



2. Roadmap
des Kopernikus-Projektes „Power-to-X“:
Flexible Nutzung erneuerbarer Ressourcen (P2X)

TECHNISCHER ANHANG

**Nachhaltigkeitseffekte – Potenzielle
Entwicklungsmöglichkeiten**

Herausgeber: Florian Ausfelder, Hanna Dura

GEFÖRDERT VOM

KOPERNIKUS
P2X >>> **PROJEKTE**
Die Zukunft unserer Energie



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

HERAUSGEBER:

Florian Ausfelder (DECHEMA Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e.V.)

Hanna Dura (DECHEMA Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e.V.)

AUTOREN

Nachname	Vorname	Institution	Kapitel
Bareiß	<i>Kay</i>	(TUM) TUM - LS Erneuerbare und Nachhaltige Energiesysteme	1, 5
Deutz	<i>Sarah</i>	(LTT) RWTH-Lehrstuhl für Technische Thermodynamik	9
Forster	<i>Susanne</i>	(Audi) Audi AG	8
Fröhlich	<i>Thomas</i>	(ifeu) Institut für Energie- und Umweltforschung Heidelberg GmbH	2
Merz	<i>Cornelia</i>	(ÖI) Öko-Institut e.V.	9
Patyk	<i>Andreas</i>	(ITAS) Institut für Technikfolgenabschätzung und Systemanalyse	4, 6, 7, 12, 14-17
Poncette	<i>Dominik</i>	(ITAS) Institut für Technikfolgenabschätzung und Systemanalyse	4, 6, 7, 12, 14-17
Raab	<i>Moritz</i>	(DLR) Deutsches Institut für Luft- und Raumfahrt	10, 11, 13
Schreiber	<i>Andrea</i>	(FZJ-STE) Forschungszentrum Jülich - Institut für Energie- und Klimaforschung, Systemforschung und Technologische Entwicklung	3
Sutter	<i>Jürgen</i>	(ÖI) Öko-Institut e.V.	9
Tenhumberg	<i>Nils</i>	(tkIS) thyssenkrupp Industrial Solutions AG	18
Zapp	<i>Petra</i>	(FZJ-STE) Forschungszentrum Jülich - Institut für Energie- und Klimaforschung, Systemforschung und Technologische Entwicklung	3

Erstellt im Rahmen der Roadmapping-Aktivitäten im Kopernikus-Projekt „Power-to-X“: Flexible Nutzung erneuerbarer Ressourcen (P2X) gefördert durch das Bundesministerium für Bildung und Forschung.

INHALT

A. MODELLE UND ANNAHMEN DES LIFE CYCLE ASSESSMENT	3
1. Wasserstoffbereitstellung über die PEM-Elektrolyse	3
2. Synthesegasbereitstellung über die NT-Elektrolyse	5
3. Synthesegasbereitstellung über die HT-Co-Elektrolyse	8
4. Bereitstellung von Butanol	10
5. Bereitstellung und Nutzung von Wasserstoff über die LOHC-Transporttechnologie	12
6. Bereitstellung und Nutzung von LNG_HTEL und LNG_OxyFuel	14
7. Bereitstellung und Nutzung von STF	16
8. Bereitstellung und Nutzung von FT-Diesel	18
9. Bereitstellung und Nutzung von OME	19
B. ANNAHMEN DER TECHNO-ÖKONOMISCHEN ANALYSE	25
10. Bereitstellung von Wasserstoff über die PEM-Elektrolyse	27
11. Bereitstellung von Synthesegas über die HT-Co-Elektrolyse	27
12. Bereitstellung von Butanol	28
13. Bereitstellung von Wasserstoff über die LOHC-Transporttechnologie	29
14. Bereitstellung von LNG über LNG_HTEL und LNG_Oxyfuel	32
15. Bereitstellung von STF	33
16. Bereitstellung von FT-Diesel	34
17. Bereitstellung und Nutzung von OME	35

Abbildungsverzeichnis

Abbildung A.1 Schematische Darstellung der Systemgrenzen des modellierten PEM-Elektrolyseurs (Bareiß u. a. 2019). 3

Abbildung A.2 Schematische Darstellung der Systemgrenzen des Modells zur NT-Elektrolyse..... 5

Abbildung A.3 Schematische Darstellung der Systemgrenzen zur Bereitstellung von Synthesegas über HT-Co-Elektrolyse und das Referenzsystem Dampfreformierung. 9

Abbildung A.4 Schematische Darstellung der Systemgrenzen zur Butanolbereitstellung (ohne Anlagenbau). ... 11

Abbildung A.5 Systemgrenze des untersuchten LOHC Prozesses mit allen betrachteten Komponenten für die Hydrierung, Transport von LOHC und anschließender Dehydrierung von Wasserstoff 5.0 bei 30 bar. Der Wasserstoff wird aus dem Cluster FC-A1 durch einen PEMWE übergeben und geht in die Bewertung mit ein. .. 13

Abbildung A.6 Schematische Darstellung der Systemgrenzen zur Bereitstellung von LNG_HTEL (ohne Anlagenbau)..... 15

Abbildung A.7 Schematische Darstellung der Systemgrenzen zur Bereitstellung von LNG_OxyFuel (ohne Anlagenbau)..... 15

Abbildung A.8 Schematische Darstellung der Systemgrenzen zur Bereitstellung von STF (ohne Anlagenbau). ... 17

Abbildung A.9 Schematische Darstellung der Bereitstellung synthetischen Diesels (FT-Diesel)..... 18

Abbildung A.10 Verschieden OME_x Pfade: etablierte Route OME₁ bis zu OME₃₋₅, Direktoxidation OME₁, direkte Dehydrierung, reduktive Route und Ideale Route. 20

Abbildung A.11 WLTP Zyklussimulationen für OME_x mit verschiedenen Blendraten und fossilen Diesel. Abgasrezirkulation (AGR), Kraftstoffverbrauch, Partikelemissionen (PM) vor Abgasnachbehandlung (AGN), Stickstoffoxidemissionen (NO_x) vor und nach AGR über die Fahrzeuggeschwindigkeit. 23

Abbildung B.1 Vereinfachtes VFB der Hydrierung - ohne Nebenkomponenten..... 30

Abbildung B.2 Verfahrensfleißbild der Dehydrierung 30

Abbildung B.3 Schematische Darstellung des Benchmarkprozess zur Synthese des OME₃₋₅ (ohne Elektrolyse). 36

Tabellenverzeichnis

Tabelle A.1 Semiquantitative Bewertung des Detaillierungsgrades..... 4

Tabelle A.2 Prozessdaten zur Niedertemperatur-Elektrolyse von CO₂; Basis: Produktion von 1,0 kg CO 7

Tabelle A.4 Prozessdaten zur HT-Co-Elektrolyse; Basis: 1 kg Synthesegas 9

Tabelle B.1 Übersicht über die für die techno-ökonomische Analyse zugrunde gelegten Parameter. 25

A. MODELLE UND ANNAHMEN DES LIFE CYCLE ASSESSMENT

1. Wasserstoffbereitstellung über die PEM-Elektrolyse

Autor: Kay Bareiß (TUM)

SYSTEMGRENZEN

Die Anlage des 1 MW PEM-Elektrolyseurs (elektrische Anschlussleistung) wurde auf Inventarbasis abgeschätzt und beinhaltet Stahlkonstruktionselemente, Pumpen und Verrohrung. Das Betonfundament wurde an der TUM berechnet und die Containerausführung durch einen 20 ft Standard Stahlcontainer in Ecoinvent abgebildet. Der PEM-Stack wurde detailliert betrachtet und berücksichtigt:

- Die Verschaltung mehrerer Einzelzellen, getrennt durch Titan Bipolarplatten.
- De-oxo unit (Entfernen von restlichem Sauerstoff durch katalytische Verbrennung mit Wasserstoff zu H_2O).
- Gas purification unit (Aufreinigung des Produktes Trocknungsprozess, adsorption).
- Speichertank (Tagesproduktion)
- De-ionisiertes Wasser

Eine schematische Darstellung der Systemgrenzen ist in Abbildung A.1 zu finden.

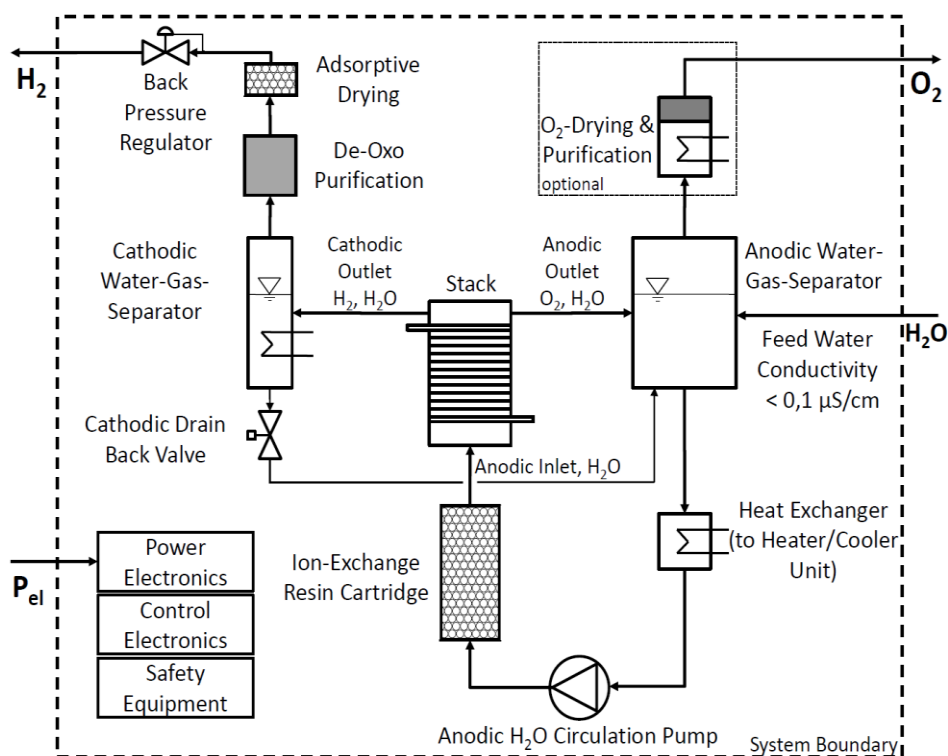


Abbildung A.1 Schematische Darstellung der Systemgrenzen des modellierten PEM-Elektrolyseurs (Bareiß u. a. 2019).

ALLOKATIONSREGELN

Die Produktion von Sauerstoff wird in dieser LCA nicht als wertschöpfender Prozess betrachtet und daher in die Umwelt abgeblasen. Eine Allokation der Prozessströme wird daher nicht vorgenommen.

DATENGRUNDLAGE

Tabelle A.1 gibt eine semiquantitative Übersicht über die Detaillierungsgrades des Modells.

Die Daten zum PEM-Elektrolyseur selbst sind auf Basis gründlicher wissenschaftlicher Literaturrecherche zusammen mit dem ZAE Bayern berechnet und publiziert worden (Barei u. a. 2019). Alle Verwendeten Quellen sind im Literaturanhang der entsprechenden Veroffentlichung zu finden, in der auch weitere Annahmen und Vorgehensweisen genau beschrieben sind. Hintergrunddaten der Prozesse wurden aus Ecoinvent weitestgehend aus globalen Durchschnittswerten {GLO} entnommen. Fur den H₂ Speicher sowie das Prozesswasser wurden folgende Datensatze genutzt:

- Water, deionised, from tap water, at user {RoW}| market for water, deionised, from tap water, at user
- Liquid storage tank, chemicals, organics {RoW}

Tabelle A.1 Semiquantitative Bewertung des Detaillierungsgrades.

Komponenten	Detaillierungsgrad	Qualitat
Stack	Hoch (Inventarliste) / eigene Berechnung der Materialmengen (ZAE Bayern)	++
Aufreinigung	Aus Literatur (Barei 2018; Dowson u. a. 2012)	++
Fundament	Abschatzung TUM Bauingenieurwesen	+
Ausfuhrung	Container 20 ft. standard	+
BOP	Abschatzung (Materialmengen)	+

LITERATUR

Barei, Kay ; Schonleber, Konrad ; Hamacher, Thomas (2018). Szenarien fur den Strom-Mix zukunftiger, flexibler Verbraucher am Beispiel von P2X-Technologien.

Online im Internet: <https://mediatum.ub.tum.de/doc/1436016/530236.pdf> (Zugriff am: 22.05.2018).

Barei, Kay u. a. (2019). Life cycle assessment of hydrogen from proton exchange membrane water electrolysis in future energy systems. In: Applied Energy, 237 (2019), S. 862–872.

Dowson, Mark u. a. (2012). Streamlined life cycle assessment of transparent silica aerogel made by supercritical drying. In: Applied Energy, 97 (2012), S. 396–404.

