauch v_{Φ} z. B. 7 [l / 100 km] angenommenen.
- Die spezifischen Umweltauswirkungen pro Kraftstoffverbrauch $u_{\text{Kraftstoff}}$ werden aus durchgeführten Ökobilanzen für die Bereitstellung von Treibstoff und für die Fahrleistung aus Datenbanken wie z. B. [67] entnommen.

Die Umweltauswirkungen des abgeschätzten Mitarbeiterverkehr sind bei allen 60 untersuchten Verfahren nicht relevant für die Entscheidungsunterstützung. Auch für die arbeitsintensiven der betrachteten Verfahren ist der durch die Mitarbeiter hervorgerufene Anteil der Umweltauswirkungen für die untersuchten fünf Wirkungskategorien $< 0,1\%$ der gesamten Umweltauswirkungen. Eine Prognose der Umweltauswirkungen durch die Mitarbeiter ist somit in den Branchen der organischen Grundstoffchemie und der kunststoffherzeugenden Industrie nicht notwendig.

4.8.3 Zeitliche und örtliche Gültigkeit der Kennzahlen

Die Prognose von Umweltauswirkungen in dieser Arbeit befindet sich auf der Abstraktionsebene von Grundoperationen auf Basis von Aggregatzuständen der eingehenden Stoffe. Die Auswahl von Apparaten zur Umsetzung der Grundoperationen erfolgt unter ökonomischen, ökologischen und gesellschaftlichen Randbedingungen, die sich örtlich und zeitlich ändern. Daher müssen die Kennzahlen zur Beschreibung der Umweltauswirkungen einen örtlichen und zeitlichen Gültigkeitsbereich haben. Die in dieser Arbeit entwickelten Kennzahlen sind gültig für Westeuropa Ende der 1990er Jahre. Nach einigen Jahren sind diese Kennzahlen nur noch eingeschränkt gültig und müssen überarbeitet werden.

Daneben gibt es noch die Möglichkeit, dass neue noch nicht im Ordnungssystem der Abbildung 4.4 (Seite 70) enthaltene Technologien aufkommen. Aus diesem Grund sind die Kennzahlen einer kontinuierlichen Weiterentwicklung zu unterziehen.

Die *örtliche* Gültigkeit der Kennzahlen beruht auf ökonomischen, ökologischen und gesellschaftlichen Besonderheiten bezüglich Energiebereitstellung, Umweltvorschriften, Preisen und Löhnen (z. B. werden in Ländern mit hohem Lohnniveau wenig arbeitsintensive Technologien bevorzugt). Diese Besonderheiten sind im Normalfall national ausgeprägt. Große Freihandelszonen mit ähnlichen Randbedingungen (z. B. EU) können zusammengefasst werden. Dies erleichtert die Erstellung von Kennzahlen auf Basis von Regressionen, denn in einer größeren Region lassen sich leichter ähnliche Anlagen finden. Aber auch in Regionen wie der EU mit ihren einheitlichen Umweltvorschriften sind Preise und Löhne, besonders aber die Energiebereitstellung unterschiedlich ausgeprägt. Für die vorliegende Arbeit wurde trotzdem die Region Westeuropa als örtlicher Gültigkeitsbereich vorgezogen, um die Datenbasis zu verbreitern.

Eine *zeitliche* Anpassung ist nicht in so kurzen Abständen wie bei der ökonomischen Analyse notwendig. Chemieanlagen haben eine mehrjährige Lebensdauer und diese wird durch Umbau oder Nachrüstung von Teilbereichen der Anlage oft noch verlängert. Ökonomisch abgeschriebene Anlagen produzieren preisgünstig und werden auch bei Vorhandensein von neuen wirtschaftlicheren Verfahren nicht oder nur langsam ersetzt. Daher setzen sich Änderungen der Technologie nur langsam durch. Zudem werden chemische Anlagen aus

gesetzlichen Gründen und aus Sicherheitsgründen regelmäßig gewartet, eine existierende Anlage verändert ihr Energie- und Stoffgerüst außer bei Umbauten während ihrer Lebensdauer nur unwesentlich. Die Kennzahlen müssen folglich erst nach einigen Jahren angepasst werden.

Eine Anpassung der Kennzahlen ca. alle 10 Jahre erscheint ausreichend im Vergleich zu ökonomischen Indices, die üblicherweise jedes Jahr angepasst werden. In dieser Zeit ändern sich die ökonomischen und ökologischen sowie die gesetzlichen Randbedingungen so stark, dass eine Überarbeitung der Entscheidungsgrundlage angemessen ist. Dies bezieht sich sowohl auf die Kennzahlen zur Prognose des Verfahrens, als auch auf die Vor- und Nachketten, die zur Entscheidungsunterstützung betrachtet werden.

Um trotzdem Erfahrungswissen von abgeschlossenen Projekten für spätere Studien nutzen zu können, müssen die veränderten Randbedingungen angepasst werden. Um nicht alle Umweltauswirkungen neu aufnehmen und alle Berechnungen erneut durchführen zu müssen, bieten sich Ökologie-Indices e nach der Art von Preisindices an, die zur Umrechnung von Stoffströmen mit Umweltauswirkungen \dot{m}_i von einem Bezugsjahr auf ein anderes genutzt werden können (Gleichung 4.9, vergleiche Gleichung 2.7, Seite 28).

Gleichung 4.9:
$$\dot{m}_{i,2} = \dot{m}_{i,1} \cdot \frac{e_2}{e_1}$$

Ein Stoff- bzw. Energiestrom mit Umweltauswirkungen $\dot{m}_{i,1}$ wird auf diese Weise direkt in einen zeitlich angepassten Stoff- bzw. Energiestrom $\dot{m}_{i,2}$ umgerechnet, die anschließende Wirkungsabschätzung und eventuelle Bewertungsschritte sind nicht Bestandteil der Ökologie-Indices. Änderungen von Charakterisierungsfaktoren der Wirkungsabschätzung und Bewertungsschlüsseln werden separat in eine Datenbank zur Entscheidungsunterstützung eingepflegt, um größtmögliche Transparenz zu gewährleisten.

4.9 Umsetzung in die Praxis

Als erster Schritt und noch vor der Entscheidung für eine bestimmte Methode zur Prognose müssen die organisatorischen Rahmenbedingungen für die Durchführung der Prognose geklärt werden. Dabei werden üblicherweise die Aufbauorganisation (Verteilung der Aufgaben) und die Ablauforganisation (zeitliche Abfolge der Aufgaben) unterschieden.

4.9.1 Aufbauorganisation

Die Aufbauorganisation ist für die Verfahrensentwicklung in frühen Planungsphasen noch nicht eindeutig festgelegt, denn ein Projekt mit einer eigenständigen Projektorganisation existiert möglicherweise noch nicht. Es gibt mehrere Varianten der Aufbauorganisation [123]:

- Eine nicht institutionalisierte Prognose für kleine Projekte mit geringem Neuheitsgrad, bei der ein Mitarbeiter die Durchführung der Prognose neben den Tagesaufgaben erledigt. Doch „technische Fachabteilungen empfinden die zusätzliche Aufgabe [...] häufig als eine lästige Pflicht, die von der Bearbeitung von aktuellen Fragen des laufenden Geschäfts abhält“ [123].
- Die Einrichtung eines Prognoseteams aus Vertretern der beteiligten Fachabteilungen, das jeweils für ein Projekt gebildet wird.
- Die Einrichtung einer festen Abteilung, die alle Prognosen durchführt. Diese Abteilung ist mit ihrem bisherigen Fokus auf die Kostenprognose meist im kaufmännischen Bereich des Unternehmens angesiedelt.

Die zusätzliche Dimension Ökologie in der Analyse und Bewertung von Verfahrensvarianten erhöht die Komplexität der Aufgabenstellung. Eine eigenständige Abteilung aus Experten für Technologie, Ökonomie und Ökologie, die durch die ständige Durchführung von Prognosen voneinander lernen und besser miteinander kommunizieren können, ist daher sinnvoll. Die Einrichtung einer festen Abteilung hat den Vorteil, dass durch die ständige Durchführung von Prognosen ein Erfahrungswissen entsteht, das eine systematische Vorgehensweise und den Aufbau von Erfahrungswissen erleichtert.

Dem steht gegenüber, dass eine eigenständige Abteilung vom operativen Tagesgeschäft abgekoppelt ist und technische Entwicklungstendenzen später erkennt. Diese Tendenz lässt sich dadurch verringern, dass die Abteilung vorrangig aus Experten für Ökonomie und Umwelt besteht und für das jeweilige Projekt mit den passenden technischen Experten verstärkt wird. Eine andere Möglichkeit ist die Schaffung einer zentralen Verantwortlichkeit bei einem „Prognosekoordinator“ [123], der für die Organisation, den Ablauf und die Aufbereitung der Prognose verantwortlich ist, und der auf Experten aus Technik, Ökonomie und Ökologie zurückgreifen kann.

4.9.2 Ablauforganisation

Die Ablauforganisation beschreibt in einem Ablaufplan den zeitlichen Ablauf der Prognose, legt Zeitraum, Intensität und vorgesehene Bearbeitungskosten fest. Dem ökologischen Teil der Prognose muss ein eigenständiges Arbeitspaket zugestanden werden, auch wenn die Bearbeitung des ökonomischen Teils Priorität hat. Die ökologische Prognose erfolgt parallel zur Prognose der Kosten. Ein Projektstrukturplan dient zur Zerlegung des Projektes in

Teilbereiche, die getrennt voneinander bearbeitet werden. Die in Kapitel 4.6 eingeführte Zerlegung des Verfahrens in Grundoperationen bietet sich dabei als Gliederung an.

Als Grundlage für die Analyse und Bewertung dient ein Pflichtenheft, das am Anfang jeder Prognose erstellt wird. Die Dimension Ökologie muss konsequent in die Erstellung des Pflichtenheftes einbezogen werden. Um einen Erfüllungsgrad für die ökologischen Kriterien angeben zu können und eine quantitative Bewertung zu ermöglichen, ist das ökologische Pflichtenheft mit quantitativen Zielen zu formulieren. Die in Kapitel 4.4 dargestellten Wirkungskategorien, die mit je einer quantitativen Größe ein Umweltproblemfeld abdecken, eignen sich hierzu. Durch ihre abstrakten nicht-physikalischen Einheiten (wie z. B. [kg CO₂-Äquivalente] als Maß für den Treibhauseffekt) ist die Festlegung eines Zielwertes „aus dem Bauch heraus“ schwierig, es können aber im Rahmen eines kontinuierlichen Verbesserungsprozesses die Umweltauswirkungen einer Altanlage als ökologischer Maßstab herangezogen werden. Wenn im Unternehmen ein Umweltmanagementsystem mit quantifizierten Umweltzielen des Unternehmens auf Basis von Wirkungskategorien vorliegt, dann können die Zielwerte für das Verfahren an den Zielwerten des Unternehmens orientiert werden.

4.9.3 Ablage von Informationen

Das Erfahrungswissen, das bei der Realisierung ähnlicher Projekte erworben wurde, bildet für Prognosen den wichtigsten Teil der Informationsbasis. Eine geeignete Nachkalkulation und Ablage von Projektergebnissen ist zwingend erforderlich, um veraltete Eingangsinformationen zu identifizieren und fehlerhafte Ergebnisse zu verhindern. Nur eine kontinuierliche Weiterentwicklung und Überprüfung der Datenbasis erlaubt eine Anpassung der Prognose an den jeweiligen Stand der Technik und des Wissens. Dies gilt für alle untersuchten Prognosemethoden: Nicht nur die Werte der Kennzahlen ändern sich, auch die subjektiven Beurteilungsmethoden werden genauer, wenn den Experten aktuelle Informationen als Basis für ihre Einschätzungen zur Verfügung stehen. Beim Aufbau von Erfahrungswissen ist es sinnvoll, auch die aus technischen, ökonomischen und ökologischen Gründen nicht weiter verfolgten Lösungsvarianten durch Ablage der Informationen und der Gründe für die Entscheidung zugänglich zu machen.

Im Bereich der ökonomischen Prognose existieren zahlreiche externe Informationsquellen, kommerzielle Anbieter erstellen aus einer Vielzahl von Projekten Regressionsgleichungen und bieten sie zum Kauf an. Ein Nachteil dieses externen Erfahrungswissens ist, dass das Unternehmen die Randbedingungen nicht kennt, die den Regressionsgleichungen zugrunde liegen. Daher sind die Erfahrungen, die unternehmensintern gemacht wurden, für die Prognose von größerer Bedeutung. Dies gilt auch für die Prognose von Umweltauswirkungen, zumal kommerzielle Anbieter von Regressionsgleichungen bisher nicht existieren. Ein Abgleich mit externem Wissen kann gegebenenfalls durch einen Berater erreicht werden.

5 Anwendungsbeispiel

Es liegt nun eine *Vorgehensweise* auf Basis der Ökobilanz vor, um die Umweltauswirkungen von chemischen Anlagen in der Vorstudie zur Verfahrensentwicklung zu prognostizieren. Der Datenbedarf als Schwäche der Ökobilanz für den Einsatz in frühen Phasen der Verfahrensentwicklung wird durch den Einsatz von Kennzahlenmethoden vermindert. *Kennzahlen* für die Branche der organischen Grundstoffchemie und kunststofferzeugenden Industrie existieren. Im Folgenden wird die Vorgehensweise und die Anwendung der Kennzahlen an einem Beispiel dargestellt.

5.1 Auswahl eines geeigneten Beispiels

Die Durchführung einer Prognose zur Verdeutlichung der Prognose-Methode ist immer mit Unsicherheiten bezüglich des Ergebnisses verbunden, denn eine Prognose wird genau dann durchgeführt, wenn das Ergebnis in der Zukunft liegt und keine retrospektiven Erkenntnisse in Form von Messungen vorliegen. Eine existierende Anlage als Beispiel zur Verdeutlichung könnte dieses Problem umgehen, denn hier liegen bereits Messungen über die Umweltauswirkungen der fertigen Anlage vor.

Eine existierende Anlage ist aber andererseits ein ungeeignetes Beispiel, denn die reale Aufgabenstellung ist eben dadurch charakterisiert, dass Informationsmangel herrscht und heutiges Wissen in die Zukunft fortgeschrieben wird. Das Beispiel soll dazu dienen, die Vorgehensweise an einer realen Aufgabenstellung umzusetzen.

Einen möglichen Kompromiss bietet eine Verfahrensentwicklung, die eine Weiterentwicklung eines bestehenden Verfahrens darstellt. Auf diese Weise kann eine reale Aufgabenstellung bearbeitet werden, und die Ergebnisse sind zumindest in ihrer Größenordnung durch den Vergleich mit dem bestehenden Verfahren vorhersehbar. Das im Projekt BIOFOAM [89] entwickelte Verfahren zur Polymerisation, das im nächsten Kapitel 5.2 näher beschrieben wird, stellt eine derartige Weiterentwicklung eines existierenden Verfahrens dar. Es handelt sich um ein Verfahren zur Polymerisation von Polyesteramiden, bei dem bereits vorpolymerisierte Hartsegment-Blöcke (mit Amidgruppen) mit weiteren Monomeren verestert werden. Dieses Verfahren zur Veresterung ähnelt dem Verfahren der Polykondensation, das bei der Herstellung von Polyethylterephthalat (PET) angewendet wird. Der Einsatz von vorpolymerisierten Kettensegmenten hat Auswirkungen auf die Viskosität des Reaktionsgemisches und die Abtrennung von Monomeren bzw. niedermolekularen Reaktionsprodukten, so dass eine Anpassung des Verfahrens an den neuen Anwendungsfall erfolgen muss.

5.2 Prognose von Umweltauswirkungen im Projekt BIOFOAM

5.2.1 Beschreibung des Projektes

Das Projekt BIOFAOM [89] hat die Entwicklung neuer Typen von aliphatischen Block-Co-Polyestern (genauer gesagt Polyesteramiden) aus nachwachsenden Rohstoffen zum Ziel. Nach Auswahl eines kostengünstigen Rohmaterials aus nachwachsenden Rohstoffen werden die Polyesteramide für Anwendungen als feste und flexible Schaumstoffe synthetisiert. Eine Vielzahl von technisch möglichen Routen der Verwendung eines Rohmaterials aus nachwachsenden Rohstoffen wird dazu untersucht. Auf einer Technologie der Universität Twente basierend, werden die Polyesteramide zuerst im Labormaßstab hergestellt. Anschließend werden diejenigen Polymere im Pilotmaßstab hergestellt, die den Anforderungen in den Bereichen Kosten, Funktionseigenschaften und Umweltfreundlichkeit genügen.

Schließlich werden die Polyesteramide in Schaumanwendungen getestet und als Alternative zu ausgewählten Anwendungen vorgestellt. Mögliche Szenarien für das Lebensende der Bioschaumstoffe werden untersucht.

Eine integrierte entwicklungsbegleitende Entscheidungsunterstützung lenkt die ingenieurstechischen Entscheidungen in jeder Phase des Produktentwicklungszyklus. Ökologische, ökonomische und arbeitsplatzabhängige soziale Aspekte werden parallel analysiert und bewertet. Es werden verschiedene Polyesteramide mit konventionellen erdölbasierten Polymeren für den Einsatz in Schaumstoffen miteinander verglichen, um die entwicklungsfähigsten Möglichkeiten zu ermitteln. Die Problemstellung umfasst die Analyse von Reaktionsrouten in einem frühen Stadium der Verfahrensentwicklung bezüglich aller drei Dimensionen der Nachhaltigkeit.

Für die Darstellung in dieser Arbeit wird ein geeignetes Verfahren zur Polymerisation von Polyesteramiden herausgegriffen, das im Projekt BIOFOAM bis zum Stadium einer Pilotanlage entwickelt wurde.

5.2.2 Beschreibung des betrachteten Polymerisationsverfahrens

Es handelt sich bei der betrachteten Reaktion um die Herstellung von aliphatischen Polyesteramiden (PEA) als teilkristallines Block-Copolymer. Segmentierte Polyesteramide bestehen aus Amidgruppen, die als Blöcke in Ketten von Estergruppen eingelagert sind. Die Amidgruppen bilden durch Wasserstoffbrückenbindung kristalline Hartsegmente, die Estergruppen bilden amorphe Weichsegmente (Abbildung 5.1). Die Kettenlänge und Abfolge der einzelnen Monomere ist variabel und wird im Hinblick auf möglichst vollständige Phasentrennung und stabile Wasserstoffbrückenbindung zwischen den Makro-molekülen ausgewählt.

