

# Stoffstrommodellierung der Flüsse von Komplexbildnern in Baden-Württemberg

René Keil\*, Hendrik Lambrecht\*, Christian Kühne\*\*, Mario Schmidt\*

\*Institut für Angewandte Forschung (IAF), Hochschule Pforzheim; \*\* Umweltministerium Baden-Württemberg

Viele umweltrelevante Stoffe entstehen in der Technosphäre und wandern – teilweise über diffuse Quellen – in die Biosphäre. Die Darstellung der Zusammenhänge ist nicht trivial, weil meistens detaillierte Daten fehlen. Damit wird es schwierig, Maßnahmen in der Technosphäre, z. B. über die Beschränkung oder den Ersatz von Stoffen, hinsichtlich ihrer Auswirkungen in der Biosphäre zu beurteilen. Eine Möglichkeit besteht jedoch darin, ein Datengerüst aufzubauen, in dem die Stofffrachten in den verschiedenen Modellkompartimenten zusammengetragen und ggf. abgeschätzt werden. Bilanzlücken können dadurch teilweise geschlossen werden oder zeigen zumindest an, wo weitere Messdaten erforderlich oder unbekannte Einträge zu vermuten sind. In einem Projekt für das Umweltministerium Baden-Württemberg wurden entsprechende Bilanzen am Beispiel des Komplexbildners EDTA erstellt. Dabei kamen Methoden zum Einsatz, die ansonsten in der betrieblichen Material- und Energieflussanalyse eingesetzt werden.

## Stoffe mit vielfältigem Einsatz

Komplexbildner gehören zu chemischen Komplexverbindungen, die mit Metallen wasserlösliche Verbindungen bilden können und deshalb in vielen Prozessen und Branchen eingesetzt werden, z.B. in Wasch- und Reinigungsmitteln, in der Photo- oder Papierindustrie und in der Agrar- und Lebensmittelindustrie. Sie sind auch Bestandteil von Produkten, die in privaten Haushalten verwendet werden.

Allerdings zeichnen sie sich teilweise durch eine hohe Stabilität und eine geringe Abbaubarkeit in Umweltmedien aus. Durch ihren ubiquitären Einsatz und ihre Freisetzung mit dem Abwasser konnten in den letzten Jahren nennenswerte Belastungen in Oberflächengewässern durch Komplexbildner nachgewiesen werden. Zahlreiche industriell eingesetzte Komplexbildner, wie EDTA (Ethyldiamintetraessigsäure), NTA (Nitrilotriessigsäure), PDTA (Propyldiamintetraessigsäure) und DTPA (Diethylentriaminpentaessigsäure), gelten dabei als ökologisch bedenklich und werden in der Wassergefährdungsklasse 2 (EDTA, NTA und PTDA) bzw. 1 (DTPA) geführt. Von dem weltweit am meisten verwendeten Komplexbildner EDTA [1] wurden allein in Europa 1997 ca. 32.000 t eingesetzt [2].

## Daten-Puzzle – Wo sind Lücken?

Bereits andere Projekte hatten deshalb das Ziel, Branchen, Prozesse und Produkte zu identifizieren, in denen EDTA zum Einsatz kommt, um somit eine Datenbasis für weitere Analysen zu schaffen [3, 4]. Auf diese Weise sollten Strategien und Potenziale erarbeitet werden, um den EDTA-Eintrag zu beeinflussen. Um die EDTA-Belastung effektiv mindern und die Entwicklung später auch verfolgen zu können, sind

Informationen über Emission, Transportwege und schließlich die Belastung in den Umweltmedien erforderlich. Doch nicht die typischen Ausbreitungsmodelle in den Umweltmedien, z.B. in Gewässern, standen bei diesem Projekt im Vordergrund. Vielmehr sollten unvollständig verteilte Informationen über Stofffrachten zu einem gemeinsamen Datengerüst zusammengefügt werden. Damit sollten Datenlücken identifizierbar sein und Handlungsschwerpunkte abgeleitet werden können. Vergleichbare Arbeiten mit der Beschreibung des Stoffmetabolismus in Technosphäre und Ökosphäre wurden beispielsweise von [5, 6, 7] vorgenommen.