2. Synthesegasbereitstellung über die NT-Elektrolyse

Autor: Thomas Fröhlich (ifeu)

SYSTEMGRENZEN

Kernprozess ist die Elektrolyse von CO₂ zu CO bei Temperaturen zwischen 40 und 80 °C an Gasdiffusionselektroden. Nebenprodukte der Reaktion sind O₂ und in kleinen Mengen H₂. Die Elektrolysezelle besteht aus einer Iridium-belegten Titan-Anode, einer Gasdiffusionselektrode (GDE, poröser Träger aus Silber und PTFE) als Kathode, getrennt durch eine Nafion-Membran. Als Elektrolyt wird KHCO₃ verwendet. CO₂ wird gasförmig auf der Rückseite der GDE zugegeben, diffundiert durch die GDE und wird an der Kontaktfläche Silber/Elektrolyt reduziert. Das erzeugte CO diffundiert durch die GDE zurück und wird dort abgenommen. An der Kathode (GDE) wird zusätzlich in geringen Mengen H₂ gebildet, dies stellt eine unerwünschte Nebenreaktion dar, weil Energie „verloren“ geht und H₂ möglicherweise die GDE schädigt. Ein typisches Produktgemisch besteht zu 30 Vol.-% aus CO, 5 Vol.-% aus H₂, 65 Vol.-% CO₂ (nicht umgesetztes Edukt).

Als Edukte wurden für die Elektrolyse Strom, Wasser, CO₂ berücksichtigt. Die Stromerzeugung ist entsprechend den gewählten Szenarien zusammengesetzt (vgl. Kapitel 3.1 des Hauptdokumentes).

Die CO₂-Bereitstellung ist durch DAC modelliert, betrieben mit Strom entsprechend dem Szenario und Abwärme ohne Lasten, Investitionsgüter (Bau der Anlage) sind enthalten. Die Wasser-Bereitstellung stammt aus Oberflächenwasser, destilliert.

Es wird angenommen, dass sich die Anlage in direkter Nachbarschaft zu relevanten Industrieanlagen befindet, daher sind keine Transportaufwendungen berücksichtigt.

Die Systemgrenzen berücksichtigten die folgenden Punkte:

- Bau und Betrieb der Anlagen zur CO₂-Abscheidung und zur CO₂-Elektrolyse
- Bereitstellung der elektrischen Energie für die genannten Anlagen einschließlich Infrastruktur und Produktionsmittel
- Bereitstellung der thermischen Energie für die genannten Anlagen
- Förderung und Transport fossiler Energieträger zur Stromerzeugung
- Vorketten sämtlicher Materialien, die in den o.g. Prozessen verwendet werden

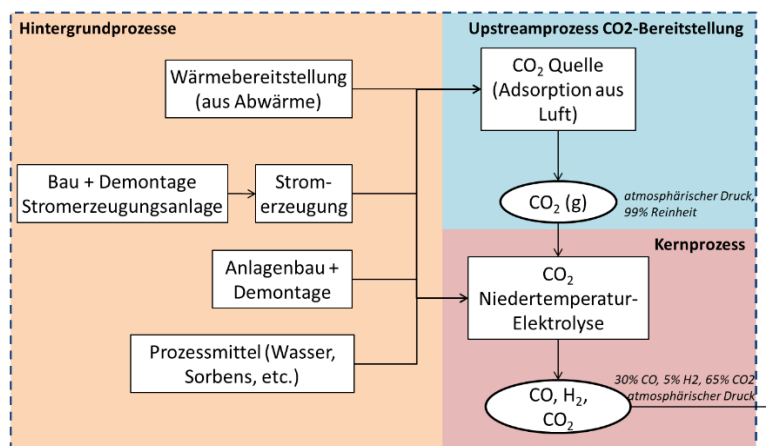


Abbildung A.2 Schematische Darstellung der Systemgrenzen des Modells zur NT-Elektrolyse.

ALLOKATIONSREGELN

Die Ecoinvent Datensätze basieren auf "Allocation, cut-off by classification". Im Allgemeinen wurde die Massenallokation angewandt.

Die Prozessabwärme, die zur CO₂-Bereitstellung genutzt wird wurde lastenfrem modelliert. Im CO₂-Elektrolyseur entstehen neben CO auch H₂ und O₂. Vereinfachend und konservativ wird davon ausgegangen, dass Sauerstoff und Wasserstoff unerwünschte Nebenprodukte sind, deren Erzeugung in der weiteren Entwicklung vermieden werden soll. Als solche werden O₂ und H₂ keine Lasten zugewiesen.

DATENGRUNDLAGE

Die verwendeten Prozessdaten zur CO₂-Elektrolyse sind in Tabelle A.2 dargestellt. Der aktuelle Stand enthält Ergebnisse aus aktuellen Laborversuchen der Technologiepartner. Die mittel- und langfristigen Forschungsziele spiegeln den von den Technologiepartnern erwarteten Fortschritt wieder. Im Wesentlichen wird davon ausgegangen, dass die Elektrolyse-Spannung von aktuell 3.5-4 V auf 2,7-2,9 V (2030) bzw. 2.3-2.5 V gesenkt werden kann. Gleichzeitig steigt der Anteil von CO im Produktgemisch von aktuell 30 Vol.-% auf 40 bzw. 50 Vol.-%.

Die Daten zum Materialbedarf wurden ausgehend von den Arbeiten von (Koj u. a. 2015; Jan Koj u. a. 2017), die eine Anlage zur alkalischen Elektrolyse von Wasser beschreiben in Abstimmung mit den Projektpartnern durchgeführt. Die Abschätzung zum Materialbedarf für einen 6 MW CO₂-Elektrolyseur erfolgte mit den folgenden Annahmen:

- Anode: Nickel wird ersetzt durch Titan mit Verhältnis der Atommassen: Ni: 58,7 g/mol, Ti 47,9 g/mol, Zusätzlich Iridium-Belegung mit 2 mg/cm²; Flächenberechnung aus der Masse der Membran: 1700 kg Nafion mit 500g/m² (250 µm Dicke) ergibt 3400 m², daraus 68 kg Ir (= 0.76 Gew.-%)
- Kathode: Nickel wird ersetzt durch Silber mit Verhältnis der Atommassen: Ni 58,7 g/mol, Ag 107,9 g/mol, Al und CO entfallen weil zur Herstellung von Raney-Nickel verwendet
- Membran: Nafion-Membran statt Zirfon, Annahme: gleiche Dichte
- Flächenbedarf: 1000 m²
- ColdBox nachgeschaltet für reines CO

Tabelle A.2 Prozessdaten zur Niedertemperatur-Elektrolyse von CO₂; Basis: Produktion von 1,0 kg CO

	Stand heute (Laborwerte)	Forschungsziel mittelfristig (2030)	Forschungsziel langfristig (2050)
Input			
Elektrische Energie / kWh	8,43	6,11	5,27
CO ₂ / g	5500	4212	3440
Wasser (demin.) / g	117	53	14
Output			
CO / g	1000	1000	1000
H ₂ / g	12	6	2
O ₂ / g	731	674	639
CO ₂ / g	3763	2475	1702

VERWENDETE ECOINVENT-DATENSÄTZE (AUS ECOINVENT 3.4):

CO₂-Elektrolyseur

- tetrafluoroethylene; market for tetrafluoroethylene [GLO]
- titanium, primary; market for titanium, primary [GLO]
- silver; market for silver [GLO]
- steel, chromium steel 18/8; market for steel, chromium steel 18/8 [GLO]
- acrylonitrile-butadiene-styrene copolymer; market for acrylonitrile-butadiene-styrene copolymer [GLO]
- copper; market for copper [GLO]
- inverter, 500kW; market for inverter, 500kW [GLO]
- graphite; market for graphite [GLO]

Direct Air Capture

- aluminium, cast alloy; market for aluminium, cast alloy [GLO]
- polyethylene, high density, granulate; market for polyethylene, high density, granulate [Euro...]
- chromium steel pipe; market for chromium steel pipe [GLO]
- stone wool, packed; market for stone wool, packed [GLO]
- steel, low-alloyed; market for steel, low-alloyed [GLO]
- copper; market for copper [GLO]
- ethylene glycol, at plant [RER]
- anionic resin; market for anionic resin [GLO]
- concrete, sole plate and foundation; market for concrete, sole plate and foundation [RoW]
- reinforcing steel; market for reinforcing steel [GLO]
- sand; market for sand [GLO]
- gravel, crushed; market for gravel, crushed [RoW]

Stromerzeugung

- electricity, medium voltage; market for electricity, medium voltage [DE]
- electricity, high voltage; electricity production, wind, gr 3MW turbine, onshore [DE]
- electricity, high voltage; electricity production, hydro, reservoir, alpine [NO]
- electricity, low voltage; electricity production, photovoltaic, 570kWp [DE]

- electricity, high voltage; electricity production, natural gas, combined cycle [DE]
- electricity, high voltage; electricity production, hard coal [DE]
- electricity, high voltage; electricity production, lignite [DE]

Referenzprozess (aus GaBi 6.0)

- DE: Synthesegas (H₂: CO = 3: 1) aus Erdgas ts

LITERATUR

Jan Koj, et al. (2017). Site-Dependent Environmental Impacts of Industrial Hydrogen Production by Alkaline Water Electrolysis. In: *Energies*, 10 (2017), 7, S. 860.

Koj, Jan Christian, et al. (2015). Life Cycle Assessment of Improved High Pressure Alkaline Electrolysis. In: *Energy Procedia*, 75 (2015), S. 2871–2877.

3. Synthesegasbereitstellung über die HT-Co-Elektrolyse

Autorin: Petra Zapp (FZJ)

SYSTEMGRENZEN

Die HT-Co-Elektrolyseeinheit ist ein 150 kW_{el}-System. Es wird ein Synthesegas mit dem Verhältnis 2:1 H₂/CO produziert. Die Reinheit des Synthesegases liegt bei 99,7 mol %, mit geringfügigen Spuren von CH₄, CO₂ und Wasser. Der Betrieb ist drucklos und vollständig wärmeintegriert, indem Wärme aus der HT-Co-Elektrolyse zur Dampferzeugung genutzt wird.

Die Modellierung zum Betrieb und Bau der HT-Co-Elektrolyse-Gesamtanlage basiert auf Informationen der Technikentwickler im Forschungscluster A3. Der Elektrolyt der Zelle wird aus Yttrium stabilisierten Zirkoniumdioxid (8YSZ) hergestellt. Die Anode wird aus einem (La,Sr)(Co,Fe)O₃ Perowskit gefertigt. Die Kathode besteht aus einem Nickel Cermet (Ni/8YSZ). Typische Herstellungsverfahren sind Foliengießen, Siebdruck, PVD und Sol-Gel-Verfahren. Für die Interkonnektoren wird ein Crofer 22 APU® Stahl genutzt. Neben den Materialien für die Zellen werden noch Dichtungen und Kontaktschichten berücksichtigt.

Der Referenzprozess entspricht einem kleinen Dampfreformierungsprozess (330 Nm³/h) mit einer Synthesegasproduktion ebenfalls von 2:1 H₂/CO auf Basis von Erdgas. Der Prozess ist so ausgelegt, dass kein Dampf das System verlässt.

Die Systemgrenzen bilden jeweils ein cradle-to-gate System ab. Es werden keine Transportaufwendungen und kein Rückbau berücksichtigt. Abbildung A.3 zeigt schematisch die Inputs und Outputs des HT-Co-Elektrolyse Prozesses sowie des Referenzprozesses. Zusätzlich wird neben den Stoff- und Energieflüsse des Betriebes noch die Herstellung der Anlagen berücksichtigt.

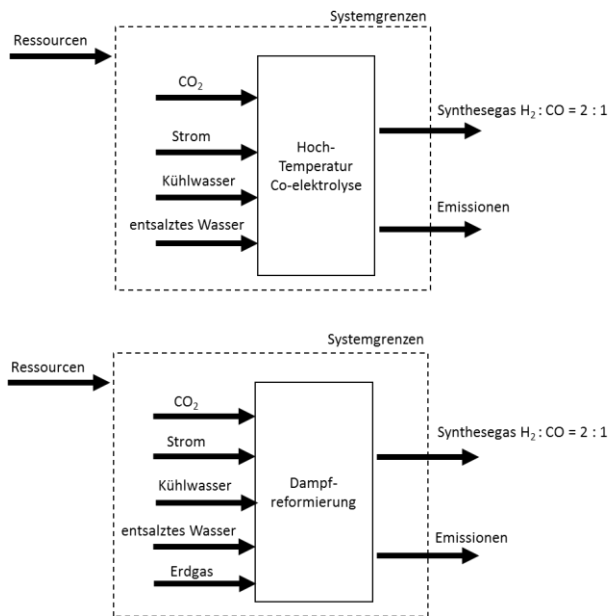


Abbildung A.3 Schematische Darstellung der Systemgrenzen zur Bereitstellung von Synthesegas über HT-Co-Elektrolyse und das Referenzsystem Dampfreformierung.