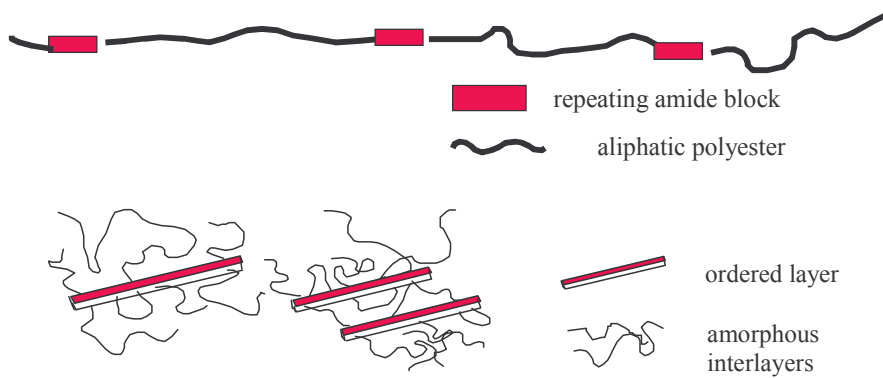


Abbildung 5.1: Modellvorstellung des Aufbaus von segmentierten Polyesteramiden aus kristallinen Hartsegment-Blöcken und amorphen Weichsegmenten, der zur Phasentrennung führt [84]

Bei der Herstellung der Polyesteramide im Labormaßstab wird in einer Ringöffnungsreaktion eines Lactons mit einem aliphatischen Diamin ein Diamid-diol hergestellt, der das Hartsegment bildet (Abbildung 5.2). Stapert et al. [130] untersuchen verschiedene Lactone und Diamine auf ihre Eignung und stellen Caprolacton und Butandiamin als geeignete Monomere dar, um mit hoher Ausbeute ein kurzes und symmetrisches Diamid-diol mit hoher Schmelztemperatur herzustellen. Länge und Symmetrie des Hartsegmentes sind wichtige Eigenschaften für die Kristallisation und für den Grad der Phasentrennung zwischen den kristallinen und den amorphen Segmenten des Co-Polymers.

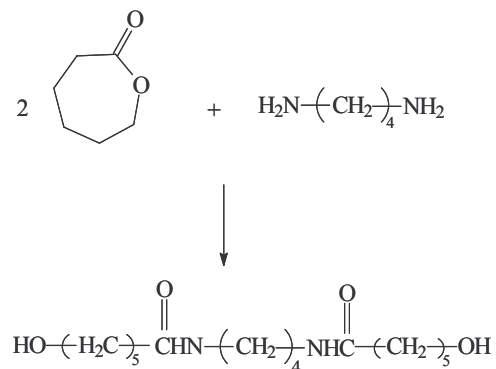


Abbildung 5.2: Stöchiometrie der Herstellung des Diamid-diols aus den Monomeren Caprolacton und Butandiamin [84]

Das Diamid-diol (Hartsegment) wird mit den weiteren Monomeren Dimethyladipat und einem Überschuss an Butandiol (die zusammen das Weichsegment bilden) verestert (Abbildung 5.3). Es handelt sich dabei um eine zweistufige Polykondensations-Reaktion. Zuerst findet bei 170 °C und Atmosphärendruck durch Umesterung der Methylgruppen des Dimethyladipats eine Abspaltung von Methanol statt, Oligomere werden gebildet.

Dann wird bei erhöhter Temperatur (190 °C) und stark vermindertem Druck das überschüssige Butandiol abdestilliert und die Polykondensation finalisiert. Das Verhältnis von Hartsegment zu Weichsegment ist variabel und lässt sich im Hinblick auf die geforderten Materialeigenschaften des Polymers (T_g , T_m etc.) einstellen. Ein Anteil des Hartsegmentes von $x = 0,25-0,5$ hat sich als günstig erwiesen [131].

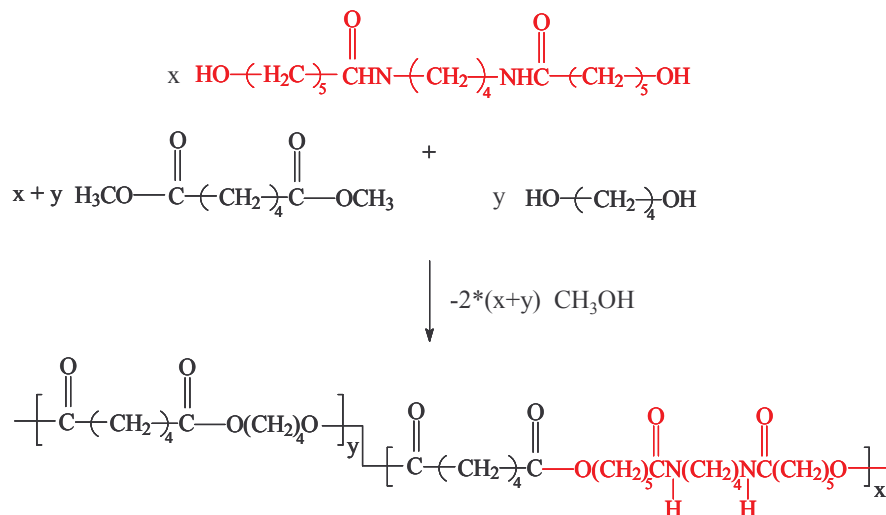


Abbildung 5.3: Stöchiometrie der Polymerisation eines Polyesteramids aus den Hartsegment-Blöcken und den Monomeren Dimethyladipat und Butandiol [84]

Die Verwendung von Dimethyladipat statt Adipinsäure hat den Vorteil, dass das gebildete Polymer eine symmetrische und einheitliche Struktur hat. Bei Verwendung von Adipinsäure tritt eine Acidolyse von Amidgruppen als Nebenreaktion ein (Abbildung 5.4) und vermindert die Symmetrie und Einheitlichkeit des Hartsegmentes [131]. Dies erschwert die Bildung von Wasserstoffbrücken und die Phasentrennung, was zu verminderten mechanischen Eigenschaften des Polymers führt.

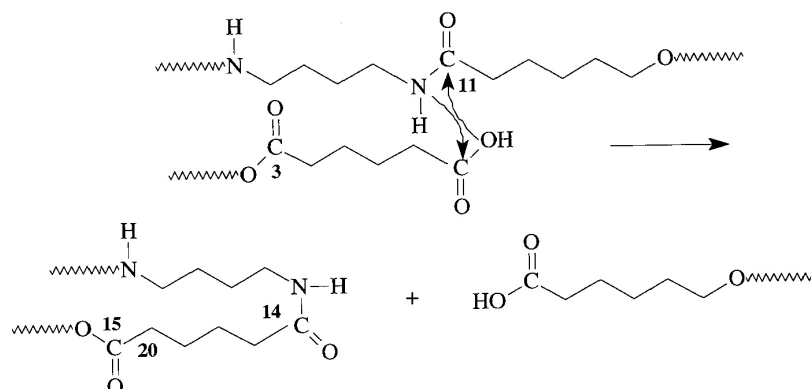


Abbildung 5.4: Die Acidolyse von Amidgruppen als Nebenreaktion verändert die Struktur des Polymers [131]

Die Umsetzung dieser Reaktionen vom Labormaßstab (im Gramm-Bereich) auf den Maßstab einer Pilotanlage (im Kilogramm-Bereich) im Projektverlauf führt zu Veränderungen:

- Um die Problematik der Abtrennung von Lösungsmitteln aus dem Polymer zu vermeiden, wird sowohl für die Herstellung der Hartsegmente als auch für die Polymerisation eine Schmelze-Polymerisation ohne zusätzliches Lösungsmittel verwendet. Dies macht einen Einsatz von Ethandiamin statt Butandiamin als Monomer für das Hartsegment notwendig
- Ethandiamin lässt sich aus nachwachsenden Rohstoffen nur mit ökologischen und ökonomischen Nachteilen herstellen. Darum wird auf konventionelles Ethandiamin aus dem Rohstoff Erdöl zurückgegriffen.

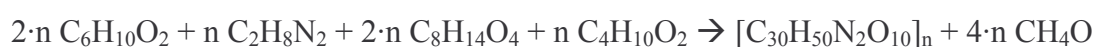
5.2.3 Prognose der Umweltauswirkungen des Polymerisationsverfahrens

Nach der Vorgehensweise von Kapitel 4.7 und unter Nutzung der in Kapitel 4.8 erarbeiteten Kennzahlen erfolgt in diesem Kapitel die Prognose einer Anlage zur Herstellung von Polyesteramid aus den Monomeren Caprolacton, Ethandiamin, Dimethyladipat und Butandiol (Kurzname des Polymers im BIOFOAM-Projekt: PEA „Rene“).

Die technischen Parameter der Anlage sind:

- Die Anlage stellt 30.000 t/a Polyesteramid her.
- Die Stöchiometrie der Polymerisation ist in Gleichung 5.1 dargestellt.
- Die Polymerisation erfolgt in zwei Schritten:
 - Herstellung eines Diamid-diols aus Caprolacton und Ethandiamin
 - Polymerisation eines Polyesteramids aus Diamid-diol, Dimethyladipat und Butandiol
- Temperatur und Druck der beiden Reaktionsschritte betragen 100 °C / 1 bar für die Ringöffnungsreaktion zur Herstellung des Diamid-diols und 190 °C / 1 mbar für die Polymerisation [83].
- Die Gesamtausbeute des Produktes Polyesteramid bezogen auf die Gesamtmasse der Monomere beträgt $Y_{PEA, \text{Gesamtmonomere}} = 95 \%$.
- Durch die Verwendung von Dimethyladipat statt Adipinsäure wird die Nebenreaktion der Acidolyse von Amidgruppen vermindert. Die Selektivität der Reaktion beträgt daraufhin idealisiert $S_{PEA, \text{Diamid-diol}} = 100 \%$.

Gleichung 5.1:



Die funktionelle Einheit ist 1 kg Polyesteramid.

Das Verfahren hat mehrere Produkte. Um eine direkte Vergleichbarkeit mit anderen Verfahren zu ermöglichen, müssen die Stoff- und Energieströme auf die Produkte verteilt werden. Es erfolgt eine Allokation nach Preis zwischen dem Hauptprodukt Polyesteramid und dem Methanol als Nebenprodukt zur Aufbereitung. Das hat in verunreinigtem Zustand keinen Markt und bekommt den internen Marktwert 0 € zugewiesen. Die Allokation nach Marktwert weist folglich dem Hauptprodukt Polyesteramid 100 % der Umwelt-auswirkungen als Lasten zu.

Abbildung 5.5 zeigt das Verfahren zur Polymerisation von Polyesteramid aus den Monomeren Caprolacton, Ethandiamin, Dimethyladipat und Butandiol in einer Darstellung als Grundfließschema nach EN ISO 10.628 [92]. Die Angaben dieser Abbildung stellen den Stand der Informationen dar, der in der Vorstudie der Verfahrensentwicklung als Ergebnis der technischen Modellbildung und als Voraussetzung für die ökologische Analyse vorliegt. Im Unterschied zur ökologischen Analyse mit ihrer funktionellen Einheit von 1 kg Polyesteramid zeigt die Darstellung nach EN ISO die Stoff- und Energieströme der Anlage mit dem Jahresdurchsatz von 30.000 t/a.

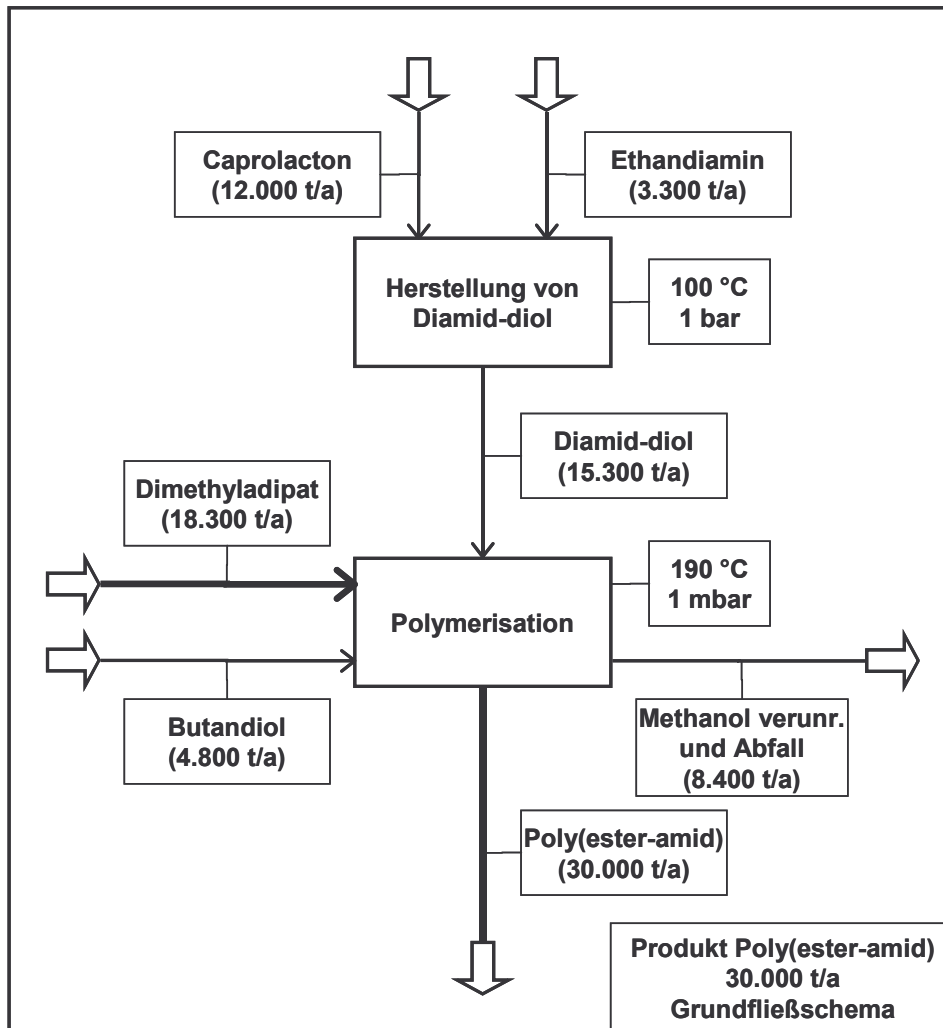


Abbildung 5.5: Grundfließschema der Polymerisation von Polyesteramid aus den Monomeren Caprolacton, Ethandiamin, Dimethyladipat und Butandiol nach EN ISO 10.628 [92] mit Angabe von Grund- und Zusatzinformationen, Detaillierungsgrad Verfahrensabschnitte

Das Verfahren wird entsprechend den Informationen der technischen Modellbildung in Grundoperationen aufgeteilt. Abbildung 5.6 zeigt erneut das Grundfließbild der Anlage zur Herstellung von Polyesteramid, diesmal mit einer Aufteilung des Verfahrens in Grundoperationen. Die Grundoperationen sind mit Buchstaben entsprechend ihrer Zuordnung zu den Hauptgruppen gekennzeichnet:

- C Chemische Stoffumwandlung
- V Stoffvereinigung
- T Stofftrennung
- H Handhabung von Stoffen
- P Physikalische Stoffänderung

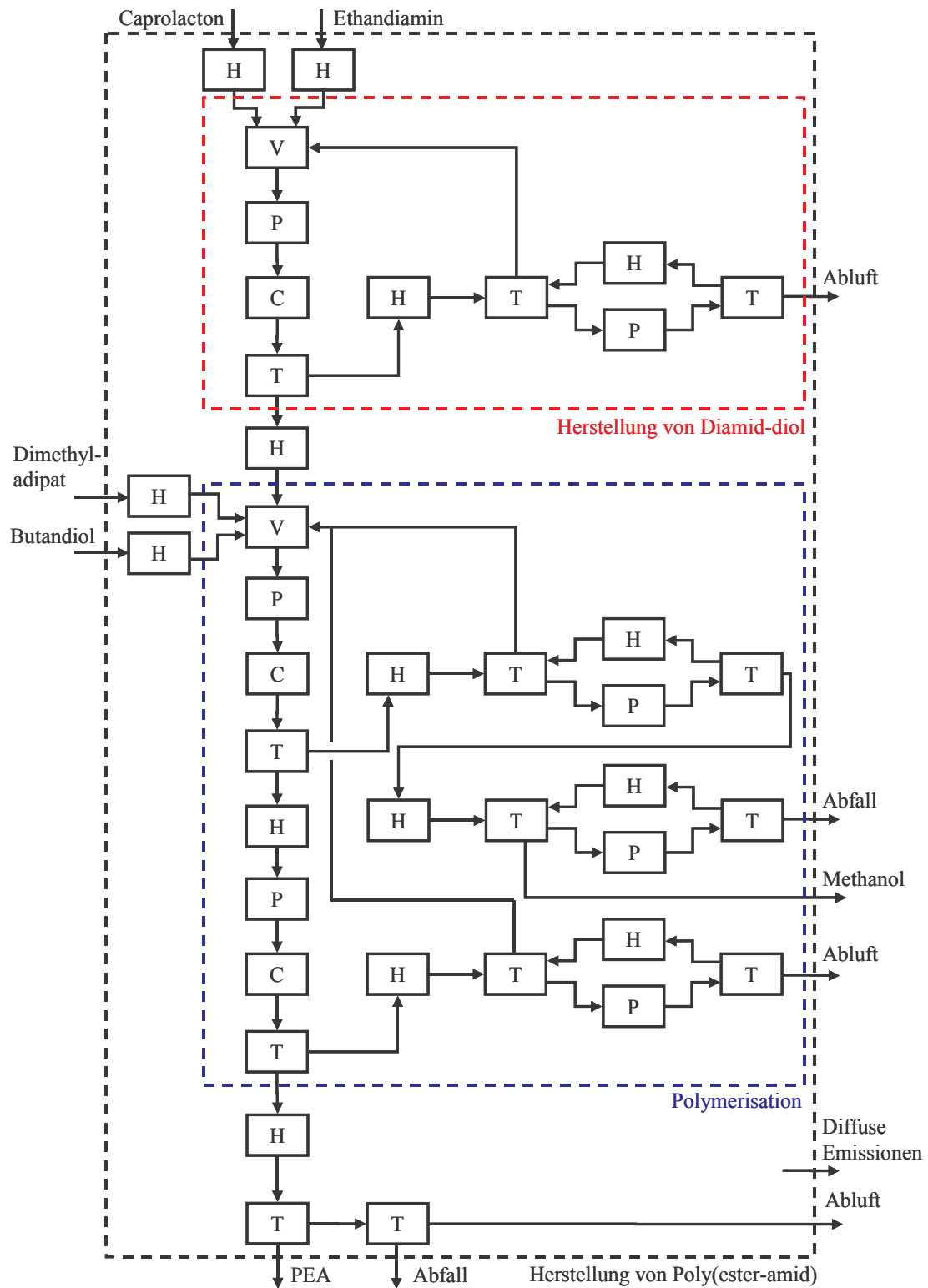


Abbildung 5.6: Grundfließschema der Polymerisation von Polyesteramid aus den Monomeren Caprolacton, Ethandiamin, Dimethyladipat und Butandiol mit Aufteilung des Verfahrens in Grundoperationen

Der in der Prognose betrachtete Systemraum ist gekennzeichnet, Hilfs- und Nebenanlagen sind nach der Definition des Systemraums in Kapitel 4.1 abgeschnitten (z. B. die Grundoperationen zur Verpackung und Lagerung des Polyesteramids).

