

Ein inputabhängiges Ökoinventar- Modell für die thermische Verwertung von Abfall- Lösungsmittel in der chemisch- pharmazeutischen Industrie

Doctoral Thesis

Author(s):

Seyler, Christina

Publication date:

2003

Permanent link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-004562632>

Rights / license:

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#)

Diss. ETH Nr. 15089

**Ein inputabhängiges Ökoinventar-Modell für die
thermische Verwertung von Abfall-Lösungsmittel
in der chemisch-pharmazeutischen Industrie**

Abhandlung
zur Erlangung des Titels
Doktorin der Technischen Wissenschaften
der
Eidgenössischen Technischen Hochschule Zürich

vorgelegt von
Christina Seyler
Dipl.-Ing. (Technische Hochschule Karlsruhe)
geboren am 22.11.1969
von Adliswil, ZH

Angenommen auf Antrag von
Prof. Dr. K. Hungerbühler, Referent
Prof. Dr. A. Wokaun, Korreferent

Zürich, 2003

Zusammenfassung

Ökobilanzen können dazu verwendet werden, chemische Produkte und Prozesse ökologisch zu beurteilen. Zu den wichtigsten Stoffflüssen im Zusammenhang mit der Chemikalienproduktion gehören organische Lösungsmittel. Besonders in der chemisch-pharmazeutischen Industrie werden sehr lösungsmittelintensive Prozesse durchgeführt, bei denen eine grosse Menge Abfall-Lösungsmittel (ALM) entsteht. Grundsätzlich gibt es mehrere Behandlungsmöglichkeiten für ALM. In der Praxis zeigt sich allerdings, dass die Möglichkeiten aus ökonomischen und logistischen Gründen eingeschränkt sind. Eine der wichtigsten Optionen der ALM-Behandlung ist die *thermische Verwertung mit Energierückgewinnung*. Für den wichtigen Prozess der thermischen ALM-Verwertung existieren noch keine für Ökobilanzen geeigneten Modelle. In dieser Arbeit wird daher ein Modell entwickelt, mit dem Ökoinventare für Ökobilanzen erstellt werden können.

Bei der Konzipierung eines Modells für den ALM-Verwertungsprozess stellt sich das Problem, dass ALM immer als *Mischung von mehreren ALM* verbrannt werden. Daher liefern Messwerte, die normalerweise die Basis für die Erstellung eines Ökoinventars darstellen, nur Informationen über das *Gemisch* und keine direkten Aussagen über die Umweltauswirkungen eines *spezifischen ALMs*. In der Regel wird jedoch genau diese *spezifische* Information in Ökobilanzen benötigt. Um die Umweltbelastung eines spezifischen ALMs aus den Daten eines Gemisches abbilden zu können, wird ein Multi-Input Allokationsmodell erstellt. Dabei werden die Stoff- und Energieflüsse des ALV-Prozesses anhand der zugrunde liegenden physikalischen und chemischen Prozesse mit den „die Umweltbelastung verursachenden“ Eigen-

schaften des ALMs verknüpft. Das resultierende Modell erlaubt bei bekannten Eigenschaften eines ALMs die Berechnung eines *ALM-spezifischen* Ökoinventars.

Daten zum Prozess wurden anhand eines Industrie-Fallbeispiels erhoben. Das in dieser Arbeit konzipierte Modell basiert auf einer Anlage zur thermischen ALM-Verwertung der Firma Valorec Services, Schweizerhalle. Als Basis für die Multi-Input Allokationsmodellierung wird zunächst ein *Ökoinventar für das ALM-Gemisch* aufgestellt. Ausgehend von diesem Ökoinventar kann dann das *ALM-spezifische Modell* entwickelt werden, indem Verbrauchs- und Emissionsfaktoren, Transferkoeffizienten und Berechnungsformeln aufgestellt werden. Die Anwendung des entwickelten Modells wird anhand mehrerer theoretischer ALM demonstriert. Ebenso wird gezeigt, wie Informationen zur Datenunsicherheit in die Berechnung eines Inventars einbezogen werden können.

Um die Anwendbarkeit des erstellten Modells zu testen, wird es im Rahmen einer Ökobilanz auf ein reales Fallbeispiel aus der Spezialitätenchemie angewendet. Es handelt sich beim Fallbeispiel um die Herstellung einer Agrochemikalie in einem Werk der Firma Syngenta. Es lagen Daten zum Prozess vor, die innerhalb einer Ökobilanz zwei Fragestellungen erlaubten. Zum einen wird die thermische Verwertung des bei der Agrochemikalienproduktion anfallenden ALMs ökologisch bewertet. Es zeigt sich, dass die Verwertung des ALMs durch die Nutzung der anfallenden Energie insgesamt zu einer Umweltentlastung führt. Zum anderen wird die Umweltauswirkung der thermischen ALM-Verwertung mit dem Herstellungsprozess der Agrochemikalie verglichen. Hier zeigt sich, dass der Verwertungsprozess innerhalb der Chemikalienproduktion eine grosse Relevanz besitzt.