DATENGRUNDLAGE

In Tabelle A.3 sind die Prozessdaten zur HT-Co-Elektrolyse sowie zum Referenzprozess angegeben. Es sind die wichtigsten Inputs sowie einige ausgewählte Emissionen aufgelistet. Ein weiterer wichtiger Input ist der anteilige Aufwand zum Bau der Anlagen. Dieser variiert in Abhängigkeit der Strommixe, weil dabei jeweils unterschiedliche Betriebsstunden berücksichtigt werden.

Tabelle A.3 Prozessdaten zur HT-Co-Elektrolyse; Basis: 1 kg Synthesegas

	Einheit	HT-Co-Elektrolyse	Steamreformer
Input			
Erdgas	kg	-	0,826
Strom	kWh	8,82	0,23
Entsalztes Wasser	kg	1,13	0,35
CO ₂	kg	1,38	0,33
Output			
Syngas 2:1	kg	1	1
CO ₂	kg	-	1,1
O ₂	kg	1,5	-

Die Daten für den Bau von Zellen/Stack basieren auf hochskalierten Labordaten der Projektpartner. Die existierenden Prozessdaten der Zellproduktion im Labormaßstab wurden dafür auf die Produktion größerer Stückzahlen, nicht aber für eine optimierte Großproduktion hochgerechnet.

Die Ballance of Plant (Stahlkonstruktionen, Pumpen, Rohre, Fundament) wurden ausgehend von (Pehnt 2002; Primas 2007) zu SOFC Brennstoffzellen auf den HT-Co-Elektrolysebetrieb angepasst.

Wie im Hauptdokument der Roadmap in Kapitel 2.2.1 beschrieben, wurden drei unterschiedliche CO₂-Quellen (Stahl, Ammoniaksynthese (NH₃) und die Direktabscheidung aus der Luft (DAC)) berücksichtigt. Dabei wurde jeweils lediglich den Energiebedarf für den Betrieb abgebildet. Die Angaben zum Energiebedarf für die Abscheidung wurden von PtX-Projektpartnern bereitgestellt. Es wurden kein Anlagenbau, -rückbau oder betriebsbedingte Emissionen berücksichtigt.

Die unterschiedlichen Strommixe basieren auf dem Energiemodell, welches im Hauptdokument in Kapitel 10.1 beschrieben ist. Die zur Darstellung der Strommixe benötigten Prozesse der Strombereitstellungen für unterschiedliche Energieträger entstammen ecoinvent.

Der Prozess für die Wasserbereitstellung wurde als „decarbonisiertes Wasser“ aus ecoinvent entnommen, ebenso wie Wärme.

Transportprozesse wurden nicht berücksichtigt.

LITERATUR

Pehnt, Martin (2002). Ganzheitliche Bilanzierung von Brennstoffzellen in der Energie- und Verkehrstechnik. Als Ms. gedr. Düsseldorf: VDI-Verl (= Fortschritt-Berichte VDI Reihe 6, Energietechnik).

Primas, A. (2007). Life Cycle Inventories of new CHP systems. Dubendorf & Zürich: Swiss Centre for Life cycle Inventories: Basler & Hofmann AG.

4. Bereitstellung von Butanol

Autoren: Andreas Patyk (ITAS), Dominik Poncette (ITAS)

SYSTEMGRENZEN

Die hier untersuchte Prozesskette zur 1-Butanolsynthese, Power-to-Liquid (Butanol) besteht aus der Stromerzeugung, der Bereitstellung von CO₂ aus Biogas, der Elektrolyse von CO₂ mit geringer Wasserbeimischung zu Synthesegas und der fermentativen Herstellung von 1-Butanol. Die Anlagenkapazität wird auf 100 kg Butanol/h gesetzt.

Die Systemgrenzen entsprechen den im Hauptbericht festgelegten Grundsätzen. Sie umfassen folgende Prozesse:

- Bereitstellung von CO₂ aus Biogas inkl. Pipelinetransport
- Strombereitstellung
- NT-CO₂-Elektrolyse (Co-Elektrolyse mit geringem Wasseranteil) zu Synthesegas
- Synthesegas-Fermentation zu 1-Butanol
- Bereitstellung von Betriebsstoffen
- Abwasseraufbereitung
- Anlagenbau

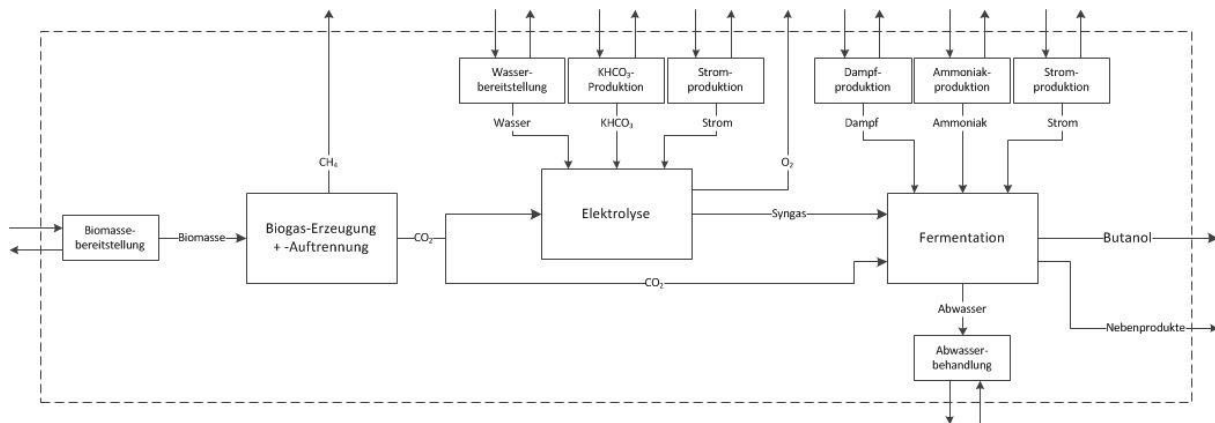


Abbildung A.4 Schematische Darstellung der Systemgrenzen zur Butanolbereitstellung (ohne Anlagenbau).

DATENGRUNDLAGE

Die Datengrundlage für die Energie- und Stoffströme für den Betrieb von Elektrolyseur und Bioreaktoren bilden Informationen der technischen P2X-Partner, ergänzt um Sekundärquellen. Die korrespondierenden Wirkungsgrade bzw. Ausbeuten definieren den Bedarf an Biogas und Strom für die Elektrolyse. Datengrundlagen nach Prozessgruppen:

- Anlagenbau (Elektrolyseur, Fermenter): mit den Partnern abgestimmte Literaturdaten und Schätzungen zu Massen
- Betrieb (Elektrolyseur, Fermenter): Energie- und Stoffströme aus Simulationen und Experimenten der technischen P2X-Partner, ergänzt um Sekundärquellen, vor allem (Brynolf u. a. 2018)
- Hintergrunddaten für Bau und Betrieb (z.B. Strombereitstellung, Materialproduktion): ecoinvent 3.4
- fossile Referenz: ecoinvent 3.4

LIMITIERUNGEN

Wie bereits im Hauptbericht dargelegt, weisen die vorliegenden Daten zu großen Teilen erhebliche Unsicherheiten auf. Für die Hauptprozesse ist dies die Folge des niedrigen TRL der in der Entwicklung befindlichen Technologien (TRL-Einordnung der Entwickler: Elektrolyse und Fermenter: jeweils TRL 4). Für die Hintergrundprozesse (Bereitstellung von Energieträgern, Betriebsstoffen usw.) ist dies dem zeitlichen, geographischen und technologischen Bezug zahlreicher Datensätze geschuldet.

LITERATUR

Brynolf, Selma u. a. (2018). Electrofuels for the transport sector: A review of production costs. In: Renewable and Sustainable Energy Reviews, 81 (2018), S. 1887–1905.

5. Bereitstellung und Nutzung von Wasserstoff über die LOHC-Transporttechnologie

Autor: Kay Bareiß (TUM)

SYSTEMGRENZEN

Wasserstoff aus der PEM-Elektrolyse wird an den Hydrierungsprozess übergeben (geht in Bewertung mit ein). Die Anlagengröße orientiert sich an einem vorgeschalteten 1 MW PEMWE. Neben der energetischen Betrachtung wurden folgende Anlagenkomponenten in der LCA abgebildet:

Hydrierung:

- Reaktor
- Sicherheitsmerkmale
- Pumpen
- 2x 43m³ Speicher für geladenes sowie entladenes LOHC.
- Transport des geladenen LOHCs mithilfe eines Tanklastwagens an den Dehydrierer (200km)

Dehydrierung:

- Reaktor
- Sicherheitsmerkmale
- Pumpen
- 2x 43m³ Speicher
- Transport des entladenen LOHCs mithilfe eines Tanklastwagens an den Hydrierer (200km)

Die Betrachtung einer Tankstelleninfrastruktur wurde als bereits existierend angenommen, da diese mit leichten Anpassungen vom Referenzprozess übernommen werden kann und sich somit kein Mehraufwand ergibt. Für die Nutzungsphase wurde ein Brennstoffzellenfahrzeug aus der Studie (Bauer u. a. 2015) betrachtet.

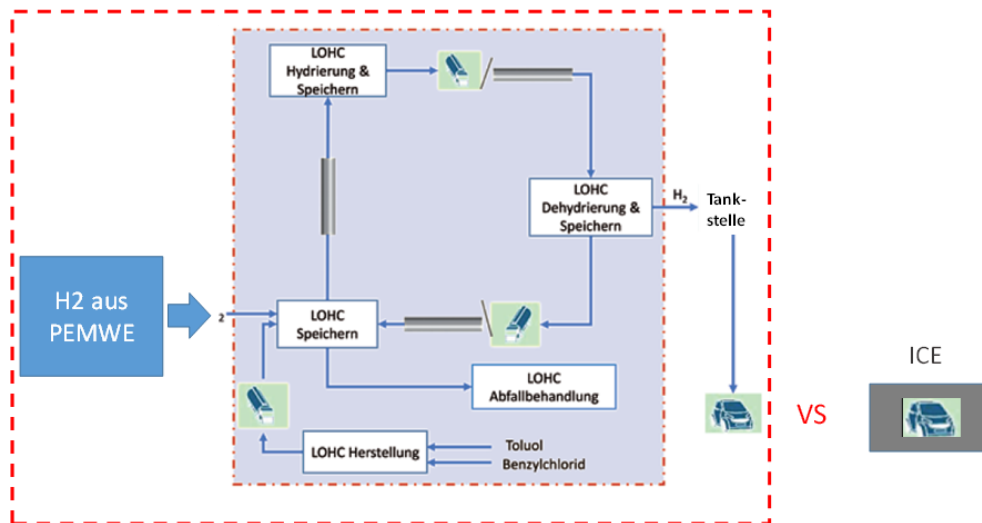


Abbildung A.5 Systemgrenze des untersuchten LOHC Prozesses mit allen betrachteten Komponenten für die Hydrierung, Transport von LOHC und anschließender Dehydrierung von Wasserstoff 5.0 bei 30 bar. Der Wasserstoff wird aus dem Cluster FC-A1 durch einen PEMWE übergeben und geht in die Bewertung mit ein.

Der verwendete Strommix stammt aus dem in Kapitel 3.1 des Hauptdokumentes der Roadmap beschriebenen Strommodell. Die Komponenten der jeweiligen Stromerzeuger stammen aus der ecoinvent Datenbank und somit ist auch die dort hinterlegte Infrastruktur berücksichtigt. Dadurch ergibt sich ein direkter Einfluss über den Wasserstoff des PEM-Elektrolyseurs der als „Rohstoff“ dient. Für die Wärmebereitstellung für die Dehydrierung wird anfangs Erdgas genutzt. Ab dem Jahr 2050 wird auf Strom (P2H) umgestiegen, da die spezifischen CO₂ Emissionen niedriger sind.

ALLOKATIONSREGELN

Die Nutzung der Hydrier-Abwärme wird nicht als nutzbare Energie für weitere Prozesse in dieser LCA genutzt. Diese Nutzung könnte die Ergebnisse natürlich noch verändern, allerdings ist hierfür ein entsprechender Standort nötig.

DATENGRUNDLAGE

Die Daten beruhen auf der Inventarbasis von Hydrogenious Technologies GmbH und der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU).

LITERATUR

Bauer, Christian u. a. (2015). The environmental performance of current and future passenger vehicles: Life cycle assessment based on a novel scenario analysis framework. In: Applied Energy, 157 (2015), S. 871–883.