Die Durchführung der Prognose erfolgt ausgehend von den Grundoperationen zur chemischen Stoffumwandlung grundoperationsweise und mit den in Kapitel 4.8.2 vorgestellten Kennzahlen. Es werden auf diese Weise folgende Stoff- und Energieströme ermittelt:

- Verfahrensbedingte Emissionen:
 - Emissionen in Wasser treten im untersuchten Verfahren nicht auf.
 - Es entsteht $0,05 \text{ kg}_{\text{Abfall}}/\text{kg}_{\text{Produkt}}$, bestehend vor allem aus Monomeren und Oligomeren der eingesetzten Edukte. In der Reaktion entstandenes Methanol ist zu geringen Mengen im Abfall enthalten. Der Abfall ist in seiner Elementarzusammensetzung bekannt. Diese Information reicht zur Bestimmung der Umweltauswirkungen der thermischen Behandlung des Abfalls in einer Müllverbrennungsanlage aus.
 - Es entsteht $0,23 \text{ kg}_{\text{Methanol}}/\text{kg}_{\text{Produkt}}$, mit geringen Verunreinigungen bestehend aus Monomeren und Oligomeren der eingesetzten Edukte.
 - Es fällt (nach Gleichung 4.1) $3 \cdot 10^{-5} \text{ kg}_{\text{Staub}}/\text{kg}_{\text{Produkt}}$ als Emission in Luft an, denn es erfolgt ein pneumatischer Transport von Feststoffen.
 - Gasförmige Emissionen in Luft entstehen von allen als Gas oder Flüssigkeit im Verfahren vorliegenden Stoffen (Butandiol, Caprolacton, Diamid-Diol, Dimethyladipat, Ethandiamin, Methanol) bei der Herstellung von Diamid-Diol bzw. bei der Polymerisation. Es existieren für diese Stoffe teilweise keine Charakterisierungsfaktoren zur Wirkungsabschätzung, daher werden die einzelnen aus Massenbilanzen errechneten Emissionen zu $1,8 \cdot 10^{-4} \text{ kg}_{\text{VOC}}/\text{kg}_{\text{Produkt}}$ zusammengefasst.
 - Emissionen in den Boden treten im untersuchten Verfahren nicht auf.
- Diffuse Emissionen:
 - Es entstehen diffuse Emissionen von allen als Gas oder Flüssigkeit im Verfahren vorliegenden Stoffen (Butandiol, Caprolacton, Diamid-Diol, Dimethyladipat, Ethandiamin, Methanol). Es existieren für diese Stoffe teilweise keine Charakterisierungsfaktoren zur Wirkungsabschätzung, daher werden die nach Gleichung 4.2 errechneten einzelnen Emissionen zu $1,4 \cdot 10^{-4} \text{ kg}_{\text{VOC}}/\text{kg}_{\text{Produkt}}$ zusammengefasst.
- Energie:
 - Die benötigte thermische Energie beträgt (nach Gleichung 4.4) $3 \text{ MJ}_{\text{therm}}/\text{kg}_{\text{Produkt}}$.
 - Der Stromverbrauch beträgt (nach Gleichung 4.5) $0,7 \text{ MJ}_{\text{Strom}}/\text{kg}_{\text{Produkt}}$ bei $\text{GO}_{\text{el}} = 17$.

- Betriebsstoffe:
 - Betriebsstoffe werden im betrachteten Verfahren nicht in umweltrelevantem Umfang eingesetzt. Durch die Schmelze-Polymerisation wird der Einsatz von organischen Lösungsmitteln vermieden.
- Bau der Anlage und Mitarbeiter:
 - Die Umweltauswirkungen durch Bau der Anlage und Mitarbeiter wurden mit den Abschätzungsrechnungen und Annahmen aus Kapitel 4.8.2 (Gleichung 4.6 und Gleichung 4.8) in ihrer Relevanz für das betrachtete Verfahren bestimmt. Sie können als nicht entscheidungsrelevant vernachlässigt werden.

Abbildung 5.7 zeigt ein Modell der Herstellung von 1 kg Polyesteramid aus den Monomeren Caprolacton, Ethandiamin, Dimethyladipat und Butandiol. Der in der *Prognose des Verfahrens* betrachtete Systemraum ist gekennzeichnet. Die Monomere (außer Ethandiamin) sind aus dem Rohstoff Mais hergestellt. Die Flüsse sind in [kg] dargestellt, Energieflüsse wie z. B. Strom sind folglich mit der Masse „Null“ dargestellt. Die Elementarflüsse, also alle Stoff- und Energieflüsse, die direkt aus der Umwelt entnommen werden oder direkt in die Umwelt entweichen, sind in der Abbildung nicht dargestellt.

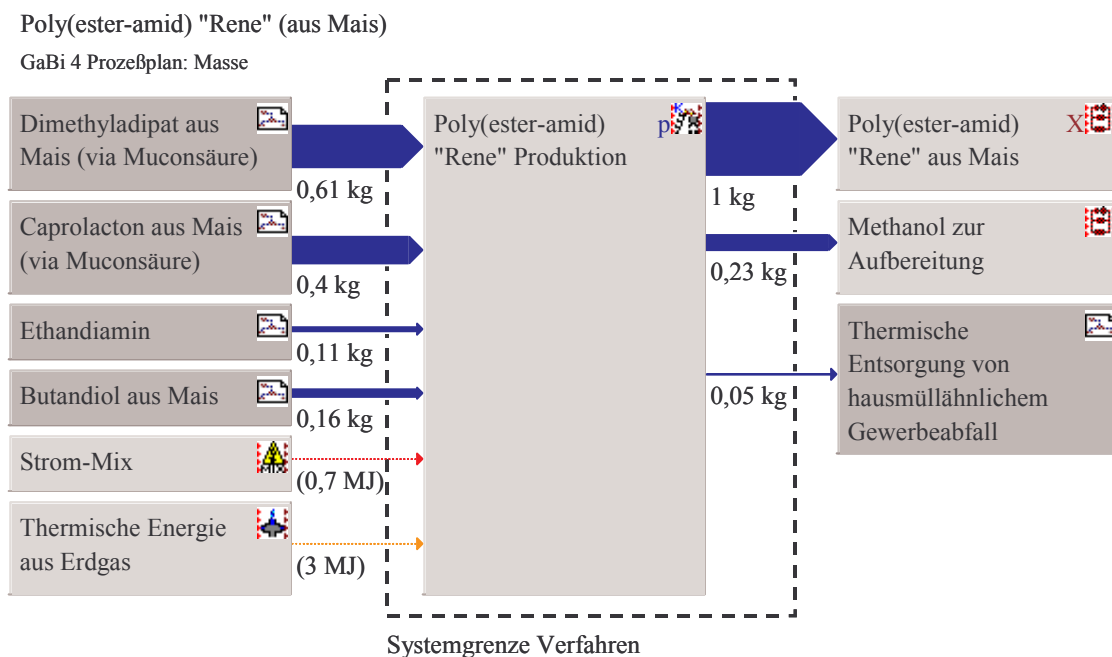


Abbildung 5.7: Modell der Herstellung von 1 kg Polyesteramid aus den Monomeren Caprolacton, Ethandiamin, Dimethyladipat und Butandiol (Polyesteramid „Rene“), Herstellung aus dem Rohstoff Mais (außer Ethandiamin), Darstellung der Flüsse in [kg] [77]

Die Ergebnisse aus der Prognose der Anlage werden in die Entscheidungsunterstützung eingebracht, die in Kapitel 5.3 ausgeführt wird.

5.2.4 Fehlerbetrachtung

Für die stochastische Fehlerbetrachtung wird bei der Prognose das Verfahren in Grundoperationen zerlegt. Für jede Teilkomponente ermittelt man neben dem eigentlichen Ergebnis ein mögliches Minimum und ein mögliches Maximum. Es wird davon ausgegangen, dass eine Wahrscheinlichkeitsverteilung in jedem Intervall vorliegt, die ihre höchste Eintrittswahrscheinlichkeit beim ursprünglich prognostizierten Wert hat. Durch die Annahme einer Wahrscheinlichkeitsfunktion (hier: einer Normalverteilung) für jedes Intervall und durch stochastische Simulation wird dann die Wahrscheinlichkeitsfunktion des Gesamtverfahrens bestimmt. Dieses Vorgehen entspricht der Monte Carlo-Simulation (siehe Kapitel 2.5.2).

Dazu erfolgte eine Teamprognose mit Experten für Ökobilanzierung am IKP. Die Experten wurden für jede Grundoperation mit den durchgeführten Berechnungen und der angewendeten Prognosemethode vertraut gemacht. Anschließend gaben sie jeweils einzeln eine Einschätzung über die Genauigkeit der Ergebnisse durch die Angabe eines möglichen Minimums und eines möglichen Maximums ab. Aus den Einzelprognosen wurde im Rahmen einer Diskussion in der Gruppe eine von allen Teilnehmern akzeptierte Teamprognose für jede Grundoperation ermittelt. Die Ergebnisse der Teamprognose wurden in die Software GaBi 4 [67] eingegeben, um eine Monte Carlo-Analyse durchzuführen.

Abbildung 5.8 zeigt die Wahrscheinlichkeitsverteilung einer Monte Carlo-Analyse (10.000 Simulationsläufe) für Ergebnisse der Prognose von Umweltauswirkungen der Polymerisation von Polyesteramid aus den Monomeren Caprolacton, Ethandiamin, Dimethyladipat und Butandiol. Die für das Verfahren prognostizierten Stoff- und Energieströme werden nach den Ergebnissen der Expertenschätzung variiert, die Vor- und Nachketten (Systemraum Entscheidungsunterstützung) sowie die Charakterisierungsfaktoren der Elementarflüsse werden als gegeben und ohne Fehler vorausgesetzt.

Die Ergebnisse des Verfahrens streuen für die Wirkungskategorie Sommersmog (POCP) besonders stark. Die Prognose der diffusen VOC-Emissionen, die in relevantem Ausmaß zu dieser Wirkungskategorie beitragen, ist nach Meinung der Experten mit besonderen Unsicherheiten verbunden. Der Medianwert und der Vertrauensbereich von 95 % ist in Abbildung 5.8 für die am weitesten streuende Wirkungskategorie POCP gekennzeichnet. In der Literatur zur Fehlerrechnung bei der ökonomischen Prognose wird oft mit dem Vertrauensbereich 95 % gearbeitet [18][108][142]. Die 95 % - Perzentile liegen für POCP bei - 4 % und + 8 %.

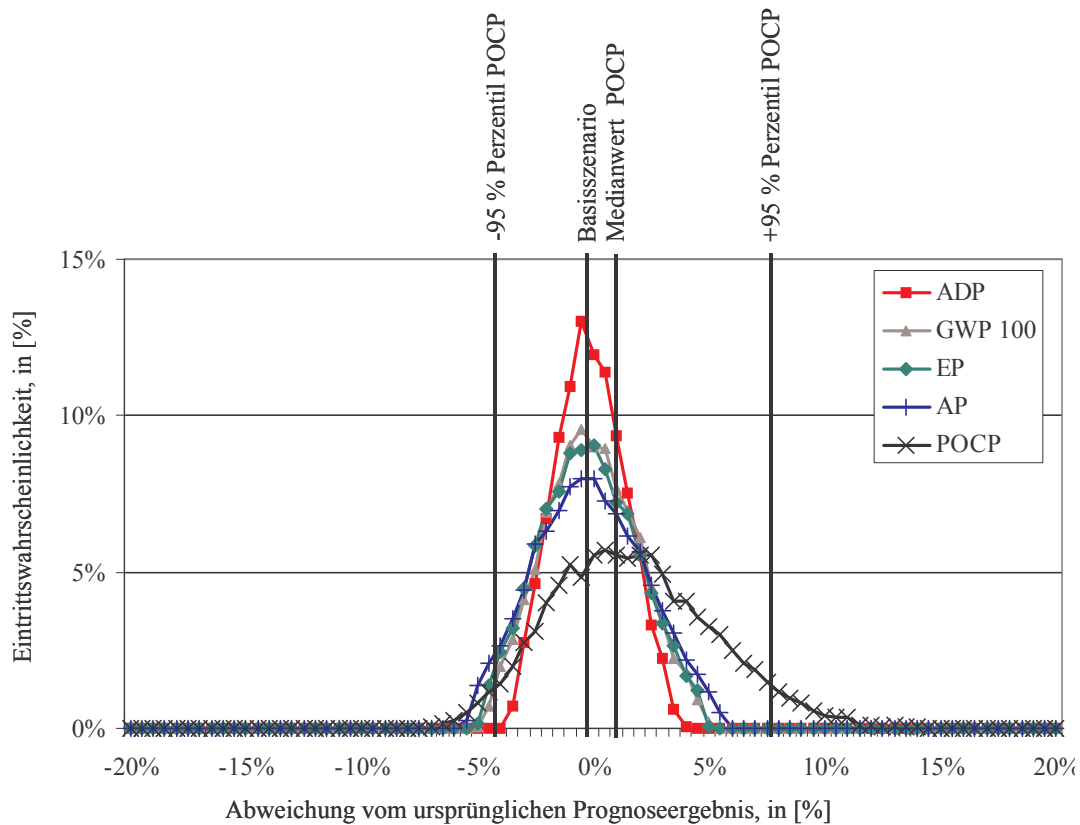


Abbildung 5.8: Wahrscheinlichkeitsverteilung der Prognoseergebnisse von Umweltauswirkungen der Herstellung von 1 kg Polyesteramid aus den Monomeren Caprolacton, Ethandiamin, Dimethyladipat und Butandiol

Einen wesentlichen Einfluss auf das Ergebnis der Fehlerrechnung für die Umweltauswirkungen haben wie erwartet die Hauptstoffströme des Verfahrens. Sie sind durch die Informationen aus der technischen Analyse vorgegeben, liegen aber trotzdem nicht als exakte Werte vor, sondern sind für die Fehlerrechnung wie alle Werte von den Experten mit einem Fehlerintervall versehen worden.

In der ökonomischen Analyse (siehe Kapitel 2.5.2) liegen bei Vertrauensintervallen von 95 % die Fehlerintervalle zwischen ± 15 und ± 40 %. Also ist die Prognose der Umweltauswirkungen im betrachteten Beispiel exakt genug, um die Anforderungen an die Genauigkeit im Vergleich zu den ökonomischen Prognosen erfüllen zu können.

5.3 Entwicklungsbegleitende Entscheidungsunterstützung im Projekt BIOFOAM

Die Problemstellung des Projektes BIOFOAM umfasst die Analyse von Reaktionsrouten zur Herstellung von Polyesteramiden aus nachwachsenden Rohstoffen im Vergleich zu konventionellen erdölbasierten Polymeren. Ökologische und ökonomische Aspekte werden parallel analysiert, die Ergebnisse dienen projektbegleitend zur Entscheidungsunterstützung

bezüglich der Wahl des Polymers und der Herstellungsrouten (vergleiche Kapitel 5.2.1). Die Entscheidungsunterstützung ist ein fortlaufender Prozess, der die Informationen über Technologien der Produktionskette aus der Projektgruppe aufnimmt und in ein Systemmodell sowie eine ökonomische und ökologische Analyse umwandelt. Dadurch wird der Ablauf des Projekts in Richtung der vielversprechendsten Produkte und Produktionsrouten geleitet.

Im Folgenden wird die Einbindung der dargestellten Methodik zur Analyse von Umweltauswirkungen in den Kontext der entwicklungsbegleitenden Entscheidungsunterstützung aufgezeigt. Dazu werden die Ergebnisse der ökologischen und ökonomischen Analyse am Beispiel der gesamten Herstellungsrouten eines Polyesteramids aus dem Rohstoff Mais betrachtet. Auf diese Weise wird gezeigt, dass sich die in Kapitel 4.1 beschriebene Einbeziehung der indirekten Umweltauswirkungen eines Verfahrens (also seine komplette Herstellungsrouten) in die Entscheidungsunterstützung praktisch umsetzen lässt und parallel zur ökonomischen Analyse erfolgen kann.

5.3.1 Ökologische Analyse

Funktionelle Einheit ist 1 kg Polyesteramid. Die beiden Herstellrouten aus nachwachsenden Rohstoffen und dem konventionellen Rohmaterial Erdöl führen zu einem chemisch identischen Polymer, das direkt auf Massensbasis verglichen werden kann.

Die Produktionsrouten von Polyesteramiden aus Mais und Erdöl werden inklusive der gesamten Wertschöpfungskette (Produktion von Vorprodukten, Betriebsstoffen, Hilfsstoffen, Energien etc.) analysiert. Abbildung 5.9 zeigt das bereits in Abbildung 5.7 (Seite 97) dargestellte Modell der Herstellung von 1 kg Polyesteramid aus den Monomeren. Der in der *Entscheidungsunterstützung* betrachtete Systemraum ist gekennzeichnet. In den Vorketten der drei aus Mais hergestellten Monomere ist der gesamte Anbau von Mais inklusive Dünger, Pestizide, Agrarmaschinen etc. sowie die Schritte zur biotechnologischen und chemischen Umwandlung von Mais bis zum Monomer enthalten. Das Modell der Produktion des Polymers aus Erdöl unterscheidet sich durch die Vorketten der Monomere, bei denen alle Schritte von der Förderung des Rohöls bis zu den Monomeren Bestandteil der Analyse sind. Die benötigte Menge an Monomeren und Energie für das Verfahren und die Nachketten von Methanol und Abfall unterscheiden sich nicht.