## Vernetzung anschaulich machen

Es gibt mehrere Möglichkeiten ein komplexes Stoffstromsystem über ein Modell abzubilden [6, 8, 9]. Entscheidend für die Wahl des Modelltyps ist dabei die Frage, welchen Erkenntnisgewinn man später aus dem Modell ziehen will. An das Modell der Komplexbildnerströme in Baden-Württemberg wurden in Absprache mit dem Umweltministerium Baden-Württemberg folgende Anforderungen gestellt:

- Abbildung der Stoffquellen, wie Herstellung, Verarbeitung sowie Einsatz und Gebrauch von Komplexbildnern (folgend als Technosphäre bezeichnet);
- Abbildung der räumlichen Einleitungsstruktur und des Stofftransportes in Flusssystemen (folgend als Ökosphäre bezeichnet);
- Verknüpfung der eingeleiteten Mengen mit den Quellen;
- Möglichkeit der szenariohaften Überprüfung verschiedener Minderungsstrategien;
- vorteilhaftes Aufwand-Nutzen-Verhältnis bei der Modellerstellung und Datenakquisition.



M.Sc. Dipl.-Ing. (FH) René Keil



Dipl.-Phys. Hendrik Lambrecht



Dr. C. Kühne



Prof. Dr. M. Schmidt

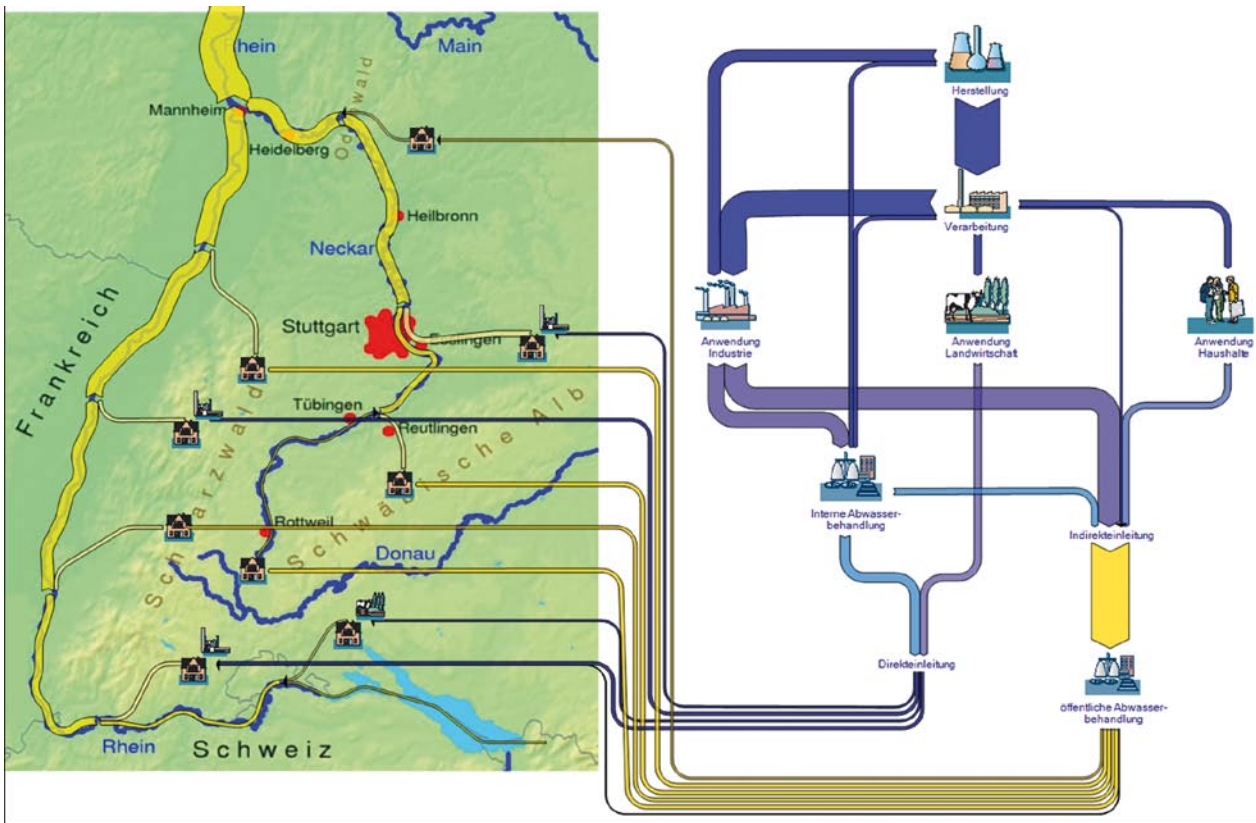


Abb.1: Verknüpfung von Öko- und Technosphäre mittels der übergreifenden EDTA-Ströme

Aus diesen Anforderungen ergeben sich letztendlich zwei zentrale Fragen für das Modell:

1. Wo werden Komplexbildner in welchen Mengen eingesetzt?
2. Welche Anteile davon gelangen später über das Abwasser in welche Flussabschnitte?