6. Bereitstellung und Nutzung von LNG_HTEL und LNG_OxyFuel

Autoren: *Andreas Patyk (ITAS), Dominik Poncette (ITAS)*

SYSTEMGRENZEN

Die Bereitstellung und Nutzung von LNG wird in zwei Varianten untersucht: (1) LNG_HTEL: HT-Wasserelektrolyse und Methanisierung von CO₂ aus Biogas; (2) LNG_OxyFuel: OxyFuel-Verbrennung von Biomasse, HT-Co-Elektrolyse und Methanisierung des Synthesegases. Weitere Komponenten der Prozessketten sind die Strombereitstellung, die Biomasse- bzw. CO₂-Bereitstellung und die Verflüssigung des LNG sowie dessen Nutzung in Pkw (erweiterte Auswertung). Die Anlagenkapazität wird auf 70 kg/h gesetzt (1 MW Outputleistung).

Die Systemgrenzen entsprechen den im Hauptbericht festgelegten Grundsätzen. Sie umfassen folgende Prozesse:

LNG_HTEL - Methanisierung von CO₂

- Bereitstellung von CO₂ aus Biogas inkl. Pipelinetransport
- Strombereitstellung
- HT-Wasserelektrolyse
- Methanisierung von CO₂
- Verflüssigung
- Lkw-Transport zur Vertankung an Pkw
- Bereitstellung von Betriebsstoffen
- Abwasseraufbereitung
- Anlagenbau (ggf. inkl. Pkw-Bau)
- (Nutzung)

LNG_OxyFuel - Methanisierung von Synthesegas

- Bereitstellung von CO₂ aus dem OxyFuel-Prozess inkl. Biomassebereitstellung
- Strombereitstellung
- HT-Co-Elektrolyse
- Methanisierung von Synthesegas
- Verflüssigung
- Lkw-Transport zur Vertankung an Pkw
- Bereitstellung von Betriebsstoffen
- Abwasseraufbereitung
- Anlagenbau (ggf. inkl. Pkw-Bau)
- (Nutzung)

Die Wirkungsgrade der einzelnen Prozessschritte sind stark von der angenommenen Verschaltung und von der Berechnungsweise abhängig. Sie liegen in folgenden Bereichen (jeweils mit/ohne Gutschrift oder Belastung durch interne Ströme): LNG_HTEL: Elektrolyse um 68% bzw. 79%, Methanisierung um 88% bzw. 68%, Verflüssigung um 88%; LNG_OxyFuel: Elektrolyse um 80%, Methanisierung um 80% bzw. 60%, Verflüssigung um 88%.

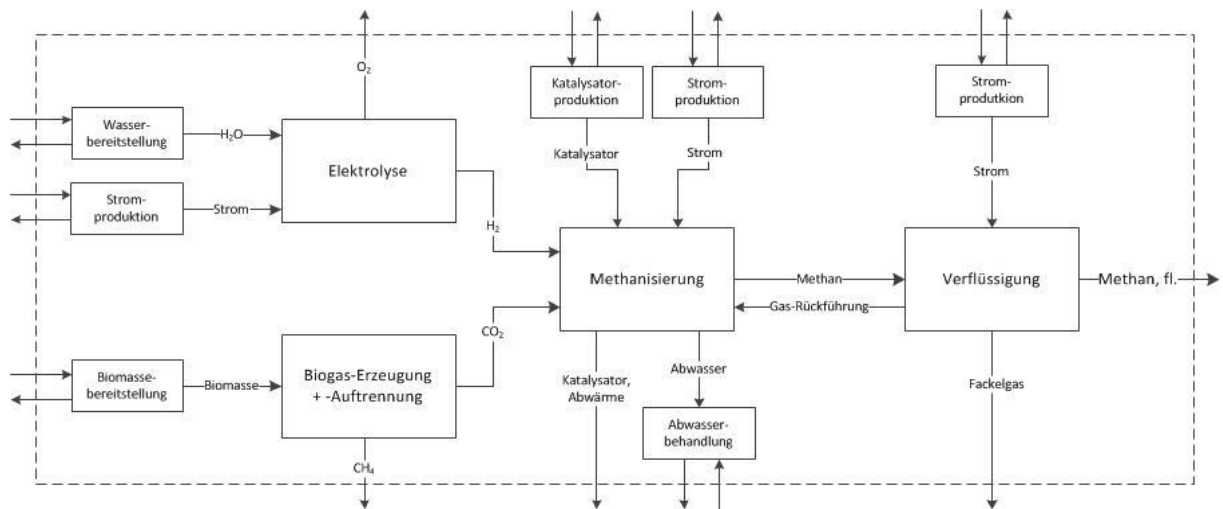


Abbildung A.6 Schematische Darstellung der Systemgrenzen zur Bereitstellung von LNG_HTEL (ohne Anlagenbau).

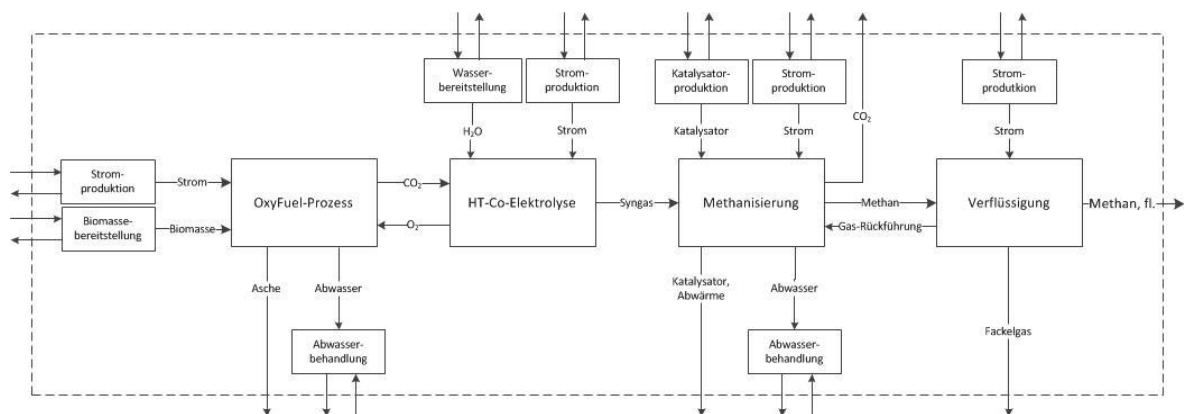


Abbildung A.7 Schematische Darstellung der Systemgrenzen zur Bereitstellung von LNG_OxyFuel (ohne Anlagenbau).

DATENGRUNDLAGE

Die Datengrundlage für die Energie- und Stoffströme für den Betrieb von Elektrolyseuren, Methanisierern und Verflüssigern bilden Informationen der technischen P2X-Partner, ergänzt um Sekundärquellen. Die korrespondierenden Wirkungsgrade bzw. Ausbeuten definieren den Bedarf an Biogas bzw. Biomasse und Strom für die Elektrolyse. Datengrundlagen nach Prozessgruppen:

- Anlagenbau (OxyFuel-Brenner, Elektrolyseur, Methanisierer, Verflüssiger): mit den Partnern abgestimmte Literaturdaten und Schätzungen zu Apparatemassen
- Betrieb (siehe oben): Energie- und Stoffströme aus Simulationen und Experimenten der technischen P2X-Partner, ergänzt um Sekundärquellen, vor allem (Brynnolf u. a. 2018)
- Nutzung: Pkw-Bau und -Betrieb Audi AG und ecoinvent 3.4
- Hintergrunddaten für Bau und Betrieb (z.B. Strombereitstellung, Materialproduktion): ecoinvent 3.4
- fossile Referenz: ecoinvent 3.4

LIMITIERUNGEN

Wie bereits im Hauptbericht dargelegt, weisen die vorliegenden Daten zu großen Teilen erhebliche Unsicherheiten auf. Für die Hauptprozesse ist dies die Folge des niedrigen TRL der in der Entwicklung befindlichen Technologien (TRL-Einordnung der Entwickler: OxyFuel-Verbrennung: TRL 4 (ZSW), Hochtemperaturelektrolyse: TRL 7, Blasensäulenmethanisierung: TRL 5, Methanisierung mit mikrostrukturiertem Reaktor: TRL 4, Verflüssigung: TRL 9 (KIT EBI)). Für die Hintergrundprozesse (Bereitstellung von Energieträgern, Betriebsstoffen usw.) ist dies dem zeitlichen, geographischen und technologischen Bezug zahlreicher Datensätze geschuldet.

LITERATUR

Byrnolf, Selma u. a. (2018). Electrofuels for the transport sector: A review of production costs. In: Renewable and Sustainable Energy Reviews, 81 (2018), S. 1887–1905.

7. Bereitstellung und Nutzung von STF

Autoren: Andreas Patyk (ITAS), Dominik Poncette (ITAS)

SYSTEMGRENZEN

Die hier untersuchte Prozesskette zur Ottokraftstoff-Bereitstellung besteht aus der Stromerzeugung, der Bereitstellung von CO₂ aus Biogas, der Elektrolyse, Methanolsynthese und Benzinsynthese sowie dessen Nutzung in Pkw (erweiterte Auswertung). Die Anlagenkapazität wird auf 90 kg Ottokraftstoff/h gesetzt (1 MW Outputleistung).

Die Systemgrenzen entsprechen den im Hauptbericht festgelegten Grundsätzen. Sie umfassen folgende Prozesse:

- Bereitstellung von CO₂ aus Biogas
- Strombereitstellung
- NT-Wasserelektrolyse
- Methanolsynthese aus CO₂
- MTG-Benzinsynthese
- Lkw-Transport und Vertankung an Pkw
- Nutzung in Otto-Pkw
- Bereitstellung von Betriebsstoffen
- Abwasseraufbereitung
- Anlagenbau (ggf. inkl. Pkw-Bau)
- (Nutzung)

Die Wirkungsgrade der einzelnen Prozessschritte sind stark von der angenommenen Verschaltung und von der Berechnungsweise abhängig. Sie liegen in folgenden Bereichen: Elektrolyse um 66%, Methanolsynthese um 72%, Benzinsynthese um 88%.

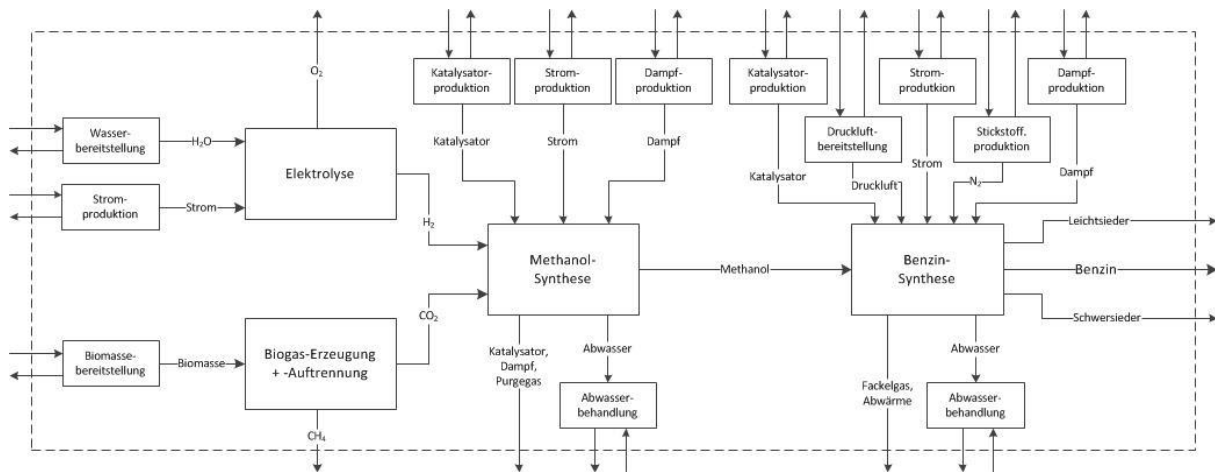


Abbildung A.8 Schematische Darstellung der Systemgrenzen zur Bereitstellung von STF (ohne Anlagenbau).