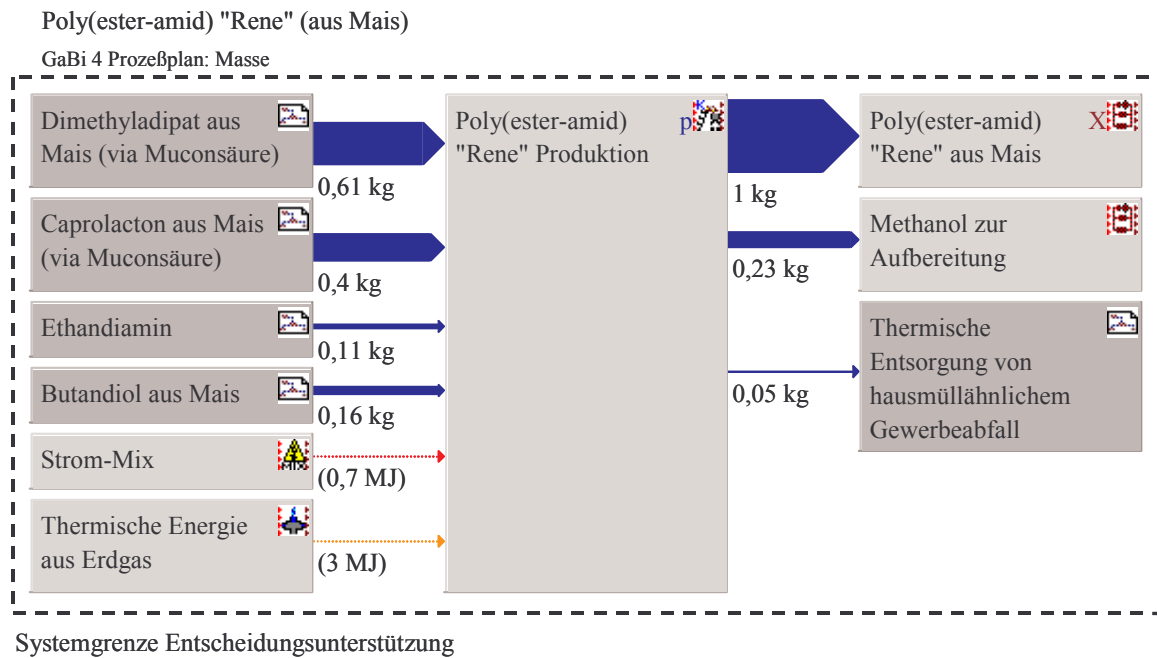


Abbildung 5.9: Modell der Herstellung von 1 kg Polyesteramid aus den Monomeren Caprolacton, Ethandiamin, Dimethyladipat und Butandiol, Herstellung aus dem Rohstoff Mais (außer Ethandiamin), Darstellung der Flüsse in [kg] [77]

Die verwendeten Daten sind präzise, unter Berücksichtigung des für Forschungsprojekte typischen Informationsmangels. Datenlücken werden durch Prognosen auf Basis der eingesetzten Produktionstechnologien geschlossen. Die verwendeten Daten bilden repräsentative „beste verfügbare Technologien“ der EU in den letzten Jahren ab, um die Konsistenz der Daten sicherzustellen werden die spezifischen Randbedingungen eines Landes (hier: Deutschland) verwendet. Es werden Daten von Verfahren im industriellen Maßstab verwendet. In Fällen, bei denen im Projektkonsortium nur Informationen über Labor- oder Pilotmaßstab vorliegen, werden diese auf Basis der verwendeten Produktionstechnologien skaliert. Eine Dokumentation der Qualität der verwendeten Daten befindet sich in Anhang A (Seite 123). Die im Projekt relevanten Wirkungskategorien Treibhauseffekt (GWP_{100}), Ressourcenverbrauch (Verbrauch von nicht erneuerbaren energetischen Ressourcen), Überdüngung (EP) und Sommersmog (POCP) werden zur Ergebnisdarstellung verwendet. Alle anderen Wirkungskategorien wurden betrachtet, haben sich jedoch in der Auswertung als nicht ergebnisentscheidend erwiesen. Zusätzlich zu den in Kapitel 4.4 als sinnvoll für die chemische Industrie dargestellten Wirkungskategorien ist in BIOFOAM wegen der Herstellung der Polyesteramide aus nachwachsenden Rohstoffen die Kategorie Flächennutzung relevant. Dieses Beispiel zeigt, dass bei der Wahl der Wirkungskategorien für die Entscheidungsunterstützung sorgfältig vorgegangen werden muss, um keine relevanten Umweltauswirkungen zu vernachlässigen.

Abbildung 5.10 zeigt die Ergebnisse der ökologischen Analyse von 1 kg Polyesteramid aus den Monomeren Caprolacton, Ethandiamin, Dimethyladipat und Butandiol. Es werden dabei die beiden Herstellungsrouten aus dem Rohmaterial Mais und dem konventionellen Rohmaterial Erdöl verglichen. Der Anteil der Umweltauswirkungen, die direkt im Verfahren zur Polymerisation entstehen, ist gekennzeichnet. Es wird deutlich, dass die direkten Umweltauswirkungen nur einen kleinen Teil der gesamten Umweltauswirkungen ausmachen (max. 4 % der Umweltauswirkungen für Sommersmog). Zur Entscheidungsunterstützung muss offensichtlich der gesamte Systemraum Technosphäre betrachtet, die indirekten Umweltauswirkungen einbezogen werden (vergleiche Kapitel 4.1). Dieser erweiterte Systemraum ist aber nur dann einer Betrachtung zugänglich, wenn zuvor im Schritt der Prognose des Verfahrens die Stoff- und Energieströme bestimmt wurden.

In der Abbildung sind für das Polymer aus dem Rohmaterial Mais, das als Referenz für die Darstellung dient, die Absolutwerte der einzelnen Wirkungskategorien jeweils in der Referenzeinheit der Wirkungskategorie angegeben (z. B. liegen die Umweltauswirkungen des Polymers aus Mais in der Kategorie Treibhauseffekt GWP₁₀₀ bei 6,4 kg CO₂-Äquivalenten)

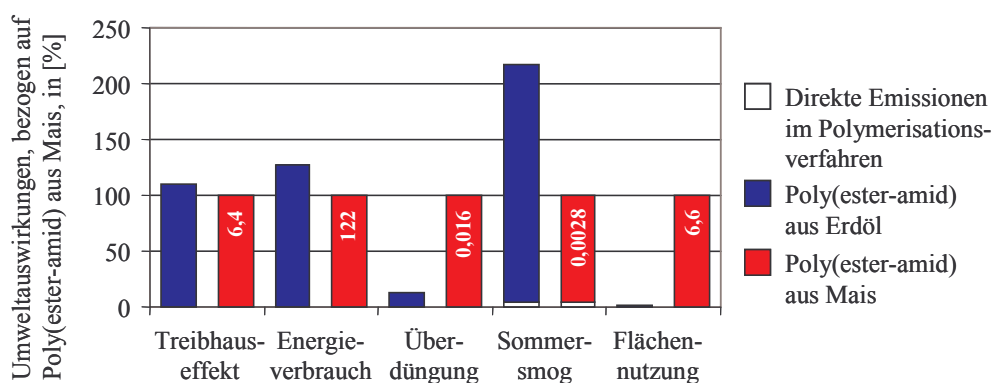


Abbildung 5.10: Ergebnisse der ökologischen Analyse von 1 kg Polyesteramid aus den Monomeren Caprolacton, Ethandiamin, Dimethyladipat und Butandiol, Herstellung aus dem konventionellen Rohstoff Erdöl, Darstellung normiert auf die Ergebnisse des chemisch identischen Polymers aus dem Rohstoff Mais (außer Ethandiamin) [76]

Die Ergebnisse der ökologischen Analyse liegen auf der Ebene von Wirkungspotentialen vor und sind für eine weiterführende ökologische und gegebenenfalls dimensionsübergreifende Bewertung nach Kapitel 2.6 geeignet.

5.3.2 Ökonomische Analyse

Parallel zur Prognose der Umweltauswirkungen wird im Projekt BIOFOAM auch eine ökonomische Analyse durchgeführt. Sie umfasst nicht nur Verfahren zur Polymerisation, sondern einen ganzen Abschnitt der Herstellungsrouten. Es handelt sich dabei um denjenigen

Abschnitt der Herstellungsrouten, der innerhalb des Projektkonsortiums stattfinden würde, also um die gesamten Verfahren der Herstellung der Monomere aus dem Rohstoff Mais und der anschließenden Herstellung des Polymers.

Es handelt sich zudem um ein Forschungsprojekt, Marktpreise für das Polymer und auch die Zwischenprodukte existieren nicht (oder verändern sich möglicherweise durch die neuen Herstellrouten). Eine traditionelle Kosten- bzw. Gewinnrechnung kann daher nicht erfolgen, es wird für die ökonomische Analyse auf die „Total Production Cost“-Methode des „Life Cycle Costing“ zurückgegriffen. Dabei erfolgt eine Berechnung des Produktwertes aus der Summe der Kosten und einer angenommenen „Return on Invest“-Rate für jedes Verfahren. Auf diese Weise erhält man ohne die Unsicherheiten der Prognose von Marktwerten einen Produktwert, der zur Schwachstellenanalyse und Routenauswahl genutzt wird. Eine weiterführende Darstellung und Diskussion der angewendeten Methode und weiteren möglichen Methoden des „Life Cycle Costing“ ist in Anhang B (Seite 127) dargestellt

Abbildung 5.11 zeigt ein Modell der Herstellung von 1 kg Polyesteramid aus den Monomeren Caprolacton, Ethandiamin, Dimethyladipat und Butandiol. Die Monomere sind aus dem Rohstoff Mais hergestellt (außer Ethandiamin). Die Flüsse sind in [€] dargestellt. Die nicht an Stoffströme gebundenen Kosten (z. B. Lohnkosten) sind in der Abbildung nicht dargestellt. Das ökonomische Modell (Abbildung 5.11) und das ökologische Modell (Abbildung 5.7, Seite 97) basieren auf gemeinsamen Stoff- und Energieströmen.

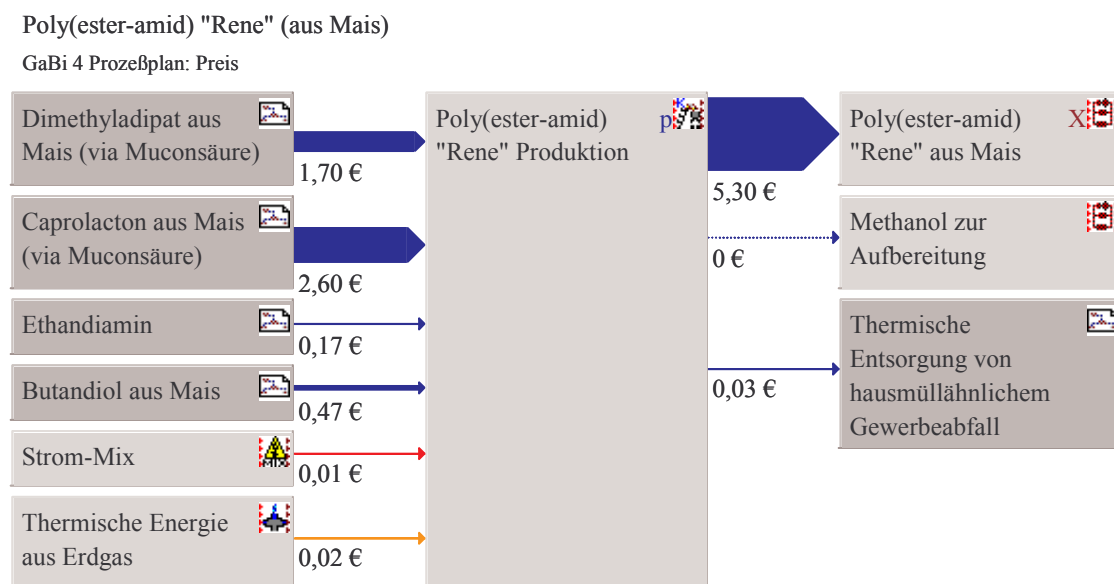


Abbildung 5.11: Modell der Herstellung von 1 kg Polyesteramid aus den Monomeren Caprolacton, Ethandiamin, Dimethyladipat und Butandiol, Herstellung aus dem Rohstoff Mais, Darstellung der Flüsse in € [79]

Die folgende Abbildung 5.12 zeigt die Ergebnisse der ökonomischen Analyse von 1 kg Polyesteramid aus den Monomeren Caprolacton, Ethandiamin, Dimethyladipat und Butandiol. Es werden dabei die beiden Herstellungsrouten aus dem Rohmaterial Mais und dem konventionellen Rohmaterial Erdöl verglichen. Der Anteil der kalkulatorischen Kosten und des Gewinns, die direkt im Verfahren zur Polymerisation entstehen, ist gekennzeichnet. Es wird deutlich, dass das Polymerisationsverfahren einen gewichtigen Anteil am ökonomischen Ergebnis hat.

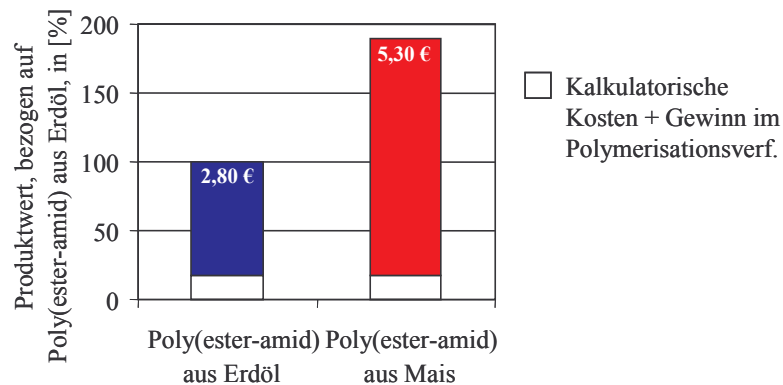


Abbildung 5.12: Ergebnisse der ökonomischen Analyse von 1 kg Polyesteramid aus den Monomeren Caprolacton, Ethandiamin, Dimethyladipat und Butandiol, Herstellung aus dem Rohstoff Mais (außer Ethandiamin), Darstellung normiert auf die Ergebnisse des chemisch identischen Polymers aus dem konventionellen Rohstoff Erdöl [76]

5.3.3 Schlussfolgerungen

Selbst die umweltfreundlichsten Produkte und Verfahren können ihre günstigen Eigenschaften nicht entfalten, wenn sie keinen wirtschaftlichen Erfolg haben. Dementsprechend hat das Projektteam zu Beginn des Projektes BIOFOAM einen Zielpreis für das Polymer und einen ökologischen Benchmark festgelegt. Abbildung 5.13 zeigt Routen zu den Monomeren des Polyesteramids. Die gewählten Monomere sind gekennzeichnet. Diejenigen Routen, die wegen Polymereigenschaften, hohen Kosten, hohen Umweltauswirkungen oder schlechter Verfügbarkeit von Rohstoffen offensichtlich nicht für eine Produktion in großem Umfang akzeptabel sind, sind unterbrochen markiert; die gewählten Routen sind durchgehend markiert.

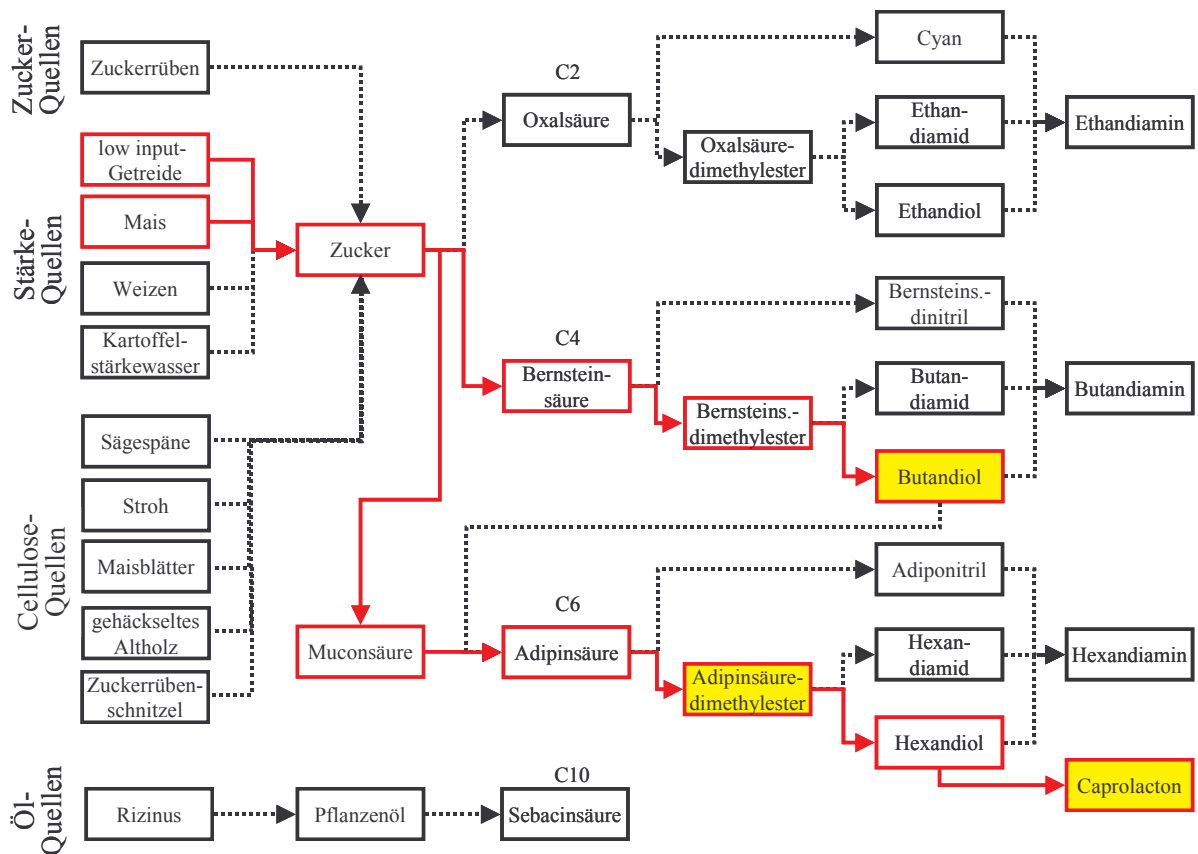


Abbildung 5.13: Auswahl von ökologisch und ökonomisch sinnvollen Herstellungsrouten von Polyesteramiden aus nachwachsenden Rohstoffen im Projekt BIOFOAM [78]

Es wird auf diese Weise gezeigt, dass ökologische und ökonomische Aspekte parallel analysiert und die Ergebnisse projektbegleitend zur Entscheidungsunterstützung bezüglich der Wahl des Polymers und der Herstellungsrouten genutzt werden können. Dadurch wird der Ablauf der Verfahrensentwicklung in Richtung der vielversprechendsten Produkte und Produktionsrouten geleitet.