Diese beiden Fragen fokussieren auf unterschiedliche Sichtweisen. Mit der ersten Frage gelangt man zu einer Darstellung der technischen Prozesse von der Herstellung über die Verarbeitung bis zum Produktgebrauch von Komplexbildnern – bezogen auf einzelne Branchen und Anwendungsbereiche in Baden-Württemberg. Die zweite Frage führt dazu, dass diese Erkenntnisse bzw. Daten auf kleinräumige Strukturen, wie Landkreise oder Einzelunternehmen aufgeteilt bzw. disaggregiert werden müssen, um die geographische bzw. räumliche Verteilung darzustellen.

Dazu wurde von zwei Teilmodellen ausgegangen – einem Modell der Technosphäre und einem Modell der Ökosphäre – die durch die Komplexbildnerströme miteinander vernetzt sind. Die Trennung in Techno- und Ökosphäre hatte den Vorteil, dass jedes Modell hinsichtlich seiner spezifischen Charakteristika angepasst und auch ohne das andere funktionsfähig ist.

Praktisch umgesetzt wurde das Modell über den Ansatz der so genannten Stoffstromnetze, die auf einem Petrinetz-Ansatz beruhen [9, 10] und hauptsächlich im Bereich der Ökobilanzierung und betrieblichen Material- und Energieflussanalyse eingesetzt werden. Dabei werden quasi gekapselte Teilmodelle als Input-Output-Bilanzen betrachtet und deren Vernetzung untereinander durch die Stoffströme im Gesamtsystem abgebildet. Das Modell wurde mit der Stoffstrom-Software *umberto®* umgesetzt. Für die Dateneingabe und Parameterwahl für Szenariorechnungen wurde eine leicht verständliche Eingabeoberfläche unter MS-Excel™ geschaffen.

### Schwierige Datenlage

Die Technosphäre kann in vier Stufen gegliedert werden, wobei die erste Stufe in Baden-Württemberg irrelevant ist:

- Herstellung von Komplexbildnern
- Verarbeitung von Komplexbildnern
- Anwendung von Komplexbildnern in Industrie/Dienstleistung
- Anwendung von Komplexbildnern in privaten Haushalten.