DATENGRUNDLAGE

Die Datengrundlage für die Energie- und Stoffströme für den Betrieb von Elektrolyseure und Reaktoren bilden Informationen der technischen P2X-Partner, ergänzt um Sekundärquellen. Die korrespondierenden Wirkungsgrade bzw. Ausbeuten definieren den Bedarf an Biogas und Strom für die Elektrolyse. Datengrundlagen nach Prozessgruppen:

- Anlagenbau (Elektrolyseur, Methanol- und MTG-Reaktor): mit den Partnern abgestimmte Literaturdaten und Schätzungen zu Massen
- Betrieb (siehe oben): Energie- und Stoffströme aus Simulationen und Experimenten der technischen P2X-Partner, ergänzt um Sekundärquellen, vor allem (Brynolf u. a. 2018)
- Nutzung: Pkw-Bau und -Betrieb Audi AG und ecoinvent 3.4
- Hintergrunddaten für Bau und Betrieb (z.B. Strombereitstellung, Materialproduktion): ecoinvent 3.4
- fossile Referenz: ecoinvent 3.4

LIMITIERUNGEN

Wie bereits im Hauptbericht dargelegt, weisen die vorliegenden Daten zu großen Teilen erhebliche Unsicherheiten auf. Für die Hauptprozesse ist dies die Folge des niedrigen TRL der in der Entwicklung befindlichen Technologien (TRL-Einordnung der Entwickler: Methanolsynthese: klassisch aus CO und H_2 : TRL 9 (TUBAF), aus CO_2 und H_2 : TRL 8 (externer Verfahrensanbieter), STF-Benzinsynthese der CAC: TRL 5 in P2X, im Rahmen des Projektes 3-Mobility mit neuem Reaktor in Großversuchsanlage inzwischen TRL 7). Für die Hintergrundprozesse (Bereitstellung von Energieträgern, Betriebsstoffen usw.) ist dies dem zeitlichen, geographischen und technologischen Bezug zahlreicher Datensätze geschuldet.

LITERATUR

Brynolf, Selma u. a. (2018). Electrofuels for the transport sector: A review of production costs. In: Renewable and Sustainable Energy Reviews, 81 (2018), S. 1887–1905.

8. Bereitstellung und Nutzung von FT-Diesel

Autorin: Susanne Forster (Audi)

SYSTEMGRENZEN

Die Wertschöpfungskette umfasst die Direct Air Capture (DAC), solid oxide electrolyzer (SOEC) und Fischer-Tropsch-Synthese (FT-Synthese) zur Bereitstellung von synthetischem Diesel. Es handelt sich dabei um ein dezentrales Anlagenkonzept mit einem Wirkungsgrad von 57% (LHV). Der bewertete Fall der Roadmap 2.0 stellt ein gegenüber der Roadmap 1.0 angepasstes Zukunftsszenario dar, welches auf Basis der Projektergebnisse erreichbar ist. Dadurch haben sich leichte Änderungen im Wärmemanagement ergeben, was dazu führt, dass die Anlage nicht mehr zu 100 % autark betrieben werden kann. Ein kleiner Teil des Wärmebedarfs der DAC muss von extern zugeführt werden – angenommen wird hierbei, dass diese Wärme aus reg. Quellen stammt – hier aus Biogas.

Da es sich um eine dezentrale Anlage handelt, die fast autark arbeitet, sind alle nötigen Prozessschritte (bis auf die oben beschriebene zusätzliche Wärmezufuhr für die DAC) bereits in der Anlage vereint, sodass keine Transporte nötig sind. Es werden lediglich Logistikaufwendungen für das fertige Produkt (Diesel) angenommen: LKW-Transport zur Tankstelle mit einer mittleren Transportdistanz von 50 km.

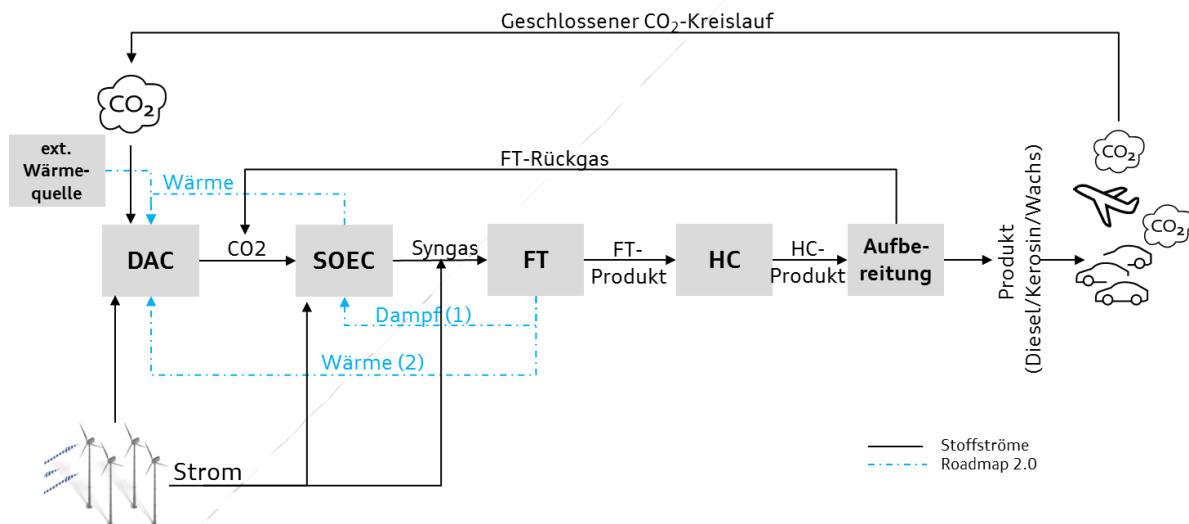


Abbildung A.9 Schematische Darstellung der Bereitstellung synthetischen Diesels (FT-Diesel).

DATENGRUNDLAGE

Die meisten Datensätze stammen aus der ecoinvent Datenbank v 3.5, in Einzelfällen wurden Daten aus GaBi 8 entnommen, wenn sie in ecoinvent nicht verfügbar waren. Die Energie- und Stoffströme basieren auf Simulationsdaten der Technologiepartner für eine 1 MW-Anlage

Materialaufwendungen für den Anlagenbau basieren auf Schätzungen der Technologiepartner.

Fahrzeugdaten basieren auf Daten von Volkswagen, basierend auf einer realen Werkstoffzusammensetzung eines Mittelklassefahrzeugs (VW Golf).

Daten zur Modellierung der Fahrzeugnutzung schließen direkte Emissionen ein und basieren auf Simulationsdaten.

Die Logistik wurde auf Basis von Annahmen aus dem Projekt modelliert.

9. Bereitstellung von Nutzung von OME

Autoren: Sarah Deutz (LTT), Cornelia Merz (Öko-Institut), Jürgen Sutter (Öko-Institut)

SYSTEMGRENZEN

Die Prozesskette der OME_x-Produktion umfasst die CO₂-Bereitstellung über DAC, Wasserstoffbereitstellung über die PEM-Elektrolyse und die Synthese der OME_x, entsprechend der in Abbildung A.10 dargestellten Verfahrensrouten.

Anlagenbau und Betrieb sind jeweils für die DAC und PEM berücksichtigt, für OME_x wird jedoch nur der Betrieb modelliert, da keine Daten für die Modellierung des Anlagenbaus zur Verfügung stehen. End of Life (Recycling und Entsorgung) sind grundsätzlich nicht berücksichtigt. Die Lebensdauer der Anlagen ist jeweils konstant, die Betriebsstunden variieren je nach Szenario (vgl. Kapitel 3.1 des Hauptdokumentes der Roadmap). Für die Wärmebereitstellung wurden je nach Szenario unterschiedliche Annahmen getroffen:

- Für zukünftige Szenarien wurde eine Wärmepumpe bis 105°C angenommen mit einer Leistungszahl (COP) von ca. 2,5-2,8, was heute technisch möglich und für größere Systeme bereits gezeigt wurde (Averfalk u. a. 2017; David u. a. 2017).
- Für das Szenario mit heutigem Netzstrom wurde Erdgas angenommen.
- Für das remote Szenario in Norwegen wurde eine direkte Elektrifizierung angenommen.

Die Fahrzeugdaten wurden von Audi zur Verfügung gestellt und umfassen die Herstellung. Emissionen aus der Fahrzeugnutzung entsprechen der EURO6-Norm für Diesel, die für OME_x gemäß durchgeführten Messungen bei 50% der NO_x-EURO6 Emissionen liegen, während PM2.5 nicht emittiert wird (siehe Fahrzeugnutzung VKA-RWTH).

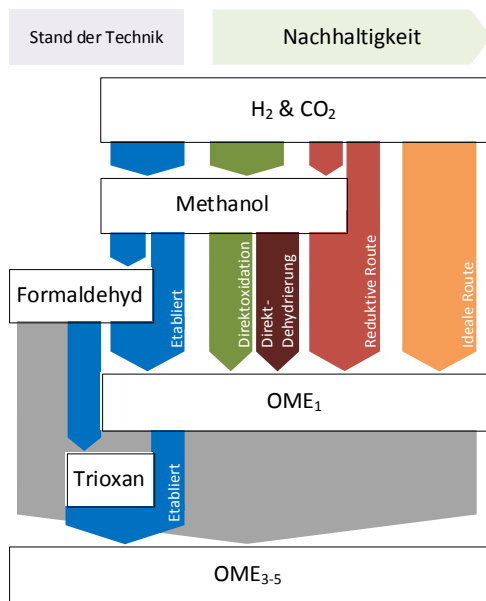


Abbildung A.10 Verschieden OME_x Pfade: etablierte Route OME₁ bis zu OME₃₋₅, Direktoxidation OME₁, direkte Dehydrierung, reduktive Route und Ideale Route.

DATENGRUNDLAGE DER OME_x-SYNTHESEROUTEN

- **Etablierte Route** technologischer Benchmark OME₁:
 - H₂+CO₂ --> MeOH, heterogen katalysiert, Gasphase (z.B. (Pontzen u. a. 2011); TRL6-8])
 - MeOH über partielle Oxidation zu FA(aq) in Gasphase, dann Gaswäsche ((Reuss u. a. 2012); TRL 9])
 - energetisch ungünstig, da wertvolles H₂ wieder oxidiert wird
 - Alternative: MeOH --> FA über direkte Dehydrierung; existiert, aber sehr niedriger TRL (3-4); kürzlich auch als Alternative für OME-Herstellung vorgeschlagen ((Ouda u. a. 2018)
 - MeOH+FA(aq) --> OME₁ in Flüssigphase, dann destillative Trennung ((Weidert u. a. 2017); dieses Konzept TRL 5-6, ähnliche Prozesskonzepte TRL 8-9)
- **Etablierte Route OME₃₋₅ Kettenverlängerung:**
- wässrig vs. wasserfreie Herstellung
 - Vorteil wasserfrei: viel einfachere Produktaufbereitung; technologischer Benchmark für wasserfreie Herstellung: s.o., dann
 - FA(aq) --> Trioxan (Grützner u. a. 2007)
 - OME₁ + Trioxan --> OME₃₋₅ (Burger ; Ströfer ; Hasse 2013)
 - Vorteil wässrige Route: weniger Prozessschritte, aber komplexere Aufreinigung und geringe Selektivität zu OME₃₋₅; typischer Ablauf: MeOH + FA(aq) --> OME₃₋₅
 - Trioxan attraktiv da wasserfrei, Aber: energieaufwändige Herstellung
 - Alternativen wie pFA oder FA wünschenswert --> werden untersucht
- **Direktoxidation** (Fu ; Shen 2007)
 - MeOH --> OME₁ direkt in der Gasphase (FA in-situ)
 - Vorteile:
 - weniger Prozessschritte --> weniger Investitionskosten
 - engere Integration --> ggf. energetisch günstiger
 - keine Wasserzugabe wie bei Formalinherstellung --> weniger Trennaufwand
 - Gasphase --> schneller
 - ggf. höhere Selektivität zu OME₁ möglich als im kombinierten Prozess über FA(aq)
 - Nachteile:
 - weiter oxidativ (gleiche Gesamtstöchiometrie)

- **Reduktive Route** (Thenert u. a. 2016; Schieweck ; Klankermayer 2017; Deutz u. a. 2018):
 - $\text{MeOH} + \text{H}_2 + \text{CO}_2 \rightarrow \text{OME}_1$ direkt, homogen katalysiert
 - Nach vollständiger Wärmeintegration benötigter Wärmebedarf mit Temperaturniveau bei 105 °C
 - Vorteile:
 - weniger Prozessschritte --> weniger Investitionskosten
 - engere Integration --> ggf. energetisch günstiger
 - rein reduktiv --> bessere Gesamtstöchiometrie
 - keine Wasserzugabe wie bei Formalinherstellung --> weniger Trennaufwand
 - Nachteile:
 - bisher geringer Umsatz --> viel MeOH abzutrennen
- **Direkte Dehydrierung** ((Wu ; Li ; Zhao 2018): nicht bilanziert)
 - $\text{MeOH} \rightarrow \text{OME}_1 + \text{H}_2$
 - Vorteile:
 - weniger Prozessschritte --> weniger Investitionskosten
 - engere Integration --> ggf. energetisch günstiger
 - rein reduktiv --> bessere Gesamtstöchiometrie falls H₂ rezykliert wird
 - keine Wasserzugabe wie bei Formalinherstellung --> weniger Trennaufwand
 - Nachteile:
 - sehr früher Entwicklungsstand
- Ideale Route (nicht bilanziert)