6 Diskussion und Ausblick

6.1 Diskussion

Mit dieser Arbeit liegt eine Vorgehensweise zur Prognose von Umweltauswirkungen von chemischen Anlagen vor:

- Sie ist angepasst an die Situation der Verfahrensentwicklung in der Vorstudie mit Informationsmangel und hoher Zahl von Lösungsmöglichkeiten.
- Sie ist konsistent zur technischen und ökonomischen Analyse bezüglich Informationen, Modellbildung und Methodik zur Analyse.

Basis der Methode ist die Ökobilanz mit ihrer Abfolge von Modellbildung, Sachbilanz, Wirkungsabschätzung und Bewertung. Es werden Stoff- und Energieströme prognostiziert, die direkt in die Wirkungsabschätzung eingehen können. Die prognostizierten Größen sind für eine Bewertung nach in der Ökobilanz üblicherweise verwendeten Methoden wie z. B. der „Environmental-Theme-Methode“ geeignet. Der Datenbedarf als Schwäche der Ökobilanz für den Einsatz in frühen Phasen der Verfahrensentwicklung wird durch den Einsatz von Kennzahlenmethoden (Kapitel 4.8) vermindert.

Für die Wirkungsabschätzung von Umweltauswirkungen von chemischen Anlagen sind diejenigen Wirkungskategorien für die Verwendung als Entscheidungsgrundlage besonders geeignet, die wissenschaftlich-methodisch stabil und in der betrachteten Industriebranche relevant sind. In der Arbeit werden Vorschläge gemacht, welche Wirkungskategorien sich für die Prognose von Umweltauswirkungen von chemischen Anlagen eignen (Kapitel 4.4). Diese Wirkungskategorien haben sich in der Durchführung einiger Projekte im Bereich der chemischen und kunststofferzeugenden Industrie als relevant und stabil erwiesen.

Die Auswahl von Wirkungskategorien für eine Studie muss mit großer Umsicht erfolgen. Die von Politik, Experten, Gesellschaft und Unternehmen als relevant eingeschätzten Umweltproblemfelder sind einer stetigen Veränderung unterworfen. Dies gilt sowohl für die wissenschaftlich-methodische Weiterentwicklung des Wissens, als auch für die Wahrnehmung von Umweltproblemfeldern mit besonderer Dringlichkeit. Ein Unternehmen ist darauf angewiesen, in stetigem Dialog mit allen Interessengruppen zu stehen und Veränderungen von Präferenzen in die Entscheidungsfindung einzubeziehen.

Systemraum der *Prognose* ist das betrachtete Verfahren (Kapitel 4.1). Der Aufwand zur Informationsbeschaffung ist für diesen Systemraum handhabbar. Um die Genauigkeit der Prognose zu erhöhen, wird der betrachtete Systemraum „Verfahren“ in die Grundoperationen des Verfahrens unterteilt und diese werden einzeln prognostiziert. Das Ordnungssystem der Grundoperationen unterscheidet innerhalb der Hauptgruppen die Grundoperationen anhand des Aggregatzustandes der eintretenden Stoffe. Dieses Ordnungssystem wird entsprechend

der Anforderungen der ökologischen Analyse modifiziert, indem chemische Stoffumwandlungen und diffuse Emissionen in die Systematik aufgenommen werden (Kapitel 4.6.2).

Zur anschließenden *Entscheidungsunterstützung* empfiehlt es sich, den gesamten Teil des Produktlebenszyklus, der vom Produzenten direkt und indirekt beeinflusst werden kann, in den Systemraum einzubeziehen. Für die in dieser Arbeit betrachtete Problemstellung reicht es aus, dass das Wissen über die indirekten Umweltauswirkungen als Ökoprofile in Form einer „black-box“ vorliegt.

Es ist für diese Arbeit statthaft, das Vorhandensein von Informationen über Vor- und Nachketten als gegeben vorauszusetzen. In den letzten zwei Jahrzehnten sind tatsächlich sehr viele Herstellungsrouten untersucht worden und stehen als „black-box“ zur Verfügung bzw. können von Dienstleistern bezogen werden. Wenn über ein Verfahren der Herstellungskette die benötigten Informationen aus der technischen und ökonomischen Analyse vorliegen, dann kann es ebenso wie das zu untersuchende Verfahren durch eine Prognose bestimmt werden. Eine andere Möglichkeit ist, die gesamte Herstellungskette durch eine Prognose zu bestimmen, z. B. durch einen Vergleich mit einem ähnlichen Stoff, über den Kenntnisse bezüglich Umweltauswirkungen der Herstellungskette vorliegen (Adaptionsmethode). Das Ergebnis der Entscheidungsunterstützung wird umso ungenauer, je mehr Annahmen getroffen werden müssen. Eine Fehlerrechnung durch stochastische Methoden ist immer sinnvoll, um die mögliche Genauigkeit einordnen zu können. In einigen Fällen mit hohen Unsicherheiten wird es notwendig sein, eine Ökobilanzstudie über Teile der Herstellungskette durchzuführen, um zu einer angemessen genauen Entscheidungsgrundlage zu kommen.

Funktionelle Einheit der Prognose ist das (Haupt-)Produkt des Verfahrens in physikalischen Größen wie z. B. [Stück] oder [kg]. Dies erlaubt den Vergleich von Anlagen verschiedener Größe und Auslastung sowie von Verfahren mit unterschiedlichen Nebenprodukten (Kapitel 4.2). Aufgrund der Nähe zur ökonomischen Analyse wird für Nebenprodukte die Allokation nach Marktwert verwendet (Kapitel 4.3). Durch das Allokationsprinzip kommt zum Ausdruck, aus welchem Grund das Verfahren stattfindet (Verursacherprinzip). Nachteilig ist, dass die Wahl eines Allokationsschlüssels einen Schritt subjektiver Bewertung über den Grund des Verfahrens beinhaltet. Eine grundsätzliche Lösung für die Wahl des sinnvollsten Verteilungsschlüssels ist nicht zu erwarten, Bewertungsschritte sind immer mit Diskussionen über Wertvorstellungen verbunden. Aus diesem Grund empfiehlt es sich, verschiedene sinnvolle Verteilungsschlüssel im Rahmen einer Sensitivitätsuntersuchung daraufhin zu überprüfen, wie sie das Gesamtergebnis ändern.

Für die Umsetzung der Vorgehensweise zur Prognose in einem größeren Unternehmen ist die Einrichtung einer eigenständigen Abteilung aus Experten für Technologie, Ökonomie und Ökologie günstig. Die Experten können durch die ständige Durchführung von Prognosen

voneinander lernen und besser miteinander kommunizieren. Die ökologische Prognose erfolgt möglichst parallel zur Prognose der Kosten. Als Grundlage für die Analyse und Bewertung dient ein Pflichtenheft, das quantitative Ziele auf Basis von Wirkungskategorien für die ökologische Analyse formuliert.

Es gibt stets verschiedene Möglichkeiten zur Modellbildung, Analyse und Bewertung. Alle Möglichkeiten sind gleichwertig, denn jede Modellbildung ist ein Versuch, die Realität vereinfachend abzubilden und anschließend durch Analyse und Bewertung einer rationalen Entscheidung zugänglich zu machen. Die Auswahl der Methoden erfolgt nach dem ökonomischen Prinzip, um für den konkreten Anwendungsfall bei geringstem Aufwand ein Ergebnis zu liefern, das nah genug an der Realität ist.

Die Modellbildung ist geeignet, um kosten- und zeitintensive Versuche zu vermindern. Sie erfordert allerdings praktische Versuche im Labor, den Bau von Pilotanlagen etc. zur Validierung der Modelle, um eine belastbare Grundlage für die Entscheidung zu bekommen. Die Modellbildung (und ihre Nachkalkulation) ist ein Wissensspeicher, der nur bei kontinuierlicher Pflege eine nachhaltige Wirkung entfalten und die Kosten zur Entscheidungsfindung senken kann.

Die in dieser Arbeit beschriebene Vorgehensweise zur Prognose von Umweltauswirkungen bei chemischen Anlagen hat seinen Fokus auf der innerbetrieblichen Anwendung. Aus Gründen der legitimen Geheimhaltung sind sicher nicht alle der verwendeten Informationen dazu geeignet, einer breiten Öffentlichkeit (und damit auch dem Wettbewerber) kommuniziert zu werden. Eine Möglichkeit, die diesem Gedanken Rechnung trägt, ist die Kommunikation der Ergebnisse auf der Ebene von Wirkungskategorien. Es handelt sich dabei um eine überschaubare Zahl objektiver und quantitativer Kennzahlen, die keine Rückschlüsse auf Details des Verfahrens zulassen. Subjektive Wertvorstellungen sollten nicht Gegenstand der Kommunikation sein. Die Kommunikation von Ergebnissen der ökologischen oder gar dimensionsübergreifenden Bewertung verbietet sich dadurch.

6.2 Ausblick

Einbeziehen von Risiken durch Unfälle

Die chemische Industrie hat mit der Handhabung von toxischen, explosionsgefährlichen oder in anderen Worten sicherheitsrelevanten Stoffen zu tun. Diese Stoffe sind allerdings für die ökologische Analyse in dieser Arbeit nur dann relevant, wenn sie im durchschnittlichen Betrieb der Anlagen ohne Unfälle in die Umwelt entweichen. Einige bestehende Methoden zur ökologischen Bewertung beziehen ökologische Risiken mit ein, indem sie das Gefährdungspotential der beteiligten Stoffe abschätzen, z. B. durch die Einordnung der Stoffe in Gefahrenklassen analog zu ihrer Einstufung nach Sicherheitsdatenblatt [117]. Dieses

Vorgehen ist anfällig für Fehleinschätzungen, denn auch Stoffe mit hohem Gefährdungspotential können ein geringes Risikopotential haben, wenn durch zuverlässige Anlagen- und Sicherheitstechnik die Wahrscheinlichkeit für einen Unfall gering gehalten wird.

In der ökonomischen Analyse errechnet man mit Gleichung 6.1 das Risiko von Unfallfolgen aus dem möglichen Schaden und der Eintrittswahrscheinlichkeit des Unfalls.

$$\text{Gleichung 6.1:} \quad \text{Risiko [€/a]} = \text{Schaden [€]} \cdot \text{Eintrittswahrscheinlichkeit [1/a]}$$

Eine Methode zur Einbeziehung von Unfällen in die Ökobilanz, die sich der Eintrittswahrscheinlichkeiten von Unfällen aus der ökonomischen Analyse bedienen, wird derzeit von Wolf und Eyerer vorgestellt [156][159]. Mit dieser Methode können die ökologischen Risiken durch Unfälle einbezogen und der Nutzen von Sicherheitstechnik direkt mit den Aufwendungen verglichen werden. Eintrittswahrscheinlichkeiten und ökologische Unfallfolgen stehen derzeit allerdings nur retrospektiv zur Verfügung.

Die soziale Dimension in der Analyse bei Verfahrensentwicklungen

In der Einführung dieser Arbeit (Kapitel 1.2) wurde auf die soziale Dimension als Teil der Nachhaltigkeit hingewiesen, die bisher meist nicht parallel zur technischen, ökonomischen und ökologischen Dimension analysiert wird.

Es gibt allerdings Ansätze, soziale Aspekte in die Analyse und Bewertung von Produkten [120] oder Unternehmen [53][104] einzubeziehen. Die Arbeiten am IKP konzentrieren sich auf die Analyse von Produkten durch quantifizierbare und arbeitszeitabhängige soziale Faktoren [8][158][160].

Dabei stehen folgende soziale Faktoren im Fokus:

- Auf das Produkt bezogene Arbeitszeit (Life Cycle Manpower) unter Berücksichtigung des Qualifikationsniveaus
- Personenbezogene Unfälle am Arbeitsplatz mit Unterteilung in tödliche und nicht tödliche Unfälle
- Arbeitszeitabhängige soziale Faktoren wie Kinderarbeit, Gerechtigkeit zwischen den Geschlechtern, Recht zur Organisation der Arbeitnehmer etc.

Eine erste Anwendung der sozialen Analyse parallel zur ökonomischen und ökologischen Analyse wurde im bereits in Kapitel 5.2 beschriebenen Projekt BIOFOAM am IKP durchgeführt [76]. Es bleiben aber noch einige Fragen hinsichtlich der Methodik und der Beschaffung von Daten ungeklärt. Die nächsten Jahre werden sicher weiteren Fortschritt bringen und den Einsatz der sozialen Analyse für die Verfahrensentwicklung ermöglichen.

Parallele Analyse aller Dimensionen der Nachhaltigkeit in einer Software zur technischen Modellbildung

Die Analyse der verschiedenen Dimensionen der Nachhaltigkeit (Ökonomie, Ökologie, Soziales) hat bezüglich der angewendeten Methodik und auch bezüglich der benötigten Daten viele Gemeinsamkeiten. Es ist ein naheliegender Gedanke, den Aufwand zur Modellbildung, Datenerhebung und Auswertung der verschiedenen Dimensionen zu vermindern, indem die Analyse in der gleichen Software mit technischen Funktionsmodellen und Strukturmodellen (z. B. in [2][29]) durchgeführt wird (Abbildung 6.1).

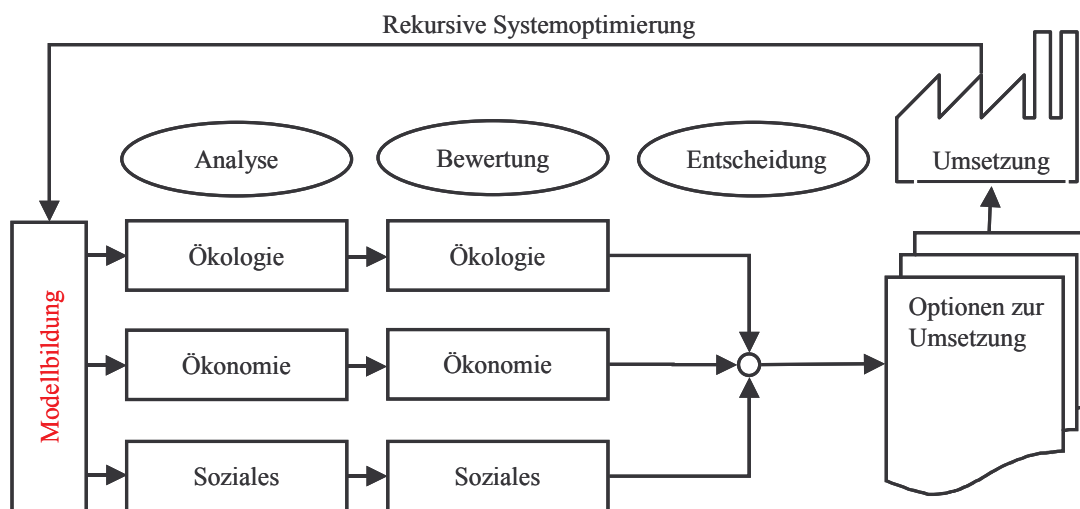


Abbildung 6.1: Parallele Analyse und Bewertung aller Dimensionen der Nachhaltigkeit ausgehend von einem technischen Modell, nach [158]

Eine Software zur Analyse der drei Dimensionen der Nachhaltigkeit existiert bereits mit der Software GaBi 4 [67], sie ist aber nicht an eine Software zur technischen Modellbildung angebunden. Dies liegt daran, dass die Ökobilanz (sie ist die methodische Grundlage für die Software GaBi 4) durch ihren breiten Fokus auf den gesamten Produktlebenszyklus einzelne Verfahren meist nicht detailliert auf der Ebene von Grundoperationen abbildet.

Für die Nutzung der verschiedenen Analysen in der Verfahrensentwicklung ist aber, wie in Kapitel 4.1 dargelegt wird, der Systemraum „Verfahren“ auch für die ökologische (und die soziale) Analyse ausreichend, sofern die relevanten Vor- und Nachketten in Form einer „black-box“ zur Entscheidungsunterstützung zur Verfügung stehen. Das bedeutet, dass die bisher getrennten Software-Werkzeuge für die technische Modellbildung und die Analyse der Nachhaltigkeit zum Zweck der Verfahrensentwicklung in Zukunft vereint werden könnten. Dazu ist die Software zur technischen Modellbildung um weitere Funktionen (z. B. zur Allokation) und vor allem um eine umfassende Datenbank von Ökopprofilen (und Sozialprofilen) der Vor- und Nachketten zu erweitern.

Die Integration von bisher getrennt vorliegenden Software-Werkzeugen ist allerdings immer mit Aufwand und auch mit Restriktionen verbunden. Die Abhängigkeiten der technischen Informationen untereinander ist oftmals, wie in Abbildung 6.2 dargestellt, schon so komplex, dass ihre Zusammenführung in eine gemeinsame Datenbank nur mit Schwierigkeiten möglich ist. Bayer [14] beschreibt die einzelnen existierenden Software-Werkzeuge der Verfahrensentwicklung mit ihren unterschiedlichen Hauptanwendungsgebieten als sehr ausgereift und favorisiert einen standardisierten Austausch von Informationen zwischen den Werkzeugen. Dazu steht neben vielen anderen Möglichkeiten der Standard zum Austausch von Produktdaten nach EN ISO 10.303 [93] mit seinen Anwendungsprotokollen zur Verfügung.