Die Datenrecherche zu den verbleibenden Stufen der Verarbeitung und Anwendung von EDTA stützte sich im Wesentlichen auf die Protokolle und Anlagen der so genannten EDTA-Fachgespräche, die beim Umweltbundes-

amt (UBA) in Berlin stattfanden [3]. Aus diesen Fachgesprächen ließen sich zwei unabhängige Datenquellen identifizieren:

- UBA-Statistik: Umfrage verschiedener VCI-Fachverbände bei ihren Mitgliedern.
- CEFIC-Statistik: Umfrage des Europäischen Verbandes der Chemischen Industrie (CEFIC) bei europäischen Herstellern von Komplexbildnern.

Dabei wurde deutlich, dass zwischen beiden Statistiken Diskrepanzen auftraten. So lagen die Angaben der CEFIC-Statistik systematisch und teilweise deutlich über den Angaben der UBA-Statistik. In einem aufwendigen Prozess der Aufbereitung wurden die Datensätze abgeglichen. Außerdem wurden Literaturwerte zur Wassergängigkeiten für die einzelnen Branchen ermittelt, d.h. der prozentuale Anteil des eingesetzten EDTA, welches in das Abwasser und somit in die Ökosphäre eingetragen wird.

### Milchkühe in Stuttgart?

Da die aufbereiteten Daten bislang nur auf Bundesebene vorlagen, musste der EDTA-Einsatz für Baden-Württemberg räumlich disaggregiert werden. Über geeignete Skalierungsfaktoren wurden die Bundesdaten bis auf einzelne Gebietskörperschaften wie Re-

Branche	WG [%]	EDTA-Eintrag [t/a]	Skalierung
<b>1. Anwendung Industrie</b>			
1.1 Getränkeindustrie		342,6	
1.1.1 Produktion von Fruchtsaftgetränken	100	51,2	Umsatz
1.1.2 Produktion von Erfrischungsgetränken und Mineralwasser	100	172,0	Umsatz
1.1.3 Produktion von Wein	100	10,2	Rebland (ha)
1.1.4 Produktion von Bier	100	109,2	Umsatz
1.2 Milchindustrie	100	257,5	Milchkühe
1.3 Sonstige industrielle Reinigungsprozesse	100	149,7	Bevölkerung
1.4 Fotoindustrie	70	136,0	Umsatz
1.5 Textilindustrie		54,3	
1.5.1 Webereien	100	16,3	Umsatz
1.5.2 Spinnereien	100	16,3	Umsatz
1.5.3 Textilveredelung	100	16,3	Umsatz
1.5.4 Lederindustrie	85	5,4	Umsatz
1.6 Produktion von Leiterplatten und Galvanik		16	
1.6.1 Produktion von elektr. Bauteilen	1	14	Umsatz
1.6.2 Galvanik	1	2	Umsatz
1.7 Zellstoff- und Papierproduktion		3,5	
1.7.1 Produktion von Zellstoffen	30	0,1	Unternehmen
1.7.2 Produktion von Papier und Pappe	30	3,4	Umsatz
<b>2. Anwendung Landwirtschaft</b>	25	180	Landw. Fläche relevanter Kulturen
<b>3. Anwendung Haushalte</b>		162,3	
3.1 Einsatz von Körperpflegeprodukten	75	131,3	Bevölkerung
3.2 Reinigung von Haushalten	100	31,0	Bevölkerung
<b>4. Verarbeitung Industrie</b>		2118	
Waschen und Reinigen, Haushalte	1	74	Umsatz
Körperpflegemittel	1	133	Umsatz
Reinigen und Desinfizieren (in Milch- und Getränkeindustrie, sowie für sonstige industrielle Reinigungsprozesse)	1	756	Umsatz
Fotoindustrie	1	1155	Umsatz

Tab.1: EDTA-Einsatz auf Bundesebene für relevante Branchen sowie deren Wassergängigkeit (WG) und Skalierungsfaktoren

gierungsbezirke oder Kreise und Gemeinden aufgelöst. Bei der Wahl eines geeigneten Skalierungsfaktors standen verschiedene Möglichkeiten zur Auswahl (Tab. 1). Am häufigsten zum Einsatz kamen dabei Umsatz, Einwohnerzahl und landwirtschaftlich genutzte Fläche.