PROZESSTECHNISCHE DATENGRUNDLAGE

- niedriger TRL: experimentell bestimmte Umsätze (soweit verfügbar, sonst Stöchiometrie) + Shortcut-Methoden (Bausa ; Watzdorf ; Marquardt 1998)
- höhere TRL: detaillierte Modellierung in AspenPlus mit Kinetik & komplexen Stoffmodellen aus Literatur + Wärmeintegration
- Nach vollständiger Wärmeintegration Temperaturniveau des benötigten Wärmebedarfs
 - OME_1 etablierte Route: 92 °C → COP: 2,85
 - OME_1 Direktoxidation: kein Wärmebedarf, Kühlbedarf im Prozessstrom
 - OME_1 reduktive Route: 105 °C → COP: 2,52
 - OME_{3-5} : 127 °C → über Strom
- Annahme: Wärmepumpe bis 120 °C ausgehend von Umgebungstemperatur 15 °C
- Abschätzung Effizienzen OME_1 :
 - OME_1 etablierte Route: 74%
 - OME_1 Direktoxidation: 79%
 - OME_1 Reduktive Route: 88%
 - OME_1 Direkte Dehydrierung: (97% nur basierend auf Stöchiometrie; entspricht reduktiver Route)
- OME_1 -Herstellung mit recht guter Effizienz jetzt schon möglich, aber niedriger als andere e-fuels wie CH₄, MeOH, oder DME
- neue Routen haben Potential, OME_1 auch bezüglich Herstellung konkurrenzfähig zu machen
- Abschätzung Effizienzen OME_{3-5} :
 - OME_{3-5} über OME_{3-5} Benchmark + Trioxan: 54%
 - OME_{3-5} über neue OME_1 -Routen + Trioxan: bis zu 57% (für reduktive)
- neue OME_1 -Routen bringen Verbesserung für OME_{3-5} , aber moderat
- andere Art der Kettenverlängerung wünschenswert
- Haupt-Verluste der bestehenden Ketten:
 - Akkumulation von Verlusten über Kette --> direktere Synthesewege & integriertere Prozesse bevorzugen
 - Oxidative FA-Herstellung --> rein reduktive Schritte bevorzugen

- hoher Trennaufwand bei Trioxanherstellung --> Trioxan vermeiden
- hoher Energieaufwand für Wasserabtrennung --> alternative Trennkonzeppte finden (z.B. Adsorption, Membranen, ...)

Nutzung im Fahrzeug

- Voruntersuchungen → Emissionsreduktion unabhängig von OME_x (1 < x < 3-5) Kettenlänge (Omari u. a. 2019)
- Untersuchung des Schadstoffminderungspotentials von OME_x und OME_x-Diesel Blends mit verschiedenen Blendingraten gegenüber Diesel am Einzylinder-Forschungsmotor
- Basierend auf den Messdaten des Einzylinder-Forschungsmotor → Zyklussimulationen (WLTP Zyklus) → gesamte Spektrum der motorseitigen Emissionen zu charakterisieren
- Szenario → C-Segment Diesel-Fahrzeug
- Motorkalibrierung gemäß OME_x-Diesel Blends angepasst → emissionsvorteile bestmöglich auszunutzen
- Motorhardware keine Änderungen → entspricht einem typischen EU6d Diesel Motor (Einstufiger Abgasturbolader, ND+HD AGR Strecke, Oxidationskatalysator, Diesel Partikelfilter und NO_x-Abgasnachbehandlung mittels SCR)
- Abbildung A.11 zeigt: WLTP Zyklussimulationen für OME_x mit verschiedenen Blendraten und fossilen Diesel. Abgasrezirkulation (AGR), Kraftstoffverbrauch, Partikelemissionen (PM) vor Abgasnachbehandlung (AGN), Stickstoffoxidemissionen (NO_x) vor und nach AGR über die Fahrzeuggeschwindigkeit
- Ergebnisse:
 - PM Emissionen abhängig von der Blendingrate → je mehr OME_x desto weniger PM Emissionen → aber schon mit geringeren Mengen OME_x vergleichsweise hohes Einsparpotential
 - Reduzierte PM Emissionen ermöglichen erhöhte AGR → Reduktion der NO_x-Emissionen
 - NO_x-Reduktion begrenzt bei ca. 10mg/km (NO_x nach AGN) → bedingt durch bau- und verbrennungstechnische AGR Limitierungen (gegebenes ladedruck Niveau, Turbolader bedingte AGR Limitierung und limitiertes luft-kraftstoff Verhältnis ($\lambda > 1.1$))
 - In Abhängigkeit der Blendingrate können die PM und NO_x Emissionen nach Abgasnachbehandlung um ca. 53-96% bzw. 8-84% im Vergleich zu fossilem Diesel reduziert werden
- In der LCA werden nur reine OME_x Kraftstoffe berücksichtigt → Annahme der Emissionen PM_{2.5} 100% und für NO_x eine Reduktion 50% des aktuellen Grenzwerts, da dies Optimum zwischen Kraftstoffverbrauch und Emissionsreduktion
- Transitionsfad des Energiesystems → Verfügbarkeit EE → zunächst Blends bis hin zur vollständigen Substitution
- Voruntersuchungen → Emissionsreduktion unabhängig von OME_x (1 < x < 3-5) Kettenlänge (Omari u. a. 2019)
- Untersuchung des Schadstoffminderungspotentials von OME_x und OME_x-Diesel Blends mit verschiedenen Blendingraten gegenüber Diesel am Einzylinder-Forschungsmotor
- Basierend auf den Messdaten des Einzylinder-Forschungsmotor → Zyklussimulationen (WLTP Zyklus) → gesamte Spektrum der motorseitigen Emissionen zu charakterisieren
- Szenario → C-Segment Diesel-Fahrzeug
- Motorkalibrierung gemäß OME_x-Diesel Blends angepasst → emissionsvorteile bestmöglich auszunutzen
- Motorhardware keine Änderungen → entspricht einem typischen EU6d Diesel Motor (Einstufiger Abgasturbolader, ND+HD AGR Strecke, Oxidationskatalysator, Diesel Partikelfilter und NO_x-Abgasnachbehandlung mittels SCR)
- Abbildung A.11 zeigt: WLTP Zyklussimulationen für OME_x mit verschiedenen Blendraten und fossilen Diesel. Abgasrezirkulation (AGR), Kraftstoffverbrauch, Partikelemissionen (PM) vor

Abgasnachbehandlung (AGN), Stickstoffoxidemissionen (NO_x) vor und nach AGN über die Fahrzeuggeschwindigkeit

- Ergebnisse:
 - PM Emissionen abhängig von der Blendingrate → je mehr OMEX desto weniger PM Emissionen → aber schon mit geringeren Mengen OMEX vergleichsweise hohes Einsparpotential
 - Reduzierte PM Emissionen ermöglichen erhöhte AGR → Reduktion der NO_x-Emissionen
 - NO_x-Reduktion begrenzt bei ca. 10mg/km (NO_x nach AGN) → bedingt durch bau- und verbrennungstechnische AGR Limitierungen (gegebenes ladedruck Niveau, Turbolader bedingte AGR Limitierung und limitiertes luft-kraftstoff Verhältnis ($\lambda > 1.1$))
 - In Abhängigkeit der Blendingrate können die PM und NO_x Emissionen nach Abgasnachbehandlung um ca. 53-96% bzw. 8-84% im Vergleich zu fossilem Diesel reduziert werden
- In der LCA werden nur reine OMEX Kraftstoffe berücksichtigt → Annahme der Emissionen PM_{2.5} 100% und für NO_x eine Reduktion 50% des aktuellen Grenzwerts, da dies Optimum zwischen Kraftstoffverbrauch und Emissionsreduktion
- Transitionsfad des Energiesystems → Verfügbarkeit EE → zunächst Blends bis hin zur vollständigen Substitution

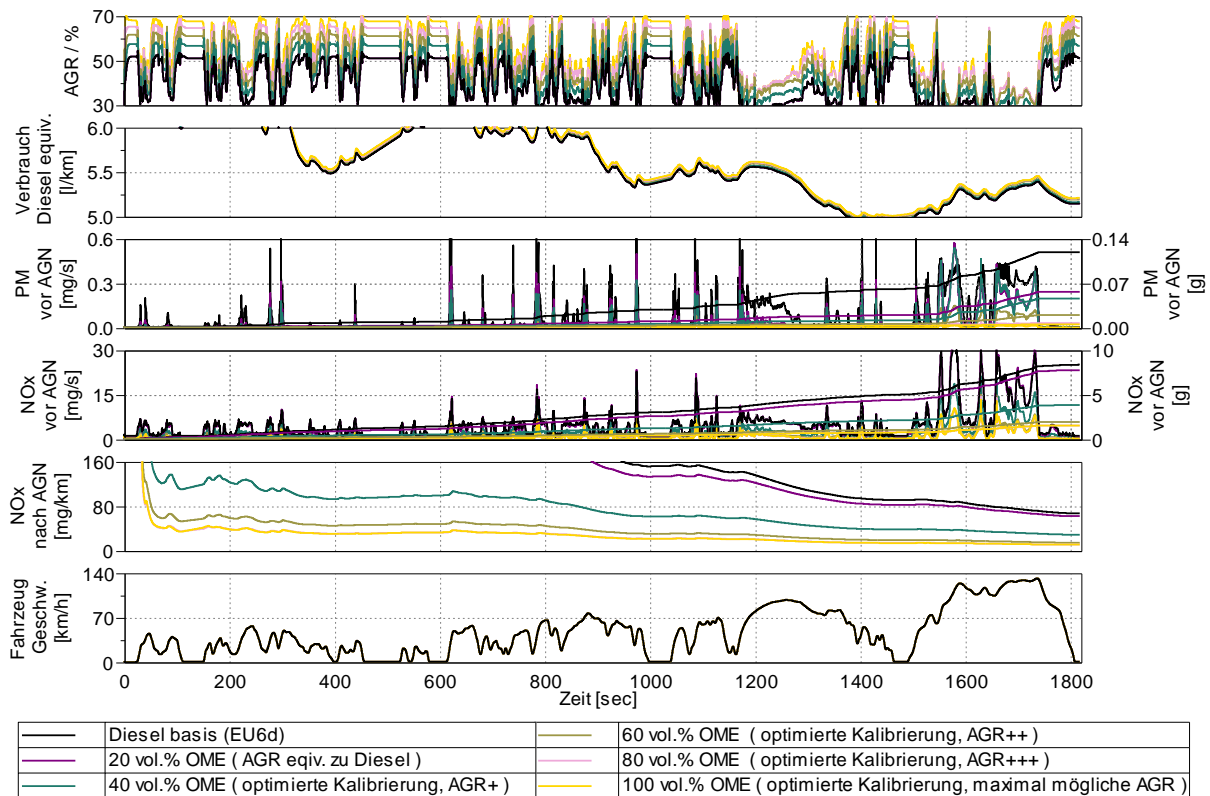


Abbildung A.11 WLTP Zyklussimulationen für OME_x mit verschiedenen Blendraten und fossilem Diesel. Abgasrezirkulation (AGR), Kraftstoffverbrauch, Partikelemissionen (PM) vor Abgasnachbehandlung (AGN), Stickstoffoxidemissionen (NO_x) vor und nach AGN über die Fahrzeuggeschwindigkeit.

LITERATUR

Averfalk, Helge u. a. (2017). Large heat pumps in Swedish district heating systems. In: Renewable and Sustainable Energy Reviews, 79 (2017), S. 1275–1284.

Bausa, Jürgen ; Watzdorf, von, Rüdiger ; Marquardt, Wolfgang (1998). Shortcut methods for nonideal multicomponent distillation: I. Simple columns. In: AIChE Journal, 44 (1998), 10, S. 2181–2198.