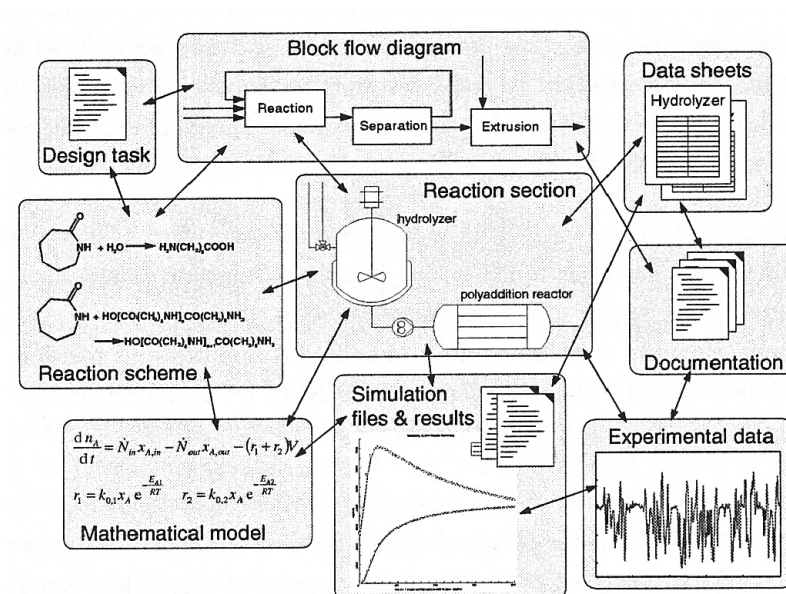


Abbildung 6.2: Technische Informationen, die für die Verfahrensentwicklung benötigt werden, und ihre Abhängigkeiten untereinander [14]

Literatur

- [1] **Aries, R., Newton, R.:** *Chemical engineering cost estimation*, McGraw-Hill, New York, 1955.
- [2] **Aspen Technology Inc. (Hrsg.):** *Aspen Plus*, Cambridge, 2004.
<<http://www.aspentech.com/brochures/aspentechplus.pdf>> vom 12.10.2004.
- [3] **Baehr, H., Stephan, K.:** *Wärme- und Stoffübertragung*, Springer, Berlin, 2004.
- [4] **Bailey, J. (Hrsg.):** *Ullmann's encyclopaedia of industrial chemistry*, Wiley-VCH, Weinheim, 2001.
- [5] **Baitz, M., Kupfer, T.:** *Ressourcenschonende Herstellung von Polymerwerkstoffen*, unveröffentlichter Forschungsbericht des IKP Universität Stuttgart im Auftrag des Umweltbundesamtes, FKZ 289 94 313/05, Stuttgart, 2000.
- [6] **Baitz, M., Wolf, M.-A., Kupfer, T., Eyerer P.:** *Experiences from projects on the development of new materials in industry from a Life-Cycle Engineering perspective - Leading to successful application, preventing ineffective measures*, In: International Conference on EcoBalance, Tsukuba, 2002.
- [7] **Baitz, M.:** *Die Bedeutung der funktionsbasierten Charakterisierung von Flächen-Inanspruchnahmen in industriellen Prozesskettenanalysen*, Diss., Universität Stuttgart, 2002.
- [8] **Barthel, L., Eyerer, P.:** *Social aspects as integrated part of sustainability indicators*, In: SETAC Europe 14th Annual Meeting, Prag, 2004.
- [9] **Bartmann, H., Busch, A.:** *Ökonomische (monetäre) Bewertung als Basis für umweltschutzpolitische Maßnahmen*, Beiträge zur Wirtschaftsforschung Nr. 55, Universität Mainz, 1998.
- [10] **Bathen, D., Hummelt, C., Meisel, J.:** *Emissionen an Flanschverbindungen*, Vulkan, Essen, 2000.
- [11] **Bauman, H.:** *Estimate design engineering costs*, In: *Hydrocarbon Process.*, Bd. 43, Nr. 10, Seite 141-144, 1964.
- [12] **Bauman, H.:** *Fundamentals of cost engineering in the chemical industry*, Reinhold, New York, 1964.
- [13] **Bayer AG (Hrsg.):** *Bayer Nachhaltigkeitsbericht 2004*, Leverkusen, 2004.
- [14] **Bayer, B.:** *Conceptual information modelling for computer aided support of chemical process design*, Diss., RWTH Aachen, 2003.
- [15] **Beilstein, F.:** *Handbuch der organischen Chemie*, Voss, Hamburg, seit 1883.
- [16] **Beschluss Nr. 1600/2002/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 22. Juli 2002 über das sechste Umweltaktionsprogramm der Europäischen Gemeinschaft.**

- [17] **Biwer, A.:** *Modelling, simulation and evaluation in the development of sustainable processes*, In: ACHEMA Conference, Frankfurt, 2003.
- [18] **Blaß, E.:** *Entwicklung verfahrenstechnischer Prozesse, Methoden - Zielsuche - Lösungsauswahl*, Salle & Sauerländer, Frankfurt, 1989.
- [19] **Bundes-Immissionsschutzgesetz (BImSchG):** *Gesetz zum Schutz vor schädlichen Umwelteinwirkungen durch Luftverunreinigungen, Geräusche, Erschütterungen und ähnliche Vorgänge vom 14.5.1990.*
- [20] **Centre of Environmental Science - Leiden University CML (Hrsg.):** *Characterisation and normalisation factors*; Leiden, 2001.
- [21] **Chem Systems (Hrsg.):** *Chemical process economics*, Chem Systems, London, 1998.
- [22] **Ciroth, A.:** *Fehlerrechnung in Ökobilanzen*, Diss., TU Berlin, 2001.
- [23] **D' Ans, J., Lax, E. (Hrsg.):** *Taschenbuch für Chemiker und Physiker*, Springer, Berlin, 1967.
- [24] **Daenzer, W. (Hrsg.):** *System Engineering*, Hanstein, Köln, 1978.
- [25] **De Beaufort-Langeveld, A. (Hrsg.):** *Code of Life Cycle Inventory practice*, SETAC Press, Brüssel, 2003.
- [26] **Dekorsy, T.:** *Ganzheitliche Bilanzierung als Instrument zur bauteilspezifischen Werkstoff- und Verfahrensauswahl*, Diss., Universität Stuttgart, 1993.
- [27] **Dewulf, W., Duflou, J.:** *Simplifying LCA using indicator approaches - a framework*, In: 10th CIRP seminar on Life Cycle Engineering, Kopenhagen, 2003.
- [28] **Dewulf, W.:** *A pro-active approach to ecodesign, framework and tools*, Diss., Universität Leuven, 2003.
- [29] **Dieterich, E.:** *Systematische Bilanzierung und modulare Simulation verfahrenstechnischer Apparate*, Diss., Universität Stuttgart, 1995.
- [30] **Duflou, J. et al.:** *Parametric Eco-Efficiency analysis: a DfE support tool*, In: 9th CIRP Seminar on Life Cycle Engineering, Erlangen, 2002.
- [31] **Eissen, M., Metzger, J.:** *Environmental performance metrics for daily use in synthetic chemistry*, In: Chem. Eur. J., Nr. 8, S. 3580-3585, 2002.
- [32] **Eissen, M.:** *Bewertung der Umweltverträglichkeit organisch-chemischer Synthesen*, BIS-Verlag der Universität Oldenburg, Oldenburg, 2001.
- [33] **Ekvall, T.:** *System expansion and allocation in Life Cycle Assessment*, Diss., Chalmers University, Göteborg, 1999.
- [34] **Empfehlung 2003/532/EG der Kommission vom 10.7.2003 über Leitlinien zur Durchführung der Verordnung (EG) Nr. 761/2001 des Europäischen Parlamentes und des Rates [...] in Bezug auf die Auswahl und Verwendung von Umweltleistungskennzahlen.**

- [35] **Endres, A., Holm-Müller, K.:** *Die Bewertung von Umweltschäden*, Kohlhammer, Stuttgart, 1998.
- [36] **Enquete-Kommission “Schutz des Menschen und der Umwelt“ des Deutschen Bundestages (Hrsg.):** *Verantwortung für die Zukunft - Wege zum nachhaltigen Umgang mit Stoff- und Materialströmen*, Economica, Bonn 1993.
- [37] **Enquete-Kommission „Schutz des Menschen und der Umwelt“ des deutschen Bundestages (Hrsg.):** *Konzept Nachhaltigkeit - vom Leitbild zur Umsetzung*, Deutscher Bundestag, Referat Öffentlichkeitsarbeit, Bonn, 1998.
- [38] **European Chemical Industry Council CEFIC (Hrsg.):** *CEFIC review 2002-2003 - The European chemical industry, its contribution to Europe and its citizens*, Brüssel, 2003.
- [39] **European Chemical Industry Council CEFIC (Hrsg.):** *Responsible Care status report Europe*, Brüssel, 2002.
- [40] **European Environment Agency EEA (Hrsg.):** *Annual European Community greenhouse gas inventory 1990–2001 and inventory report 2003 - Submission to the UNFCCC Secretariat*, Technical Report Nr. 95, Kopenhagen, 2003.
- [41] **Eyerer, P. (Hrsg.):** *Ganzheitliche Bilanzierung - Werkzeug zum Planen und Wirtschaften in Kreisläufen*, Springer, Berlin, 1996.
- [42] **Eyerer, P. et al:** *Eco-Efficiency in business, challenges and needs*, In: International Eco-Efficiency Conference “Eco-Efficiency for Sustainability”, Leiden, 2004.
- [43] **Faubel, J.:** *Modulare Betriebskosten-Vorausberechnung bei der Planung von Chemieanlagen*, VDI Fortschrittsberichte Reihe 16 Nr. 30, VDI, Düsseldorf, 1985.
- [44] **Finkbeiner, M., Wiedemann, M., Saur, K.:** *A comprehensive approach towards product and organisation related environmental management tools*, In: Int. J. LCA, Bd. 3, Nr. 3, S. 169-178, Ecomed, Landsberg, 1998.
- [45] **Fleischer, G. (Hrsg.):** *Eco-Design, Effiziente Entwicklung nachhaltiger Produkte mit EUROMAT*, Springer, Berlin, 2000.
- [46] **Franzeck, J.:** *Methodik der Lebenszykluskostenanalyse und -planung (Life Cycle Costing) für die Entwicklung technischer Produktsysteme unter Berücksichtigung umweltlicher Effekte*, Diss., Universität Stuttgart, 1997.
- [47] **Fussler, C.:** *Die Öko-Innovation, Wie Unternehmen profitabel und umweltfreundlich sein können*, Hirzel, Stuttgart, 1999.
- [48] **Gassner, E., Winkelbrandt, A.:** *UVP, Umweltverträglichkeitsprüfung in der Praxis*, Rehm, München, 1997.
- [49] **Gediga, J. et al.:** *Life Cycle Assessment as a tool in the design process of parts, products and systems*, In: SAE Conference, Detroit, 1998.

- [50] **Geisler, G. et al.:** *Procedure for the estimation of LCIs for the production of fine and specialty chemicals*, 13th SETAC Europe Annual Meeting, Hamburg, 2003.
- [51] **Geisler, G., Hofstetter, T., Hungerbühler, K.:** *Production of fine and specialty chemicals – procedure for the estimation of LCIs*, In: Int. J. LCA, Bd. 9, Nr. 2, S. 101-113, Ecomed, Landsberg, 2003.
- [52] **Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie DECHEMA (Hrsg.):** *DETERM Thermophysical property database*, Frankfurt/M., 2002.
- [53] **Global Reporting Initiative (Hrsg.):** *Sustainability reporting guidelines 2002*, Boston, 2002.
- [54] **Gmehling, J., Brehm, A.:** *Lehrbuch der technischen Chemie* (Hrsg. Baerns, M.), Bd. 2 Grundoperationen, Thieme, Stuttgart, 1996.
- [55] **Gmelin-Institut für Anorganische Chemie der Max-Planck-Gesellschaft (Hrsg.):** *Gmelin handbook of inorganic and organometallic chemistry*, Springer, Berlin, 1998.
- [56] **Goedkoop, M., Spriensma, R.:** *The Eco-Indicator 99, Methodology report and annex*, Pre Consultants, Amersfoort, 1999. <www.pre.nl> vom 12.10.2004.
- [57] **Grayson, M. (Hrsg.):** *Kirk-Othmer's encyclopedia of chemical technology*, Wiley, New York, 1998.
- [58] **Guinée, J. et al.:** *Life Cycle Assessment - An operational guide to the ISO standards*, Ministry of Housing, Spatial Planning and the Environment (VROM) and Centre of Environmental Science Leiden University (CML), Leiden, 2001.
- [59] **Haller-Wedel, E.:** *Die Einflussgrößenrechnung in Theorie und Praxis*, Hanser, München, 1973.
- [60] **Hansmann, K.-W.:** *Prognose und Prognoseverfahren*, In: Betriebswirtschaftliche Forschung und Praxis, Nr. 3, S. 269-286, 1995.
- [61] **Happel, J., Jordan, D.:** *Chemical process economics*, Dekker, New York, 1975.
- [62] **Heijungs R. et al.:** *Environmental life cycle assessment of products, guide and backgrounds*, Centre of Environmental Science Leiden University (CML), Leiden, 1992.
- [63] **Herrmann, K., Siegle, H.-J.:** *Beherrschung flüssiger und gasförmiger Emissionen - Aktivitäten und Sichtweisen der chemischen und petrochemischen Industrie*, in: 2. Europäische Konferenz zu flüssigen und gasförmigen Emissionen, Düsseldorf, 1998, S. 21-30, VDI-Berichte 1440, VDI, Düsseldorf, 1998.
- [64] **Hirsch, J. et al.:** *Estimating plant investment costs*, In: Chem. Eng. Progr., Bd. 56, Nr. 12, S. 37-43, 1960.
- [65] **Hirschberg, H.:** *Kosten- und Wirtschaftlichkeitsanalysen*, Skriptum Universität Stuttgart, 1997.

- [66] **Hocking, M.:** *Handbook of chemical technology and pollution control*, Academic Press, San Diego, 1998.
- [67] **IKP Universität Stuttgart, PE Europe GmbH (Hrsg.):** *GaBi 4, Software und Datenbank zur Ganzheitlichen Bilanzierung*, Stuttgart, 1992-2002.
- [68] **Institut für Umweltinformatik GmbH, Institut für Energie- und Umweltforschung GmbH (Hrsg.):** *UMBERTO 4, Software für das Umweltmanagement*, Hamburg, 1995-2001.
- [69] **Jung, J.:** *Vorausberechnung der Betriebskosten von Chemieanlagen in frühen Projektphasen*, In: *Chemie-Technik*, Bd. 12, Nr. 9, S. 39ff., 1983.
- [70] **Kanschik, K., Schmidt-Traub, H.:** *Bestimmung der Emissionen von Flanschverbindungen in einer Chemieanlage*, In: 2. Europäische Konferenz zu flüssigen und gasförmigen Emissionen, Düsseldorf, 1998, S. 183-190, VDI-Berichte 1440, VDI, Düsseldorf, 1998.
- [71] **Kölbel, H., Schulze, J.:** *Projektierung und Kalkulation in der chemischen Industrie*, Springer, Berlin, 1960.
- [72] **Kommission der Europäischen Gemeinschaften, JRC Sevilla (Hrsg.):** *Integrated Pollution Prevention and Control (IPPC) reference document on Best Available Techniques in the large volume organic chemical industry*, Sevilla, 2002.
- [73] **Kreislaufwirtschafts- und Abfallgesetz (KrW-/AbfG):** *Gesetz zur Förderung der Kreislaufwirtschaft und Sicherung der umweltverträglichen Beseitigung von Abfällen vom 27.9.1994 (KrW-/AbfG)*.
- [74] **Kupfer, T., Eyerer, P.:** *Assessment of the Eco-efficiency of a Chemical Process Plant in the Draft Design Stage*, In: *International Eco-Efficiency Conference Eco-Efficiency for Sustainability*, Leiden, 2004.
- [75] **Kupfer, T., Fischer, M., Eyerer, P.:** *Assessment of environmental impacts in an early design stage of a chemical process plant*, In: 4th European Congress of Chemical Engineering (ECCE 4), Granada, 2003.
- [76] **Kupfer, T., Wolf, M.-A., Barthel L.-P.:** *BIOFOAM Deliverable D 31 - Report on integrated Life Cycle Management Analysis (LCMA) for up to two bio-source based foam products to be developed and of up to two comparable petroleum source based foam products*, IKP, Universität Stuttgart, unveröffentlichter Forschungsbericht im Auftrag der EU, QLK5-1999-01298, 2004.
- [77] **Kupfer, T., Wolf, M.-A., Warburg, N.:** *BIOFOAM Deliverable D 28 - Report on environmental Life Cycle Inventory (LCI) data according to ISO 14041 extended by land use effects for up to two bio-source based foam products and of up to two comparable petroleum source based foam products*, IKP, Universität Stuttgart, unveröffentlichter Forschungsbericht im Auftrag der EU, QLK5-1999-01298, 2004.

- [78] **Kupfer, T., Wolf, M.-A.:** *BIOFOAM Deliverable D 27 - Decision support recommendations on integrated sustainability of up to six different renewable bio-sources, four bio-source based polymers and two bio-source based foam products*, IKP, Universität Stuttgart, unveröffentlichter Forschungsbericht im Auftrag der EU, QLK5-1999-01298, 2004.
- [79] **Kupfer, T.:** *BIOFOAM Deliverable D 29 - Report on Life Cycle Costing (LCC) for up to two bio-source based foam products to be developed and of up to two comparable petroleum source based foam products*, IKP, Universität Stuttgart, unveröffentlichter Forschungsbericht im Auftrag der EU, QLK5-1999-01298, 2004.
- [80] **Kupfer, T.; Wolf, M.-A.:** *Criteria for the screening of renewables as raw materials for the chemical industry*, In: 5th International Conference on Ecomaterials, Hawaii, 2001.
- [81] **Lang, H.:** *Cost Relationships in preliminary cost estimation*, In: Chem. Eng., Bd. 54, Nr. 10, S. 117-121, 1947.
- [82] **Lide, D. (Hrsg.):** *CRC Handbook of chemistry and physics on CD-ROM*, Chapman & Hall, Boca Raton, 2002.
- [83] **Lips, P.:** *Aliphatic segmented poly(ester amide)s based on symmetrical bisamide-diols*, Diss., Universität Twente, 2005.
- [84] **Lips, P.:** *BIOFOAM - Literature report on Poly(ester-amide)s*, Universität Twente, unveröffentlichter Forschungsbericht im Auftrag der EU, QLK5-1999-01298, 2001.
- [85] **Madelung, O. (Hrsg.):** *Landolt-Börnstein, Numerical data and functional relationships in science and technology*, Springer, Berlin, seit 1961.
- [86] **Meinders, H.:** *Point of no return, Philips Eco-Design guidelines*, Philips Electronics, Eindhoven, 1997.
- [87] **Morris, A. (Hrsg.):** *Chemical Engineering*, Mc Graw-Hill, New York, seit 1902.
- [88] **Müller-Wenk, R., Braunschweig, A.:** *Ökobilanzen für Unternehmen, eine Wegeleitung für die Praxis*, Haupt, Bern, 1993.
- [89] **N. N.:** *Bio-source Based Recyclable Poly(ester-co-amide)s and Poly(ester-co-urethane)s for Industrial Foam Applications (BIOFOAM)*, EU 5th Framework Programme project, Contract No. QLK5-1999-01298, 2000-2004.
- [90] **Norm DIN 276:** *Kosten im Hochbau*, Berlin, 1993.
- [91] **Norm DIN 28.004:** *Fließbilder verfahrenstechnischer Anlagen; Begriffe, Fließbildarten, Informationsinhalt*, Berlin, 1988. Abgelöst durch EN ISO 10.628.
- [92] **Norm EN ISO 10.628:** *Fließschemata für verfahrenstechnische Anlagen - Allgemeine Regeln*, Brüssel, 1997.
- [93] **Norm EN ISO 13.303:** *Industrielle Automatisierungssysteme und Integration - Produktdatendarstellung und -austausch*, Brüssel, 1994.