Die Skalierung mit dem Unternehmensumsatz ist dabei nicht unproblematisch. Grund ist das Betriebsstättenprinzip: Der Ort, dem der Unter-

nehmensumsatz nach der amtlichen Statistik zugeschrieben wird, fällt geografisch nicht zwangsläufig mit dem Ort zusammen, an dem die Produktion stattfindet und EDTA eingesetzt wird. Im Falle der Milchindustrie war zum Beispiel aufgefallen, dass mehr als 50% des Landesumsatzes der Branche im RB Stuttgart anfällt. Ursache war ein Hersteller von Milch und Molkereiprodukte der seinen Sitz in Stuttgart, einen zweiten Standort jedoch in Leutkirch, Landkreis Ravensburg, hat. Eine Disag-

gregation über den Umsatz hätte also zu fehlerhaften geographischen Zuordnungen des EDTA-Eintrags geführt. Im vorliegenden Fall wurde daher der Milchkuhbestand als Skalierungsfaktor gewählt, der zu einer plausibleren geographischen Verteilung führte.

### Die Flüsse Baden-Württembergs als „Vorfluter“

Das verwendete EDTA gelangt zum größten Teil über direkte und indirekte Einleitungen letztendlich in Flüsse, in der Fachsprache auch oft als Vorfluter bezeichnet. Die Modellierung der Ökosphäre orientierte sich deshalb an den drei Hauptflussgebieten, von Baden-Württemberg: Rhein, Donau und Main mit ihren Zuflüssen. Für die Hauptflussgebiete wurden sog. Bilanzregionen definiert, die sich durch Vorfluter-Messstellen voneinander abgrenzen ließen. Im weiteren Schritt wurden die einzelnen baden-württembergischen Stadt- und Landkreise den einzelnen Bilanzregionen und Hauptflussgebieten zugeordnet. Dabei muss beachtet werden, dass die Grenzen von Stadt- und Landkreisen i.d.R. nicht deckungsgleich mit den geomorphologisch geprägten Grenzen einer Bilanzregion sind.

Die kleinste modellierte Einheit innerhalb der Ökosphäre stellen die Stadt- und Landkreise dar. Im Zuge der Disaggregation wurden auch für diese die jeweiligen Werte der einzelnen Skalierungsfaktoren erhoben. Auf diese Weise konnte der spezifische EDTA-Eintrag pro Stadt- bzw. Landkreis aufgeschlüsselt auf die einzelnen Branchen abgeschätzt werden. Zusätzlich wurde Kläranlagen in Baden-Württemberg berücksichtigt, für die u.a. ein genereller Abbau von EDTA in den Kläranlagen von 25% angesetzt wurde.

### Nachmessungen notwendig

In Abb. 3 wird eine Gesamtbilanz mit den gegenwärtig verfügbaren Daten dargestellt. Die roten und grünen Flüsse in der Grafik unten rechts stellen Ströme dar, die den Unterschied zwischen den gemessenen Vorfluterdaten und den abgeschätzten EDTA-Einträgen aus den Landkreisen ausgleichen sollen. Im Idealfall sollten diese Ströme Null sein. Im Falle des vorliegenden Szenarios sind sie jedoch vergleichsweise groß.

Die Größe der Ausgleichsströme lässt sich zu großen Teilen mit der Qualität der Vorflutermessdaten aus der ecotec-