- Burger, Jakob ; Ströfer, Eckhard ; Hasse, Hans (2013). Production process for diesel fuel components poly(oxymethylene) dimethyl ethers from methane-based products by hierarchical optimization with varying model depth. In: *Chemical Engineering Research and Design*, 91 (2013), 12, S. 2648–2662.
- David, Andrei u. a. (2017). Heat Roadmap Europe: Large-Scale Electric Heat Pumps in District Heating Systems. In: *Energies*, 10 (2017), 4, S. 578.
- Fu, Yuchuan ; Shen, Jianyi (2007). Selective oxidation of methanol to dimethoxymethane under mild conditions over V₂O₅/TiO₂ with enhanced surface acidity. In: *Chemical Communications*, (2007), 21, S. 2172.
- Grützner, Thomas u. a. (2007). Development of a new industrial process for trioxane production. In: *Chemical Engineering Science*, 62 (2007), 18–20, S. 5613–5620.
- Omari, Ahmad u. a. (2019). Potential of long-chain oxymethylene ether and oxymethylene ether-diesel blends for ultra-low emission engines. In: *Applied Energy*, 239 (2019), S. 1242–1249.
- Ouda, Mohamed u. a. (2018). A hybrid description and evaluation of oxymethylene dimethyl ethers synthesis based on the endothermic dehydrogenation of methanol. In: *Reaction Chemistry & Engineering*, 3 (2018), 5, S. 676–695.
- Pontzen, Florian u. a. (2011). CO₂-based methanol and DME – Efficient technologies for industrial scale production. In: *Catalysis Today*, 171 (2011), 1, S. 242–250.
- Reuß, M. u. a. (2017). Seasonal storage and alternative carriers: A flexible hydrogen supply chain model. In: *Applied Energy*, 200 (2017), S. 290–302.
- Schieweck, Benjamin G. ; Klankermayer, Jürgen (2017). Tailor-made Molecular Cobalt Catalyst System for the Selective Transformation of Carbon Dioxide to Dialkoxymethane Ethers. In: *Angewandte Chemie International Edition*, 56 (2017), 36, S. 10854–10857.
- Thenert, Katharina u. a. (2016). Ruthenium-Catalyzed Synthesis of Dialkoxymethane Ethers Utilizing Carbon Dioxide and Molecular Hydrogen. In: *Angewandte Chemie International Edition*, 55 (2016), 40, S. 12266–12269.
- Weidert, Jan-Oliver u. a. (2017). Development of an Integrated Reaction–Distillation Process for the Production of Methylal. In: *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 56 (2017), 2, S. 575–582.
- Wu, Liubi ; Li, Bolong ; Zhao, Chen (2018). Direct Synthesis of Hydrogen and Dimethoxymethane from Methanol on Copper/Silica Catalysts with Optimal Cu⁺/Cu⁰ Sites. In: *ChemCatChem*, 10 (2018), 5, S. 1140–1147.

B. ANNAHMEN DER TECHNO-ÖKONOMISCHEN ANALYSE

Autoren: Andreas Patyk (ITAS), Dominik Poncette (ITAS), Moritz Raab (DLR), Nils Tenhumberg (tkIS)

Tabelle B.1: Übersicht über die für die techno-ökonomische Analyse zugrunde gelegten Parameter.

Parameter	Wert	Einheit	zeit-abhängig	Quelle
CEPCI - 2017	566,1		ja	Link
CEPCI - 2030	721,2		ja	Link
CEPCI - 2050	912,7		ja	Link
Brennstoffpreis (Gas)	0,1	€/m ³	nein	
Wechselkurs 1 € in x NK	9,55		nein	Link
Wechselkurs 1 € in x US-\$	1,18		nein	Link
Abschreibung	20	a	nein	
Lebensdauer & Abschreibung (Elektrolyse-Stacks)	10	a	nein	
Diskontierungssatz	6	%	nein	
Kosten				
Kosten PEM-Elektolyse 2017	1460	€/ kW	ja	Link
Kosten PEM-Elektolyse 2030	810	€/ kW	ja	Link
Kosten PEM-Elektolyse 2050	510	€/ kW	ja	Link
Kosten HT-Elektolyse 2017	4421,76	€/ kW	ja	Link
Kosten HT-Elektolyse 2030	1632,00	€/ kW	ja	Link
Kosten HT-Elektolyse 2050	1282,60	€/ kW	ja	Link
spez. El-Energieverbrauch PEM-EI 2017	4,89	kWh/Nm ³ H ₂	ja	Link
spez. El-Energieverbrauch PEM-EI 2030	4,84	kWh/Nm ³ H ₂	ja	Link
spez. El-Energieverbrauch PEM-EI 2050	4,43	kWh/Nm ³ H ₂	ja	Link
spez. El-Energieverbrauch HT-EI 2017	3,78	kWh/Nm ³ H ₂	ja	Link
spez. El-Energieverbrauch HT-EI 2030	3,67	kWh/Nm ³ H ₂	ja	Link
spez. El-Energieverbrauch HT-EI 2050	3,67	kWh/Nm ³ H ₂	ja	Link
HT-Wärme (Dampf 35 bar)	21,80	€/t	nein	Link
Betriebsstoffe				
Wasser	1	€/t	nain	
N2-2018	0,1773	CAD-\$/Nm ³	nein	Link
O2-2018	20,82	€/t	nein	Link
Strom	50	€/MWh	nein	
CO2 *	37,75	€/t	nein	Quelle: Albrecht
Abwärme - Fernwärme für Kommunen	0,03	€/kWhth	nein	Link
Abwärme - Industrie (Dampf bei 4 bar)	18,90	€/t	nein	Link
Abwärme - Industrie (Dampf bei 25 bar)	19,34	€/t	nein	Link

Lohnkosten				
Lohnkosten - 2017 - Deutschland	40,20	€/h	ja	Link
Lohnkosten - 2017 - Norwegen	557,30	NOK/h	ja	Link
Lohnkostenanstieg pro Jahr	2,00	%	ja	Link
Lohnkosten - 2030 - Deutschland	52,00	€/h	ja	
Lohnkosten - 2030 - Norwegen	720,93	NOK/h	ja	
Lohnkosten - 2050 - Deutschland	77,27	€/h	ja	
Lohnkosten - 2050 - Norwegen	1071,26	NOK/h	ja	
Infrastruktur				
H2 - Pipeline	0,25212331	€/km t	nein	Link
H2 - Distanzunabhängig	3,58	€/kg	nein	Link
H2 - Distanzabhängig	0,14758	€/kg km	nein	Link
Anlagenverfügbarkeit				
Kontinuierlicher Betrieb	91,3	%	nein	
Systemdienlicher Betrieb	95	%	nein	
Instandhaltungskosten				
Instandhaltungskosten Katalyse	3	%	nein	
Instandhaltung PEM-EI 2017	12,50	€/kW	ja	Link
Instandhaltung PEM-EI 2030	7,50	€/kW	ja	Link
Instandhaltung PEM-EI 2050	6,00	€/kW	ja	Link
Instandhaltung HT-Co-EI 2017	32,50	€/kW	ja	Link
Instandhaltung HT-Co-EI 2030	12,00	€/kW	ja	Link
Instandhaltung HT-Co-EI 2050	7,50	€/kW	ja	Link
Sonstige Parameter				
Scale-up Faktor (Volumenprozesse)	1		nein	
Scale-up Faktor (Numbering up)	0,67		nein	

*Gilt nur für die HT-Co-Elektrolyse, da CO₂ in den Containeranlagen intern bereitgestellt wird und ebenfalls vom Betrieb abhängen.

10. Bereitstellung von Wasserstoff über die PEM-Elektrolyse

Autor: Moritz Raab (DLR)

SYSTEMGRENZEN

- Gate-to-Gate Betrachtung einer PEM Elektrolyse mit den Elektrolyseurdaten des FC-A1
- Wasser wird in Elektrolyse zerlegt.
- „Brown-field“ – Solution. Nebenprodukte können vermarktet werden
- Für den Fall „NOR Wasserkraft kontinuierlich“ wird zusätzlich der Stromtransport betrachtet

DATENGRUNDLAGE

- Hochskalieren der Prozessdaten
- Faktormethode als Methodik der Kostenschätzung nach Peters, Timmerhaus und West. Gültig vor allem für mehrstufige thermochemische Prozesse.
- Kostendaten der PEM-Elektrolyse aus der NOW Studie von (Smolinka u. a. 2018)
- Stackkosten wurden aus Investitionskosten herausgenommen und als Betriebsmittel betrachtet. Abschreibung des Stacks über 10 Jahre.
- Erlöse aus den Materialien des Stack sind nicht mit berücksichtigt.

LIMITIERUNGEN

- Es wird nur der stationäre Volllastbetrieb betrachtet
- Reales dynamische Verhalten und realer Teillastbetrieb können nicht abgebildet und bepreist werden. Zur Abbildung des dynamischen Verhaltens wird davon ausgegangen, dass die Anlage beispielsweise 3000 h im Jahr in Volllast läuft und die restliche Zeit steht.

REFERENZPROZESS

- Methane steam reforming ist der Referenzprozess für die Wasserstoffherstellung
- In (Mirabal 2003) ist für das Jahr 2003 ein Wert von 10.26 \$/GJ bei $2.83 \cdot 10^6 \text{ Nm}^3/\text{d}$ angegeben. Auf 5600 kg/h ergeben sich daraus mit 0.67 als Exponenten für einen Volumenprozess 6.45 \$/GJ bzw. 0.774 \$/kg.

LITERATUR

Noack, Christoph u. a. (2015). Studie über die Planung einer Demonstrationsanlage zur Wasserstoff-Kraftstoffgewinnung durch Elektrolyse mit Zwischenspeicherung in Salzkavernen unter Druck. Stuttgart. Online im Internet: <https://elib.dlr.de/94979/>.

11. Bereitstellung von Synthesegas über die HT-Co-Elektrolyse

Autor: Moritz Raab (DLR)

- Gate-to-Gate Betrachtung der Synthesegaserzeugung mit den Elektrolyseurdaten des FC-A3
- Wasser und CO₂ wird in HT-Co-Elektrolyse zerlegt.

- „Brown-field“ – Solution. Nebenprodukte können vermarktet werden
- Für den Fall „NOR Wasserkraft kontinuierlich“ wird zusätzlich der Stromtransport betrachtet

DATENGRUNDLAGE

- Hochskalieren der Prozessdaten
- Faktormethode als Methodik der Kostenschätzung nach Peters, Timmerhaus und West
- Kostendaten der HT-Co-Elektrolyse aus der NOW Studie von (Smolinka u. a. 2018)
- Stackkosten konnten aufgrund der Datenlage nicht aus Investitionskosten herausgelöst werden. Siehe Abschnitt 4.3.3. der (Smolinka u. a. 2018).
- Abschreibung über 20 Jahre.
- Erlöse aus den Materialien des Stack sind nicht mit berücksichtigt.

LIMITIERUNGEN

- Es wird nur der stationäre Vollastbetrieb betrachtet.
- Dynamische Verhalten und Teillastbetrieb kann nicht abgebildet und bepreist werden.

REFERENZPROZESS

- Als regenerativer Referenzprozess kann die Alternative PEM + rWGS betrachtet werden. Der konventionelle Referenzprozess ist die Dampfreformierung von Methan mit anschließendem Wasser-Gas Shift.

LITERATUR

Noack, Christoph u. a. (2015). Studie über die Planung einer Demonstrationsanlage zur Wasserstoff-Kraftstoffgewinnung durch Elektrolyse mit Zwischenspeicherung in Salzkavernen unter Druck. Stuttgart. Online im Internet: <https://elib.dlr.de/94979/>.

12. Bereitstellung von Butanol

Autoren: Andreas Patyk (ITAS), Dominik Poncette (ITAS)

SYSTEMGRENZEN

Eine Systembeschreibung und schematische Darstellung findet sich im LCA-Kapitel. Folgende Prozesskette wird betrachtet:

- CO₂-Bereitstellung aus Biogas: Details siehe LNG_HTEL
- Synthesegasbereitstellung: NT-CO₂-Elektrolyse mit geringem Wasserzusatz
- Synthesegasfermentation

Die Anlagenkapazität wird auf 100 kg Butanol/h gesetzt.

DATENGRUNDLAGE

Alle benötigten Materialien werden zu gegenwärtigen Marktpreisen zugekauft. Datengrundlagen nach Prozessgruppen:

- CO₂-Bereitstellung: siehe LNG_HTEL
- Synthesegasbereitstellung:
 - Betrieb: gemäß Abschnitt "Methodik" im Hauptbericht
 - Anlage: Abschätzung in Absprache mit den Projektpartnern
- Synthesegasfermentation
 - Betrieb: gemäß Abschnitt "Methodik" im Hauptbericht
 - Anlage: Skalierung von Angaben der Projektpartner für eine ähnliche Anlage (Skalierungsexponent aus (Hocking 2012))

LIMITIERUNGEN

Siehe LNG_HTEL und den Abschnitt "Methodik" im Hauptdokument der Roadmap.

LITERATUR

Hocking, M. B (2012). Modern chemical technology and emission control. Place of publication not identified: Springer-Verlag Berlin An.

13. Bereitstellung von Wasserstoff über die LOHC-Transporttechnologie

Autor: Moritz Raab (DLR)

SYSTEMGRENZEN

- Mit den Elektrolyseurdaten des FC-A1 wird Wasserstoff erzeugt
- Wasserstoff wird in LOHC gespeichert. LOHC wird transportiert.
- Dehydrierung lokal getrennt, unbeladenes LOHC wird zurück transportiert.
- Versorgung einer Wasserstoff Tankstelle.
- Es wird von einem 10 MW Elektrolyse-Modul ausgegangen.