- [94] **Norm EN ISO 14.001:** *Umweltmanagementsysteme - Spezifikationen mit Anleitung zur Anwendung*, Brüssel, 1996.
- [95] **Norm EN ISO 14.040:** *Umweltmanagement - Ökobilanz - Prinzipien und allgemeine Anforderungen*, Brüssel, 1997.
- [96] **Norm EN ISO 14.041:** *Umweltmanagement - Ökobilanz - Festlegung des Ziels und des Untersuchungsrahmens sowie Sachbilanz*, Brüssel, 1998.
- [97] **Norm EN ISO 14.042:** *Umweltmanagement - Ökobilanz - Wirkungsabschätzung*, Brüssel, 1999.
- [98] **Norm EN ISO 14.043:** *Umweltmanagement - Ökobilanz - Auswertung*, Brüssel, 1999.
- [99] **Norm ISO/TR 14.049:** *Environmental Management - Life Cycle Assessment - Examples of application of ISO 14.041 to goal and scope definition and Inventory Analysis*, Brüssel, 2000.
- [100] **Onken, U., Behr, A.:** *Chemische Prozesskunde*, In: Lehrbuch der technischen Chemie (Hrsg. Baerns, M.), Thieme, Stuttgart, 1996.
- [101] **Patzak, G.:** *Systemtechnik - Planung komplexer innovativer Systeme: Grundlagen, Methoden, Techniken*, Springer, Heidelberg, 1982.
- [102] **Perry, R. (Hrsg.):** *Chemical engineers handbook*, McGraw-Hill, New York, 1997.
- [103] **Peters, M. et al. (Hrsg.):** *Plant design and economics for chemical engineers*, McGraw-Hill, Boston, 2003.
- [104] **Pflieger, J., Fischer, M., Kupfer, T., Eyerer, P.:** *The contribution of Life Cycle Assessment to global sustainability reporting of organizations*, In: 3rd InLCA/LCM Conference, Seattle, 2003, Auch In: Management of Env. Quality Int. J., Bd. 16, Nr. 2, 2005.
- [105] **Pohle, H.:** *Chemische Industrie: Umweltschutz, Arbeitsschutz, Anlagensicherheit; rechtliche und technische Normen; Umsetzung in die Praxis*, VCH, Weinheim, 1991.
- [106] **Pré Consultants bv (Hrsg.):** *SimaPro 6 Life Cycle Assessment software*, Amersfoort, 1990-2004.
- [107] **PricewaterhouseCoopers / Ecobilan (Hrsg.):** *TEAM, Tool for Environmental Analysis and Management*, Paris, 1992-2000.
- [108] **Prinzing, P., Rödl, R., Aichert, D.:** *Investitionskosten-Schätzung für Chemieanlagen*, In: Chem.-Ing.-Tech., Bd. 57, Nr. 1, S. 8-14, 1985.
- [109] **Quarg, M. et al.:** *Die Nomenklatur der Grundarbeitsgänge der chemischen Verfahrenstechnik und ihre Bedeutung für den Projektanten chemischer Anlagen*, In: Chem. Techn., Bd. 12, Nr. 10, S. 566 ff., 1960.
- [110] **Rebitzer, G., Hunkeler, D.:** *Life Cycle Costing in LCM: Ambitions, opportunities and limitations, Discussing a framework*, In: Int. J. LCA, Bd. 8, Nr. 5, S. 253-265, Ecomed, Landsberg, 2003.

- [111] **Reid, R. et al.:** *The properties of gases and liquids*, McGraw-Hill, New York, 1988.
- [112] **Remmerswaal, H. et al.:** *IDEMAT Software*, TU Delft, 1998.
- [113] **Richtlinie 85/337/EWG des Rates vom 27.6.1985 über die Umweltverträglichkeitsprüfung bei bestimmten öffentlichen und privaten Projekten (UVP-Richtlinie).**
- [114] **Richtlinie 96/61/EG des Rates vom 24.9.1996 über die integrierte Vermeidung und Verminderung der Umweltverschmutzung (IVU-Richtlinie).**
- [115] **Richtlinie 97/11/EG des Rates vom 3.3.1997 zur Änderung der Richtlinie 85/337/EWG über die Umweltverträglichkeitsprüfung bei bestimmten öffentlichen und privaten Projekten.**
- [116] **Rombouts, J.:** *LEADS 2, a knowledge-based system for ranking DfE options*, In: 5th IEEE Symposium on Electronics and the Environment, San Francisco, 1998.
- [117] **Saling, P. et al.:** *Eco-efficiency analysis by BASF, the method*, In: Int. J. LCA 7 LCA, Bd. 7, Nr. 4, S. 203-218, Ecomed, Landsberg, 2002.
- [118] **Saur, K. et al.:** *Life cycle considerations as decision making support in the product R&D-phase*, In: 3rd International Conference on EcoBalance, Tsukuba, 1998.
- [119] **Saur, K.:** *Beitrag zur Bewertung der Ganzheitlichen Bilanzierung als Grundlage der Bauteilentwicklung*, Diss., Universität Stuttgart, 1998.
- [120] **Schmidt, I.:** *Managing Socio-Efficiency of products and processes - Further development of the BASF Eco-Efficiency analysis by the social sustainability dimension*, In: OIKOS PhD summer academy 2003, St. Gallen, 2003.
- [121] **Schmidt, M.:** *Stoffstromanalysen und Ökobilanzen im Dienste des Umweltschutzes*, In: Schmidt, M., Schorb, A. (Hrsg.): *Stoffstromanalysen in Ökobilanzen und Öko-Audits*, S. 3-13, Springer, Berlin, 1995.
- [122] **Schmidt-Bleek, F., Tischner, U.:** *Nutzen gestalten, Natur schonen, Design und Ökologie*, Schriftenreihe des Wirtschaftsförderungsinstituts, Wien, 1995.
- [123] **Schultz, V.:** *Projektkostenschätzung - Kostenermittlung in frühen Phasen von technischen Auftragsprojekten*, Gabler, Wiesbaden, 1995.
- [124] **Schulze, J., Hassan, A.:** *Methoden der Material- und Energiebilanzierung bei der Projektierung von Chemieanlagen*, Verlag Chemie, Weinheim, 1981.
- [125] **Schweyer, H.:** *Process engineering economics*, McGraw-Hill, New York, 1955.
- [126] **Seider, W., Seader, J., Lewin, D.:** *Process design principles: Synthesis, analysis and evaluation*, John Wiley, New York, 1998.
- [127] **Seuring, S., Goldbach, M. (Hrsg.):** *Cost management in supply chains*, Physica, Heidelberg, 2002.
- [128] **Society of Environmental Toxicology and Chemistry SETAC (Hrsg.):** *Guidelines for Life Cycle Assessment: A code of practice*, Brüssel, 1993.

- [129] **Springborn, G. (Hrsg.):** *Chemische Industrie, Zeitschrift für die deutsche Chemie-wirtschaft*, Handelsblatt, Düsseldorf, seit 1877.
- [130] **Stapert, H. et al.:** *Synthesis of aliphatic Poly(ester-co-amide)s containing uniform Bisamide-biester blocks*, In: *Macromolecular Symposia*, Bd. 152, S. 127-137, 2000.
- [131] **Stapert, H.:** *Environmentally degradable Polyester, Poly(ester-amide)s and Poly(ester-urethane)s*, Diss., Universität Twente, 1998.
- [132] **Technische Anleitung Luft (TA Luft):** *Erste allgemeine Verwaltungsvorschrift zum Bundes-Immissionsschutzgesetz (Technische Anleitung zur Reinhaltung der Luft - TA Luft) vom 24.7.2002.*
- [133] **The United Nations Conference on Environment and Development UNCED (Hrsg.):** *The Rio declaration on environment and development*, Rio de Janeiro, 1992.
- [134] **Tückmantel, H.-J.:** *Die Optimierung statischer Dichtungen*, Kempchen GmbH, Oberhausen, 1990.
- [135] **Umweltbundesamt (Hrsg.):** *Hintergrundpapier „Handreichung Bewertung in Ökobilanzen“*, Berlin, 2000.
- [136] **UNEP SETAC Life Cycle Analysis Initiative (Hrsg.):** *UNEP SETAC Life Cycle Analysis Initiative user needs survey, Overview of preliminary user needs survey results*, Wien, 2002. <<http://www.uneptie.org/pc/sustain/lcinitiative/home.htm>> vom 12.10.2004.
- [137] **United Nations Economic Commission for Europe UNECE (Hrsg.):** *Protocol to the 1979 convention on long-Range transboundary air pollution to abate Acidification, Eutrophication and ground-level Ozone*, Göteborg, 1999.
- [138] **United Nations Environment Programme UNEP (Hrsg.):** *The Montreal Protocol on substances that deplete the Ozone layer*, UNEP, Nairobi, 2000. <<http://www.unep.org/ozone>> vom 12.10.2004.
- [139] **United Nations Framework Convention on Climate Change UNFCCC (Hrsg.):** *Kyoto Protocol to the United Nations framework convention on climate change*, Kyoto, 1997. <<http://unfccc.int/>> vom 12.10.2004.
- [140] **US Census Bureau:** *1997 Economic Census*, <<http://www.census.gov/epcd/www/econ97.html>> vom 12.10.2004.
- [141] **US Census Bureau:** *US exports history - historical summary 1996-1999*, Washington, 2001.
- [142] **Van Oven, J., Stölting, T., Schwind, H.:** *Vorausberechnung der Betriebskosten verfahrenstechnischer Anlagen in unterschiedlichen Projektierungsphasen auf Grundlage technischer Daten von Anlagenkomponenten*, In: *Chem.-Ing.-Tech.*, Bd. 58, Nr. 5, S. 440-441, 1986.

- [143] **Vauck, W., Müller, H.:** *Grundoperationen chemischer Verfahrenstechnik*, Verlag Grundstoffindustrie, Stuttgart, 2000.
- [144] **Verein Deutscher Ingenieure (Hrsg.):** *VDI 4090, Systemtechnische Methodik zur Planung und Steuerung umweltrelevanter Prozesse in der betrieblichen Praxis, Blatt 1 - Grundlagen und Allgemeines*, Entwurf, Beuth, Berlin, 2003.
- [145] **Verein Deutscher Ingenieure (Hrsg.):** *VDI 4600, Kumulierter Energieaufwand - Begriffe, Definitionen, Berechnungsmethoden*, Beuth, Berlin, 1997.
- [146] **Verein Deutscher Ingenieure (Hrsg.):** *VDI-Wärmeatlas*, Springer, Berlin, 2002.
- [147] **Verordnung (EG) Nr. 761/2001 des Europäischen Parlamentes und des Rates vom 19.3.2001 über die freiwillige Beteiligung von Organisationen an einem Gemeinschaftssystem für das Umweltmanagement und die Umweltbetriebsprüfung (EMAS 2).**
- [148] **Verpackungsverordnung (VerpackV):** *Verordnung über die Vermeidung und Verwertung von Verpackungsabfällen vom 21.8.1998 (VerpackV).*
- [149] **Vilbrandt, F., Dryden, E.:** *Chemical engineering plant design*, Mc Graw-Hill, New York, 1958.
- [150] **Viola, J.:** *Estimate capital costs via a new shortcut method*, In: Chem. Eng., Bd. 80, Nr. 7, S. 80-86, 1981.
- [151] **Wang, S.-H. (Hrsg.):** *PEP yearbook international*, SRI Consulting, Menlo Park, 1999.
- [152] **Weber, J.:** *Einführung in das Controlling*, Schäffer-Pöschel, Stuttgart, 1995.
- [153] **Weber, M.:** *Nutzwertanalyse*, In: Frese, E. (Hrsg.): *Handwörterbuch der Organisation*, S. 1435-1448, Pöschel, Stuttgart, 1992.
- [154] **White, A., Savage, D., Shapiro, K.:** *Life Cycle Costing - Concepts and application*, In: Curran, M. (Hrsg.): *Environmental Life Cycle Assessment*, McGraw-Hill, New York, 1996.
- [155] **Wild, J.:** *Grundlagen der Unternehmensplanung*, Westdeutscher, Opladen, 1982.
- [156] **Wolf, M.-A., Eyerer, P.:** *Life Cycle Accident Assessment (LCAA) - Emissions and casualties from non-normal operation and use*, In: 6th International Conference on EcoBalance, Tsukuba, 2004.
- [157] **Wolf, M.-A., Eyerer, P.:** *Sensitivity analysis, scenario calculation, and Monte Carlo-simulation of LCI*, In: SETAC Europe 14th Annual Meeting, Prag, 2004.
- [158] **Wolf, M.-A., Kupfer, T., Baitz, M.:** *Life Cycle Sustainability – R&D of biosource based polymers*, In: 5th International Conference on Ecomaterials, Hawaii, 2001.
- [159] **Wolf, M.-A.:** *Die Lebenszyklus-Unfallanalyse, Methode zur Einbeziehung von unfallbedingten Interventionen und direkten Personenschäden in die Ganzheitliche Bilanzierung*, Diss., Universität Stuttgart, zur Veröffentlichung eingereicht.

- [160] **Wolf, M.-A.; Baitz, M.; Kupfer, T.:** *Process-level Life Cycle Working Time (LCWT) inventories as basis for the social extension of LCA/LCE*, In: 12th SETAC Europe Annual Meeting, Wien, 2002.
- [161] **World Commission on Environment and Development WCED (Hrsg.):** *Our common future („Brundtland-Report“)*, Oxford University Press, Oxford, 1987.
- [162] **Zangemeister, C.:** *Nutzwertanalyse in der Systemtechnik, Eine Methode zur multidimensionalen Bewertung und Auswahl von Projektalternativen*, Wittmann, München 1970.

Anhang

Anhang A: Dokumentation der Datengrundlage des Projektes BIOFOAM

BIOFOAM ist ein Forschungsprojekt, daher sind innerhalb der Projektgruppe nur Daten für die Produktion der Materialien im Labormaßstab oder Pilotmaßstab erhältlich. Für eine Vergleichbarkeit mit herkömmlichen Materialien werden industrielle Daten benötigt. Die BIOFOAM-Projektgruppe hat deshalb repräsentative Verfahren identifiziert, für die innerhalb der Projektgruppe oder in der Literatur Daten für den industriellen Maßstab vorhanden sind. Aus diesen Analogien werden die Daten für den industriellen Maßstab der Produktionsrouten in BIOFOAM errechnet. Diese Methode ermöglicht die beste Realitätsnähe, die in der Forschungs- und Entwicklungsphase einer Produktionsroute möglich ist. Die BIOFOAM-Projektgruppe hat sehr eng zusammengearbeitet, um Kenntnisse über die eingesetzten Technologien zu erlangen und damit ein „up-scaling“ der Labormaßstabsdaten und eine Abschätzung der fehlenden Daten auf Grundlage der eingesetzten Technologien zu erlauben. Die eingesetzten Daten sind konsistent und repräsentieren den Stand der Technik in der EU. In Fällen, in denen mehrere Technologien existieren, wurde die umweltfreundlichste gewählt. Die Basisdaten für Elektrizität, Infrastruktur etc. beruhen auf deutschen Randbedingungen.

Benutzte Indikatoren zur Beschreibung der Datenqualität:

Datenherkunft:

- + +: Gemessen
- +: Errechnet
- O: Literatur
- : Geschätzt

Vollständigkeit:

- + +: Alle Stoff- und Energieströme erfasst
- +: Alle relevanten Stoff- und Energieströme erfasst
- O: Einzelne relevante Stoff- und Energieströme erfasst
- : Manche relevanten Stoff- und Energieströme erfasst

Örtliche und zeitliche Repräsentativität der abgebildeten Technologie:

- +: Vollständig repräsentativ
- O: Teilweise repräsentativ
- : Nicht repräsentativ

Tabelle A.1: Beschreibung der Datenqualität für die ökologische Analyse

	Datenherkunft	Vollständigkeit	Repräsentativität	Quellen	Bemerkungen
Basisdaten für Energieträger, Rohstoffe, Dünger, Pestizide, etc.	++/+/O	+/O	+	GaBi 4 Datenbank 8)	Datenherkunft +/O für Pestizide und manche Dünger
Erneuerbare Rohstoffe	+/O	+	+	GaBi 4 Datenbank 8)	
Biotechnologische Umwandlungsschritte	+/O	O	+	Patentschriften 14), 15) Technische Informationen aus der BIOFOAM-Gruppe: Dow, A & F; GaBi 4 Datenbank 1), 6), 8), 11), 23)	nur technische Labormaßstabsdaten im Projekt erhältlich, ähnliche Prozesse
Chemische Umwandlungsschritte	+/O	O	+	Technische Informationen aus der BIOFOAM-Gruppe: Dow; GaBi 4 Datenbank 2), 4), 7), 8), 9)	nur technische Labormaßstabsdaten im Projekt erhältlich, ähnliche Prozesse. Datenherkunft ++ für ähnliche Prozesse
Polymerisation	+/O	O	+	Technische Informationen aus der BIOFOAM-Gruppe: Dow, Twente, Vita, GaBi 4 Datenbank 3), 8), 20), Patentschriften 16); 17), 18)	nur technische Labormaßstabsdaten im Projekt erhältlich, ähnliche Prozesse. Datenherkunft ++ für ähnliche Prozesse
Herkömmliche rohölbasierte Monomere und Polymere	++/O	+	+	GaBi 4 Datenbank 2), 4), 7), 8); Technische Informationen aus der BIOFOAM-Gruppe: Dow; 5), 9), 21)	
Herkömmliche rohölbasierte Produkte	++/O	+	+	GaBi 4 Datenbank 8), Technische Informationen aus der BIOFOAM-Gruppe: Dow, Vita; 10), 12)	

Tabelle A.2: Beschreibung der Datenqualität für die ökonomische Analyse

	Datenherkunft	Vollständigkeit	Repräsentativität	Quellen	Bemerkungen
Basisdaten für Energieträger, Rohstoffe, Dünger, Pestizide, etc.	++	++	+	GaBi 4 Datenbank 8), 19)	
Erneuerbare Rohstoffe	++	++	+	GaBi 4 Datenbank 8), 22)	
Biotechnologische Umwandlungsschritte	+	+	+	Information aus der BIOFOAM-Gruppe: Dow, A & F; GaBi 4 Datenbank 8)	nur technische Labormaßstabsdaten im Projekt erhältlich, ähnliche Prozesse
Chemische Umwandlungsschritte	+	+	+	Information aus der BIOFOAM-Gruppe: Dow; GaBi 4 Datenbank 4), 8)	nur technische Labormaßstabsdaten im Projekt erhältlich, ähnliche Prozesse
Polymerisation	+	+	+	Information aus der BIOFOAM-Gruppe: Dow, Vita, GaBi 4 Datenbank 8), 13)	nur technische Labormaßstabsdaten im Projekt erhältlich, ähnliche Prozesse
Herkömmliche rohölbasierte Monomere und Polymere	++	++	+	GaBi 4 Datenbank 4), 8), 19), Information aus der BIOFOAM-Gruppe: Dow	
Herkömmliche rohölbasierte Produkte	+	+	+	GaBi 4 Datenbank 8), Information aus der BIOFOAM-Gruppe: Dow, Vita	

Datenquellen

- 1) **Akuja, S.:** *Handbook of bioseparations*, Academic Press, San Diego, 2000.
- 2) **Bailey, J. (Hrsg.):** *Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry*, Wiley-VCH, Weinheim, 2001.
- 3) **Baitz, M., Kupfer, T.:** *Ressourcenschonende Herstellung von Polymerwerkstoffen*, unveröffentlichter Forschungsbericht des IKP Universität Stuttgart im Auftrag des Umweltbundesamtes, FKZ 289 94 313/05, Stuttgart, 2000.
- 4) **Chem Systems (Hrsg.):** *Chemical process economics*, Chem Systems, London, 1998.
- 5) **Domininghaus, H. (Hrsg.):** *Die Kunststoffe und ihre Eigenschaften*, Springer, Berlin, 1998.
- 6) **Falbe, J. (Hrsg.):** *Römpp-Lexikon Chemie*, Thieme, Stuttgart, 1999.
- 7) **Grayson, M. (Hrsg.):** *Kirk-Othmer's encyclopedia of chemical technology*, Wiley, New York, 1998.