Am erstellten ALM-Verwertungsmodell werden verschiedene Sensitivitätsanalysen durchgeführt. Es kann gezeigt werden, dass sich das Modell nicht im Sinne einer verkürzten Ökobilanz (Screening-Ökobilanz) vereinfachen lässt. Je nach Zusammensetzung des ALMs können ganz unterschiedliche Ökoinventar-Parameter von Bedeutung sein. Verallgemeinernd lässt sich lediglich sagen, dass die durch im ALM vorhandenen Schadstoffe verursachte Um-

weltbelastung in der Regel höher ist, als die durch den Prozess selbst verursachte Umweltbelastung. Eine Analyse der im Fallbeispiel verwendeten Energiemodelle zeigt, dass das Strommodell weniger sensitiv ist als angenommen. Mehr Einfluss hat die Wahl des Dampfmodells. Der Vergleich der durch unterschiedliche ALM verursachten Umweltbelastungen mit den entsprechenden Gutschriften ergibt bei den meisten ALM eine Netto-Umweltentlastung für den Verwertungsprozess.

Das in dieser Arbeit entwickelte Modell erlaubt die Berechnung eines spezifischen Ökoinventars für jedes beliebige ALM und kann in der vorliegenden Form unmittelbar angewendet werden. In einer nächsten Phase könnten zur Erhöhung der Aussagequalität noch weitere Aspekte wie z.B. Modellunsicherheiten durch Allokationsentscheide oder Unsicherheiten durch die Anwendung verschiedener Bewertungsmethoden anhand weiterer Sensitivitätsanalysen untersucht werden.

Abstract

Life cycle assessments (LCA) can be used for ecological assessment of chemical products and processes. Organic solvents are, with respect to the production of chemicals, amongst the most important mass fluxes. Especially in the chemical-pharmaceutical industry solvent intensive processes are carried out and bring about high yields of waste solvent. Principally, there are many treatment options for waste solvents. In practice though, the possibilities are limited due to economical and logistical reasons. One of the most important options for waste solvent treatment is the *thermal treatment with energy recovery*. Up to the present, however, no generic models describing waste solvent treatment are available for LCA. In this thesis a model is developed that sets up life cycle inventories (LCI) for the thermal treatment of waste solvents.

When developing a model for the waste solvent treatment process it has to be considered that waste solvents are always burnt as a *mixture of several waste solvents*. Therefore, measurement data only apply to this *waste solvent mixture* but not to the ecological impacts of a *specific waste solvent*. However, in LCA studies normally *product specific* information is required. To estimate the ecological impact of a *specific waste solvent* based on data of a *waste solvent mixture* a multi-input allocation model is set up. In multi-input allocation modelling the mass and energy fluxes of the waste solvent treatment process are linked to the waste solvent features which cause the specific environmental impacts. This linking is done according to the underlying (physico-)chemical processes. The resulting model allows for the calculation of a *waste solvent specific* LCI.

Data for the incineration process was collected from a waste solvent incineration plant that is run by Valorec Services AG in Schweizerhalle. First a LCI for the waste solvent mixture is set up as the basis for the multi-input allocation model. Then, based on this LCI the waste solvent specific model is developed by defining consumption and emission factors, transfer coefficients and LCI calculation formulas. The application of the model is demonstrated in this thesis for several theoretical waste solvents. Furthermore it is shown how information on data uncertainty can be included in the LCI.

In order to test the applicability of the model it is applied within the framework of a LCA on a real case study from speciality chemistry: The production of an agrochemical in a plant of the Syngenta company. Available process data allowed for two questions within the LCA. First, the ecological impact for thermal treatment of the waste solvent occurring in the production process of the agrochemical is assessed. The thermal treatment of the waste solvent leads to a positive ecological impact because of the use of the produced energy. Second, the ecological impact of the thermal treatment of waste solvent is compared to the impacts occurring from the agrochemical production process. It can be shown that the thermal treatment of waste solvent has a large relevance within the production process.

A sensitivity analysis is carried out for the waste solvent treatment model. The result shows, that it is not possible to simplify the model in the sense of a simplified (screening) LCA. Depending on the composition of the waste solvent different LCI parameters are of importance. The only general statement which can be made is that the ecological impact that is caused by impurities of the waste solvent is generally higher than the impact caused by the process itself. Electricity models are often critical in LCA studies. An analysis of the used energy models showed that the electricity model is less sensitive than expected. The choice of the steam model, however, has more influence on the outcome of the case study. A comparison of the ecological impacts and the credits caused by different waste solvents showed that for most waste solvents there is a positive net ecological impact.

The model developed in this thesis allows the calculation of a specific LCI for any waste solvent. This model can be used immediately in the present form. To increase the quality of the results further aspects such as e.g., a sensitivity analysis of model uncertainties caused by allocation decisions or uncertainties caused by different assessment methods should be carried out in a next step.