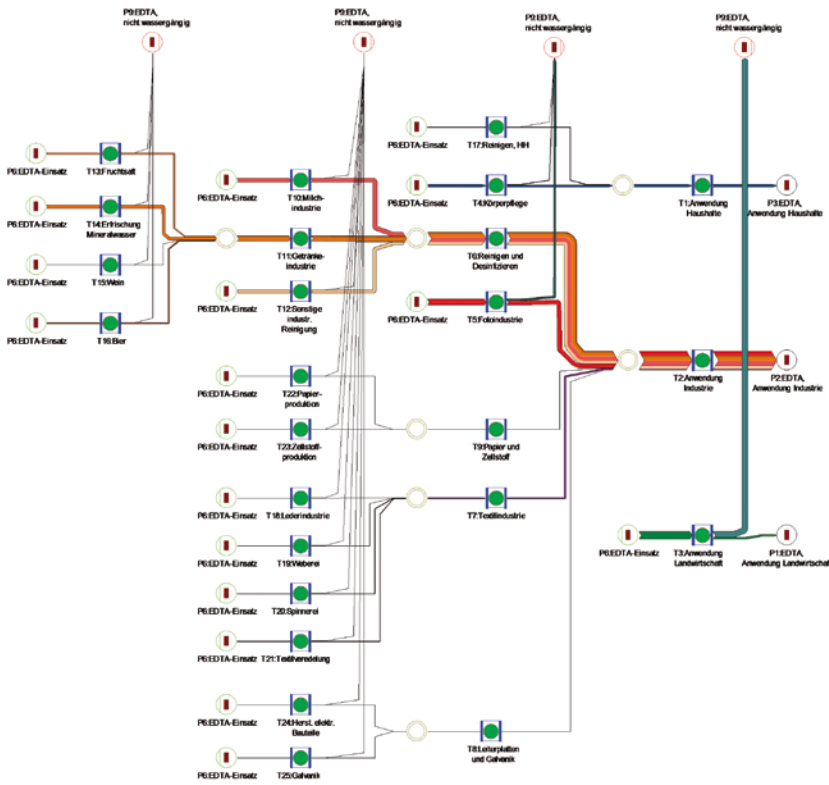


Abb.2: Ausschnitt aus dem Modell der Technosphäre mit den verschiedenen EDTA-Einträgen. Hinter jedem Kästchen verbirgt sich ein individuelles Submodell zur Berechnung der Teilfrachten.

Studie [4] erklären. Verfolgt man die Ausgleichsströme auf den unteren Modellebenen, so stellt man fest, dass die wesentlichen Beiträge aus den Bilanzregionen Hochrhein und Oberrhein 1 stammen. Für diese beiden Bilanzregionen liegen Vorflutermessdaten aus den Zuflüssen von Thur, Aare und Ill mit nur einem oder zwei Messwerten vor. Daraus lassen sich keine belastbaren Abschätzungen über den EDTA-Zufluss aus diesen Flüssen machen. Hier wären Nachmessungen erforderlich.

Umgekehrt fällt bei den Ergebnissen auf, dass für die Bilanzregion Neckar ein höherer EDTA-Eintrag aus den Landkreisen abgeschätzt wird, als es über die Vorflutermessdaten bestätigt werden kann. Dies liegt daran, dass die Zuordnung der Stadt- und Landkreise zu den geografischen Bilanzregionen und Hauptflussgebieten noch nicht passte und z. B. ein Landkreis durchaus in zwei Bilanzregionen oder auch in zwei Hauptflussgebiete EDTA eintragen kann. Mit entsprechenden Nachjustie-

rungen können diese Abweichungen jedoch beseitigt werden.

Schließlich zeigten sich auch die Lücken bei den Eingangsdaten des EDTA-Einsatzes. Die Kategorien „Sonstige“ (CEFIC-Statistik) bzw. „Weitere chemische Industrie (Anwendung)“ (UBA-Statistik) in Höhe von etwa 10% des gesamten EDTA-Einsatzes konnten bei der Modellierung keinen Quellen geographisch zugeordnet werden. Daher ist im Modell stets eine Unterschätzung des Eintrages aus der Technosphäre zu erwarten. Das Modell liefert aber einen Hinweis, ob diese Lücken „plausibel“ sind oder ob noch weitere unbekannte Einträgen aus der Technosphäre auftreten, die dann Maßnahmen auf der Erhebungsseite nach sich ziehen müssten.