- 8) **IKP Universität Stuttgart, PE Europe GmbH (Hrsg.):** *GaBi 4, Software und Datenbank zur Ganzheitlichen Bilanzierung*, Stuttgart, 1992-2002.
- 9) **Kommission der Europäischen Gemeinschaften, JRC Sevilla (Hrsg.):** *Integrated Pollution Prevention and Control (IPPC) reference document on best available techniques in the large volume organic chemical industry*, Sevilla, 2002.
- 10) **Leppkes, R.:** *Polyurethane*, Moderne Industrie, Landsberg, 1999.
- 11) **Niu, W. et al.:** *Benzene free synthesis of adipic acid*, In: *Biotechnol. Prog.*, Bd. 18, S. 201-211, 2002.
- 12) **Oertel, G. (Hrsg.):** *Polyurethane*, Hanser, München, 1993.
- 13) **Patel, M. et al.:** *Techno-economic feasibility of large-scale production of bio-based polymers in Europe*, Universität Utrecht, Utrecht, 2004.
- 14) **Schutzrecht** (downstream processing für Fermentationen): US 5,034,105; US 5,143,833; US 5,143,834; US 5,168,055; US 5,426,220; US 5,773,653; US 5,780,276.
- 15) **Schutzrecht** (Fermentation zu Muconsäure / Adipinsäure): US 5,616,496; US 4,400,468.
- 16) **Schutzrecht** (Polymerisation von aliphatischen Polyestern / Polyesteramiden): WO 98/12242, US 5,498,453, EP 703260.
- 17) **Stapert, H. et al.:** *Synthesis of aliphatic Poly(ester-co-amide)s containing uniform Bisamide-biester blocks*, In: *Macromolecular Symposia*, Bd. 152, S. 127-137, 2000.
- 18) **Stapert, H.:** *Environmentally degradable Polyester, Poly(ester-amide)s and Poly(ester-urethane)s*, Diss., Universität Twente, 1998.
- 19) **US Census Bureau (Hrsg.):** *US Exports History, Historical Summary 1996-1999*, US Census Bureau, Washington, 2001.
- 20) **US Environmental Protection Agency (Hrsg.):** *Best management practices for pollution prevention in the slabstock and molded flexible polyurethane foam industry*, US Environmental Protection Agency (EPA), Cincinnati, 1996.
- 21) **Weissermel, K., Arpe, H.-J.:** *Industrielle organische Chemie*, VCH, Weinheim, 1994.
- 22) **World Bank's Development Prospects Group (Hrsg.):** *Global commodity markets quarterly*, World Bank, 2000.
- 23) **Zeikus, J. et al.:** *Biotechnology of succinic acid production and markets for derived industrial products*, *Appl. Microbiol. Biotechnol.*, Bd. 51, S. 545–552, 1999.

Anhang B: Ökonomische Prognose im Projekt BIOFOAM

Ermittlung des Produktwertes

Der Preis eines Produktes beinhaltet Kostenkomponenten (Materialkosten, Personalkosten, Gemeinkosten etc.) sowie den Gewinn des Produkts. Der Gewinn wird nicht als Kostenkomponente angesehen, da es sich dabei um keinen Betrag handelt, der vom Unternehmen bezahlt werden muss. Offensichtlich stimmt der Preis eines Produktes also nicht mit den Kosten überein. Ein Preis entsteht vielmehr durch das Marktverhalten, er richtet sich nach Angebot und Nachfrage.

In Forschungsprojekten wie BIOFOAM, bei denen der Verkauf eines Produkts noch in weiter Ferne liegt, können die Mechanismen der Preisgestaltung noch nicht wirken. Es gibt mehrere Möglichkeiten, dieses Problem anzugehen:

- Die Ermittlung eines Preises durch Abschätzung von Angebot und Nachfrage.
- Die Ermittlung eines Preises durch eine Befragung der Marktteilnehmer über ihre Zahlungsbereitschaft („willingness to pay“).
- Die Berechnung des *Produktwertes* als Summe der Kosten und des möglichen Gewinns. Der mögliche Gewinn kann unter der Annahme berechnet werden, dass eine bestimmte Kapitalrendite als Anreiz ausreicht, um in die Produktion zu investieren.

Die ersten beiden Möglichkeiten sind für Forschungsprojekte wie BIOFAOM nicht geeignet. Da noch keine marktfähigen Produkte existieren, ist die Abschätzung des Marktverhaltens mit einer Vielzahl von Unsicherheiten verbunden, die keine Entscheidungsunterstützung auf einer soliden Grundlage erlaubt. Die Zahlungsbereitschaft ist eine Kenngröße, die mit einem großen Aufwand an Datenerhebung einhergeht, dem jedoch große Unsicherheiten gegenüberstehen. Oftmals wird die Zahlungsbereitschaft von möglichen zukünftigen Kunden höher angegeben als der Preis, der später von ihnen als Marktteilnehmer mitgestaltet wird [35]. Der Grund dafür ist unklar, aber es könnte sein, dass die zukünftigen Kunden die Frage nach der Zahlungsbereitschaft als „Zahlungsbereitschaft, wenn sie das nötige Geld besitzen würden“ interpretieren. Dadurch besteht die Möglichkeit, dass umweltfreundliche Produkte erfolglos bleiben, die auf Grund von Prognosen bezüglich der Zahlungsbereitschaft ihrer zukünftigen Kunden am Markt eingeführt werden.

In BIOFAOM wurde die Berechnung des Produktwertes aus Kosten und Gewinn als Methode gewählt. Der Gewinn wird dabei errechnet aus demjenigen Kapitalertrag, der ein Unternehmen motiviert, zu investieren und eine Produktion aufzubauen. Dies geschieht in Übereinstimmung mit Ziel und Rahmen der Studie, die sich mit einer Entscheidungsunterstützung während der Forschungs- und Entwicklungsphase eines Produkts befasst. Die Firmen, die später entscheiden müssen, ob sie in eine Produktionsstätte investieren, müssen

über den Produktwert Bescheid wissen. Mit dieser Kenntnis können sie mögliche Schwachstellen beseitigen und ihre Vertriebsabteilungen auf die Fragestellung ansetzen, ob der Produktwert im Markt als Preis angenommen wird.

Systemraum

Preise von Produkten haben die Eigenschaft, dass sie die Werte über die gesamte Wertschöpfungskette aufsummieren („Rucksack-Prinzip“). Bei einem Produkt, das zu einem gewissen Preis gekauft wurde, ist es unerheblich, zu welchem Teil der Preis durch Kosten und Gewinn des Herstellers verursacht wird, oder ob der Hersteller überhaupt einen Gewinn erzielt. Der Adressat einer Studie zur ökonomischen Analyse ist normalerweise ein einzelner Akteur in der Wertschöpfungskette. Alle Preise von eingehenden Strömen für den Produktionsschritt erscheinen ihm als „black-box“ [110]. Dies ist ein wichtiger Unterschied zur Ermittlung der Umweltauswirkungen durch Ökobilanzen, dort wird ein Einblick in alle Prozesse der Wertschöpfungskette für eine Analyse der ökologischen Auswirkungen benötigt (vergleiche Abbildung 4.2, Seite 57).

Dadurch ist das Konzept des Life Cycle Costing auf folgende Fragestellungen anwendbar:

- Der Nutzer eines Produkts ist Adressat der Analyse. Er ist nicht nur am Preis des Produkts selber interessiert, sondern auch an möglichen Kosten für ihn, die während der Nutzungsphase oder dem Lebensende des Produkts entstehen. Dieses Konzept wird „total cost of ownership“ genannt.
- Ein Konsortium, das in der Entwicklung und Produktion eines Produktes zusammenarbeitet, ist Adressat der Analyse. In diesem Fall ist der Adressat an verschiedenen Stufen der Wertschöpfungskette interessiert, aber nur an den Stufen, die sich auf das Konsortium als abgeschlossener Teil der Wertschöpfungskette beziehen. Dieses Konzept nennt man „total production cost“.

Der zweite Fall trifft auf das Projekt BIOFOAM zu, bei dem ein Konsortium über mehrere Stufen der Wertschöpfungskette Schaumstoff produzieren möchte (vom Rohstoff über Monomere und Polymer zum Schaumprodukt). Für diese Studie wird daher das „total production cost“-Konzept angewendet und das BIOFOAM-Konsortium wird als ein abgeschlossener Teil der Wertschöpfungskette angesehen. Trotzdem werden die unterschiedlichen Produktionsschritte innerhalb des Konsortiums in Kostenzentren eingeteilt, jede mit einer separaten Berechnung des Produktwertes. Auf diese Art und Weise ist für jeden Produktionsschritt abgesichert, dass es sich wirtschaftlich lohnt, in eine Produktionsstätte für diesen Herstellungsschritt zu investieren.

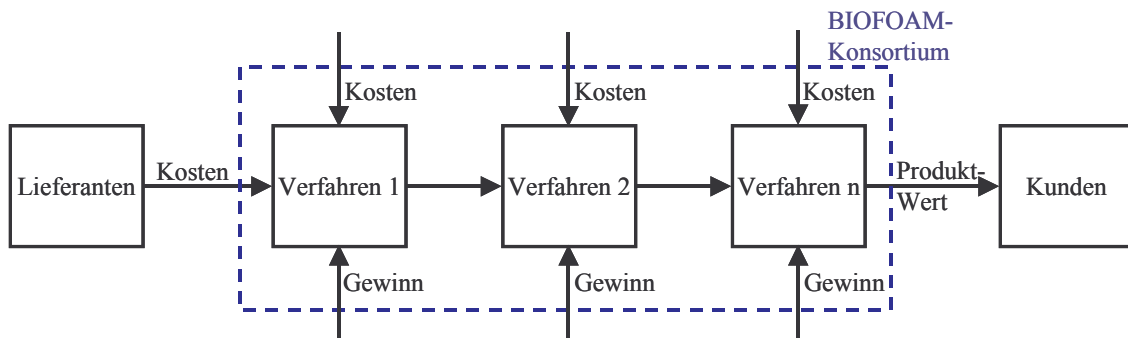


Abbildung B.1: Systemraum der ökonomischen Analyse in BIOFOAM

Allokation und Gutschriften

Im dem Fall, dass ein Produktionsschritt mehr als ein marktfähiges Produkt erzeugt, wird der Marktpreis des Nebenprodukts (das nicht in einem weiteren Schritt von BIOFOAM eingesetzt wird) gutgeschrieben.

Prognose der Investitionskosten

Es sind verschiedene Methoden und Gleichungen bekannt, um die Investitionskosten einer Anlage in der chemischen Industrie zu ermitteln. In BIOFOAM werden die Investitionskosten in Anlehnung an [11][64][81][150] unter Berücksichtigung der folgenden technischen Eigenschaften prognostiziert:

- Maximale im Verfahren auftretende Temperatur in [°C]
- Maximaler im Verfahren auftretender Druck in [bar]
- Zahl der funktionellen Einheiten des Verfahrens in [-]
- Kapazität der Anlage in [kg/a]
- Materialindex der für den Anlagenbau verwendeten Materialien in [-]

Anhang C: Verfahren, die den Regressionen zugrunde liegen

Tabelle C.1: Dokumentation der Verfahren, des Maßstabs einer durchschnittlichen Anlage und des Bezugsjahres, die der Entwicklung von Kennzahlen zur Prognose der Umweltauswirkungen in Kapitel 4.8 zugrunde liegen.

Name	Maßstab in [t/a]	Bezugsjahr
Acetaldehyd (Ethanal), aus Ethen	125.000	1994
Acrylnitril (Acrylsäurenitril), aus Propen	175.000	1996
Acrylnitril-Butadien-Styrol-Copolymer (ABS), Emulsionsverfahren	50.000	1998
Adipinsäure (Hexandisäure), aus Cyclohexan	125.000	1996
Allylchlorid (3-Chlorpropen), aus Propen	100.000	1996
Anilin (Aminobenzol), aus Nitrobenzol	100.000	1996
Benzol, aus Toluol	250.000	1996
Benzol, aus Reformatbenzin	125.000	1996
Bisphenol A, aus Aceton und Phenol	50.000	1996
Butadien, aus C4-Schnitt	50.000	1993
Butandiol, aus Ethin und Formaldehyd	25.000	1996
Butanon (Methyl-Ethyl-Keton)	25.000	1996
Buten (Butylen), aus Butan/Buten-Mix	50.000	1995
Caprolactam, aus Cyclohexan	150.000	1994
Cumol (Isopropylbenzol), aus Benzol und Propen	125.000	1996
Cyclohexan, aus Benzol	100.000	1993
Dimethylterephthalat (DMT), aus Xylol	250.000	1992
Epichlorhydrin, aus Allylchlorid	100.000	1996
Essigsäure (Ethansäure), aus Acetaldehyd	125.000	1995
Essigsäurevinylester (Vinylacetat) aus Ethen und Essigsäure	150.000	1990
Ethandiol (Ethylenglykol), aus Ethylenoxid	75.000	1996
Ethanol, aus Ethen	275.000	1996
Ethin (Acetylen), aus Erdgas durch partielle Oxidation	50.000	1997
Ethylbenzol, aus Benzol und Ethen	500.000	1996
Ethylendichlorid (Dichlorethan), aus Ethen und Chlor	375.000	1999
Ethylenoxid (Oxiran) aus Luft	125.000	1996
Ethylenoxid (Oxiran) aus O ₂	125.000	1996
Ethylen-Propylen-Elastomer (EPDM)	50.000	1996
Formaldehyd 100 % (Methanal), aus Methanol	25.000	1994
Harnstoff (Carbamid)	450.000	1996
Hexandiamin (Hexamethylendiamin, HMDA) aus Butadien	100.000	1996
Maleinsäureanhydrid aus Benzol	25.000	1996
Maleinsäureanhydrid aus Butan	25.000	1996
Methylendi(phenylisocyanat) (MDI), aus Anilin und Formaldehyd	50.000	1994
Methylmethacrylat (MMA), aus Aceton-Cyanhydrin	100.000	1994
Nitrobenzol, aus Benzol	125.000	1996
Phenol-Formaldehydharz (PF), Resolververfahren	25.000	1999
Phthalsäureanhydrid (PSA), aus Xylol	25.000	1996
Poly(butylenterephthalat) (PBT)	50.000	1998
Poly(ethylenterephthalat) (PET), aus Dimethylterephthalat und Ethandiol	100.000	1995
Polyamid 6 (PA 6)	25.000	1998
Polyamid 6.6 (PA 6.6), aus Adipinsäure und Hexandiamin	25.000	1998
Polybutadien (BR)	50.000	1996
Polycarbonat (PC)	25.000	1996
Polyethylen hoher Dichte (PE HD), Suspensionsverfahren	125.000	1996
Polyethylen hoher Dichte (PE HD), Gasphasenverfahren	125.000	1999
Polypropylen (PP), Suspensionsverfahren	75.000	1996
Polystyrol (PS), Massenverfahren	50.000	1996

Polyvinylchlorid (PVC), Suspensionsverfahren	100.000	1996
Propandiol (Propylenglykol), aus Propylenoxid	100.000	1997
Propanol, aus Propen	125.000	1996
Propantriol (Glycerin), aus Epichlorhydrin	50.000	1996
Propylenoxid (Methyloxiran), aus Chlorhydrin	175.000	1996
p-Xylol, aus Xylol-Mix	125.000	1996
Styrol (Vinylbenzol), Oxialkylierungsverfahren	450.000	1990
Styrol-Butadien-Elastomer (SBR), Suspensionsverfahren	75.000	1996
Toluoldiisocyanat (TDI), Phosgenverfahren	50.000	1994
Vinylchlorid (Vinylchloridmonomer, VCM), aus Ethen und Chlor	500.000	1997

Nach den Ausführungen über die Zeitabhängigkeit der Prognoseergebnisse in Kapitel 4.8.3 ist die Datengrundlage dieser Untersuchung an der Grenze ihrer Gültigkeit und sollte überarbeitet werden. Eine Überarbeitung der GaBi 4-Datenbank [67] findet momentan am IKP statt, die Ergebnisse liegen jedoch noch nicht konsistent vor. Es wird daher aus Gründen der zeitlichen Konsistenz der erarbeiteten Kennzahlen auf die vorliegende Datengrundlage zurückgegriffen.