### Stoffbilanzen für Überblick und Politikberatung sinnvoll

In dem Projekt war leider keine Messkampagne integriert, die ein Schließen der zu Tage getretenen Datenlücken erlaubt hätte. Dies ist aber Voraussetzung, um ein entsprechendes Datengerüst zu vervollständigen und zu validieren. Grundsätzlich können mit einem solchen Modell dann Rückschlüsse auf die Herkunft des EDTA-Eintrages für Baden-Württemberg auf Stadt- und Landkreisebene gezogen werden. Es lassen sich z.B. Branchen und Landkreise identifizieren, für die ein spezieller Handlungsbedarf, z.B. für konkrete Minderungsmaßnahmen, besteht. Weiterhin kann man auch verschiedene Strategien szenariohaft durchspielen. Folgende Handlungsansätze wurden mittels veränderbarer Parameter im Modell integriert:

- absolute Reduzierung des Einsatzes von Komplexbildern nach Anwen-

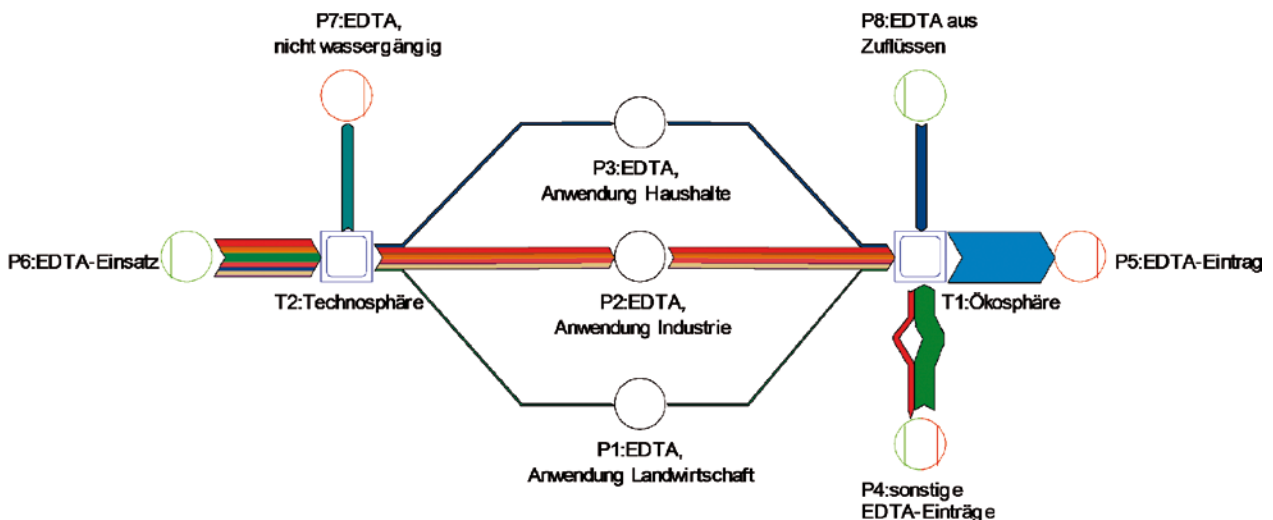


Abb.3: EDTA-Flüsse auf der obersten Modellebene mit einem Datenausgleich (unten rechts)

- dungsbereich
- Reduzierung der Wassergängigkeit von Komplexbildnern nach Anwendungsbereich
- Erhöhung der Abbauleistung in den einzelnen Kläranlagen

Grundsätzlich besteht die Möglichkeit diesen Modellansatz auch auf weitere Stoffe zu übertragen. Die dargestellte Methodik eignet sich für Stoffe,

- die großflächig eingesetzt werden und über statistische Strukturdaten einzelnen Regionen zugeordnet werden können und
- die nur schwer abbaubar sind und deren Fracht im Flussverlauf entsprechend den Zuflüssen zunimmt.

Die Methodik eignet sich nicht für Stoffe, die nur punktuell eingesetzt werden und nur geringe Einsatzmengen aufweisen.

Der Vorteil des verwendeten Ansatzes liegt im begrenzten Modellieraufwand. Datenlücken können sukzessiv und einfach geschlossen werden. Vor allem kann aber eine Verfeinerung in der Modellierung der Teilsegmente einfach vorgenommen werden. Dies wird durch die gekapselte Modellstruktur der Stoffstromnetze unterstützt.

Die verwendete Methodik ersetzt natürlich kein Ausbreitungsmodell, mit dem die Ausbreitung von EDTA in aquatischen Systemen und Konzentrationsverläufe bestimmt werden können. Solche Rechnungen könnten allerdings als Submodelle eingesetzt werden, um z.B. Frachten genauer zu berechnen. Das vorliegende Modell fungiert dann quasi als Metamodell. Die Methodik eignet sich gut, um mit verhältnismäßig geringem Aufwand Aussagen über den zu erwartenden Rückgang von EDTA-Frachten bei der Planung von Minderungsstrategien zu treffen und so die politische Entscheidungsfindung zu unterstützen.

## Quellen

- [1] Nowack, B. and J.M. VanBriesen (2005): Chelating agents in the environment. In: Nowack, B., VanBriesen, J.M. (Eds.), Biogeochemistry of Chelating Agents. ACS Symposium Series. American Chemical Society, Washington, DC: 1-18.
- [2] Oviedo, C. and J. Rodriguez (2003): EDTA: The Chelating Agent under Environmental Scrutiny. Química Nova, 26(6): 901-905.

In der Druckausgabe mit einem Inserat belegt.

- [3] Umweltbundesamt (UBA) (1999-2004): Ergebnisprotokolle und Anlagen zu den EDTA-Fachgesprächen zw. 1999 und 2004. Berlin.
- [4] Ecotec (2002): Verminderung der Emission schwer abbaubarer Komplexbildner in Baden-Württemberg. Studie für das Ministerium für Umwelt und Verkehr Baden-Württemberg, Stuttgart.
- [5] Brunner, P.H., Rechberger, H. (2004): Practical Handbook of Material Flow Analysis. Lewis Publishers: Boca Raton FL.
- [6] Baccini, P., Bader, H.-P. (1996): Regionaler Stoffhaushalt. Spektrum Akademischer Verlag: Heidelberg.
- [7] Schmitt, B., Zölch, C., Schmidt, M. (1998): Regionale Ökobilanzen. In: Schmidt, M., Höpfner, U. (Hrsg.): 25 Jahre ifeu-Institut. Vieweg: Braunschweig: 319-328.
- [8] Heß, O., Schröder, A., Klasmeier, J., Matthies, M. (2004): Modellierung von Schadstoffflüssen in Flusseinzugsgebieten. Umweltbundesamt (Hrsg.) UBA-FB 000619, Texte 19/04. Berlin.
- [9] Möller, A., Rolf, A. (1995): Methodische Ansätze zur Erstellung von

Stoffstromanalysen unter besonderer Berücksichtigung von Petri-Netzen. In: Schmidt, M., Schorb, A. (Hrsg.): Stoffstromanalysen in Ökobilanzen und Öko-Audits. Springer-Verlag: Heidelberg: 33-58.

[10] Schmidt, M., Keil, R. (2002): Stoffstromnetze und ihre Nutzung für mehr Kostentransparenz sowie die Analyse der Umweltwirkungen betrieblicher Stoffströme. Beiträge der Hochschule Pforzheim Nr. 103.

## Kontakt

Prof. Dr. Mario Schmidt, Hochschule Pforzheim, Tiefenbronner Str. 65, 75175 Pforzheim, 07231-28-6406, E-Mail: mario.schmidt@hs-pforzheim.de. Webseite: <http://umwelt.hs-pforzheim.de>