DATENGRUNDLAGE

In den folgenden Abbildungen werden Wasserstoffströme rot, H00-DBT grün und H18-DBT blau dargestellt. Utility- und sonstige Ströme werden schwarz dargestellt.

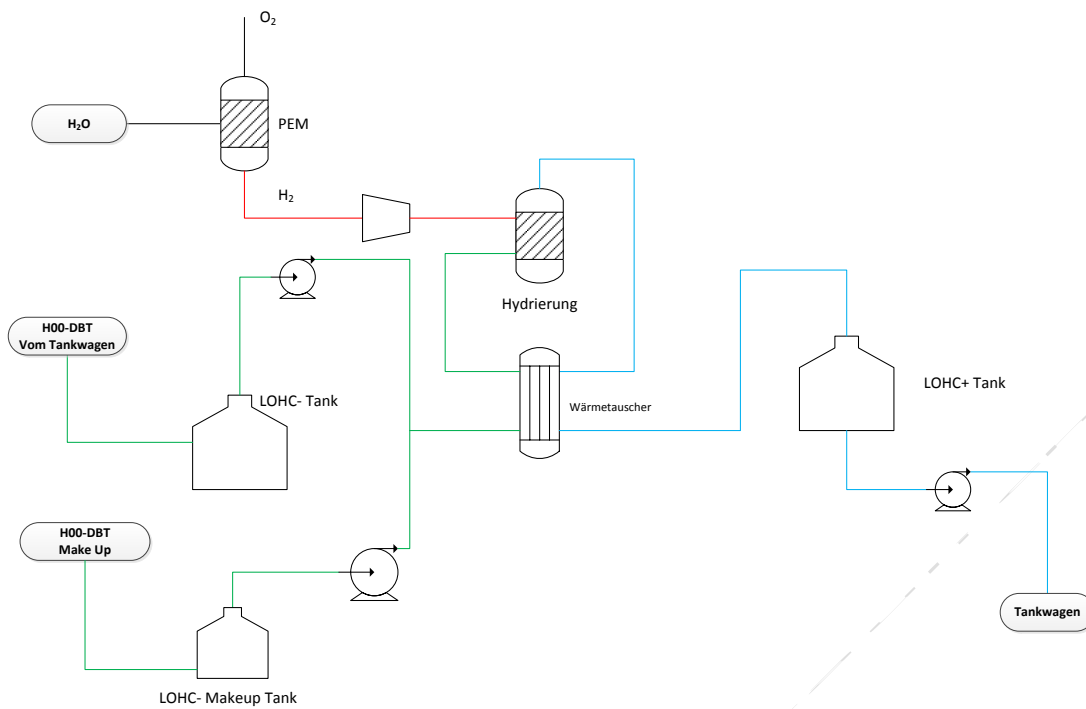


Abbildung B.1: Vereinfachtes VFB der Hydrierung - ohne Nebenkompenten.

Abbildung B.1 zeigt das Verfahrensfliessbild der Hydrierung. Die Nebenkompenten für das Wärmemanagement wurden der Übersichtlichkeit halber nicht dargestellt. Als Abwärme wird am Ende des Prozesses Dampf bei 4 bar erzeugt. Die Wärmeabfuhr erfolgt bei einem höheren Temperaturniveau als der Sättigungstemperatur von Wasser/Dampf bei 4 bar. Da die ökonomische Bewertung jedoch diese Druckstufe betrachtet, wird eine Frischdampf-Abspritzstation mit berücksichtigt.

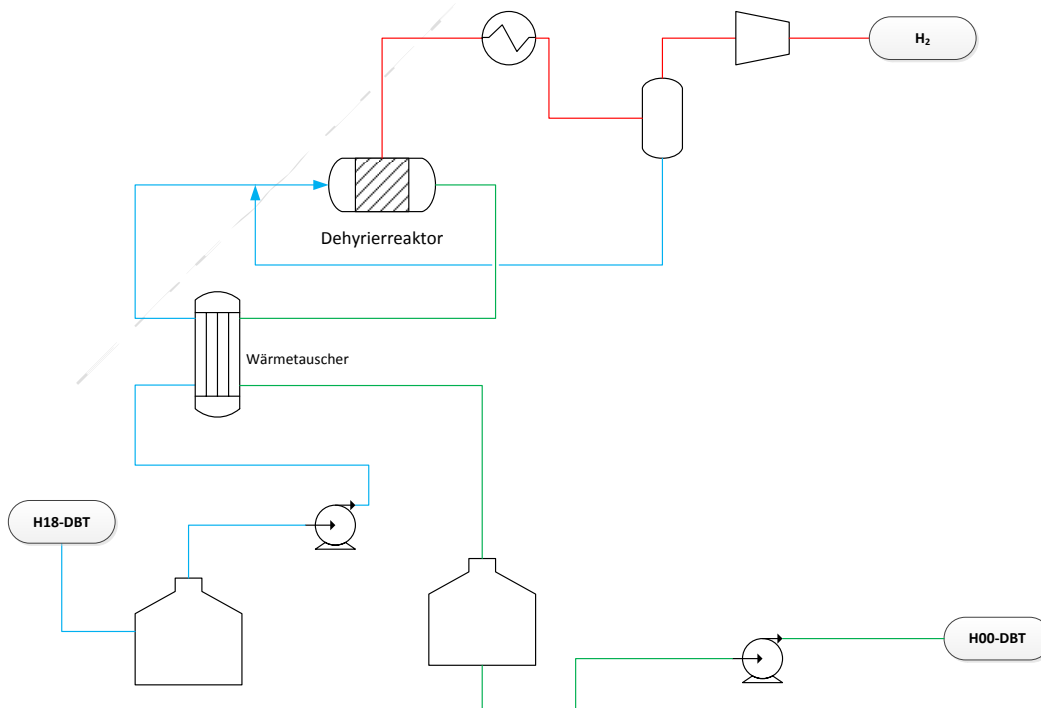


Abbildung B.2 Verfahrensfliessbild der Dehydrierung

Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden. zeigt das Verfahrensfließbild der Dehydrierung. Auf die Darstellung der Nebenkomponten für das Wärmemanagement wurde der Übersichtlichkeit halber weitestgehend verzichtet.

Die weiteren Daten und Annahmen für die TÖA sind aus den folgenden Veröffentlichungen:

- Faktormethode als Methodik der Kostenschätzung nach (Peters ; Timmerhaus ; West 2003)
- Kostendaten der PEM Elektrolyse aus der NOW Studie von 2018 (Smolinka u. a. 2018)
- Kosten für Hydrier- und Dehydrierreaktoren des LOHC sowie die Daten für den Transport des LOHCs (Reuß u. a. 2017)
- Für die Logistik wird davon ausgegangen, dass der Wasserstoff im Mittel über eine Distanz von 100 km transportiert wird.
 - Pro Ladung werden 1800 kg an Wasserstoff, gebunden im LOHC, transportiert
 - Die Geschwindigkeit der LKWs beträgt im Mittel 50 km/h.
 - Die Lade- und Entladedauer beträgt jeweils 30 Minuten
 - Ein „Turnaround“ dauert somit 5 Stunden pro LKW
 - In (Reuß u. a. 2017) wird beim LKW von einer Lebensdauer von 8 Jahren ausgegangen, beim LOHC Trailer von 12 Jahren. Für die TÖB wird der Einfachheit bei beiden Komponenten von 10 Jahren ausgegangen. Die Investitionskosten werden unabhängig vom Jahr betrachtet.

LIMITIERUNGEN

Die verwendete Methode zu Kostenschätzung entspricht den Klassen 3-4 der AACE (American association of cost engineering). Die Genauigkeit der Kostenschätzung wird mit einem Vertrauensintervall von $\pm 30\%$ angegeben.

- Es wird nur der stationäre Vollastbetrieb betrachtet
- Dynamische Verhalten und Teillastbetrieb kann nicht abgebildet und bepreist werden.

LITERATUR

Noack, Christoph u. a. (2015). Studie über die Planung einer Demonstrationsanlage zur Wasserstoff-Kraftstoffgewinnung durch Elektrolyse mit Zwischenspeicherung in Salzkavernen unter Druck. Stuttgart. Online im Internet: <https://elib.dlr.de/94979/>.

Peters, Max Stone ; Timmerhaus, Klaus Dieter ; West, Ronald Emmett (2003). Plant design and economics for chemical engineers. 5. ed., internat. ed. Boston: McGraw-Hill (= McGraw-Hill international editions).

Reuß, M. u. a. (2017). Seasonal storage and alternative carriers: A flexible hydrogen supply chain model. In: Applied Energy, 200 (2017), S. 290–302.

Teichmann, Daniel ; Arlt, Wolfgang ; Wasserscheid, Peter (2012). Liquid Organic Hydrogen Carriers as an efficient vector for the transport and storage of renewable energy. In: International Journal of Hydrogen Energy, 37 (2012), 23, S. 18118–18132.

14. Bereitstellung von LNG über LNG_HTEL und LNG_Oxyfuel

Autoren: *Andreas Patyk (ITAS), Dominik Poncette (ITAS)*

SYSTEMGRENZEN

Die Bereitstellung und Nutzung von LNG wird in zwei Varianten untersucht: (1) LNG_HTEL: HT-Wasserelektrolyse und Methanisierung von CO₂ aus Biogas; (2) LNG_OxyFuel: OxyFuel-Verbrennung von Biomasse, HT-Co-Elektrolyse und Methanisierung des Synthesegases. Systembeschreibungen und schematische Darstellungen finden sich im LCA-Kapitel. Folgende Prozesse werden betrachtet:

LNG_HTEL - Methanisierung von CO₂

- CO₂-Bereitstellung aus Biogas
- Annahme: Es wird von dem Gasstrom ausgegangen, der bei der Aufreinigung von Rohbiogas vom Methan abgetrennt wird. Dieser besteht hauptsächlich aus CO₂, das mit Schwefeldioxid und Schwefelwasserstoff verunreinigt ist. Zur Nutzung des CO₂ müssen die Schwefelverbindungen entfernt werden (Entschwefelung). Die Aufwendungen werden als Kosten für die CO₂-Bereitstellung veranschlagt.
- Wasserstoffbereitstellung: Hochtemperatur-Elektrolyse. Der Wärmebedarf wird teilweise aus der Methanisierung und teilweise aus der Verbrennung von zugekauftem Biogas gedeckt.
- Methansynthese: 3-Phasen-Methanisierung in der Blasensäule
- Verflüssigung
- LNG_OxyFuel - Methanisierung von Synthesegas
- CO₂-Bereitstellung: Oxyfuel-Verbrennung von fester Biomasse
- Synthesegas-Bereitstellung: HT-Co-Elektrolyse mit Nutzung der Abwärme der OxyFuel-Verbrennung
- Methansynthese: 3-Phasen-Methanisierung in der Blasensäule
- Verflüssigung

Die Anlagenkapazität wird in beiden Konzepten auf 70 kg LNG/h gesetzt (1 MW Outputleistung).

DATENGRUNDLAGE

Interne Wärmeströme werden mit 0,03 €/kWh bepreist, d.h. ein Prozess der Wärme abgibt, bekommt eine Gutschrift, benötigte Wärme verursacht Kosten. Alle benötigten Materialien werden zu gegenwärtigen Marktpreisen zugekauft. Datengrundlagen nach Prozessgruppen:

LNG_HTEL - Methanisierung von CO₂

- CO₂-Bereitstellung:
 - Betrieb: Skalierung der Entschwefelungsanlage aus (Patel u. a. 2016)
 - Anlage: Skalierung der Entschwefelungsanlage aus (Patel u. a. 2016)
- Wasserstoffbereitstellung:
 - Betrieb: Daten vollständig gemäß (Smolinka u. a. 2018)
 - Anlage: Abschätzung in Absprache mit den Projektpartnern
- Methansynthese:
 - Betrieb: Messungen und Simulationen des technischen Partners KIT-EBI
 - Anlage: Abschätzung in Absprache mit den Projektpartnern
- Verflüssigung:
 - Betrieb: Literatur-basierte Aspen-Simulationen des technischen Partners KIT-EBI
 - Anlage: Abschätzung in Absprache mit den Projektpartnern

LNG_OxyFuel - Methanisierung von Synthesegas

Von dem technischen Partner ZSW wurden Ergebnisse einer wärmeintegrierten Simulation geliefert. Daher wurde die Anlage als Gesamtheit betrachtet und die internen Wärmeströme *nicht* bepreist.

- Oxyfuel-Verbrennung:
 - Betrieb: Simulation ZSW
 - Anlage: Abschätzungen basierend auf (Eltrop; Universität Stuttgart ; Universität Stuttgart 2014)
- Co-SOEC:
 - Betrieb: Simulation ZSW
 - Anlage: Abschätzung in Absprache mit den Projektpartnern
- Methansynthese: wie LNG_HTEL + ZSW-Simulation
- Verflüssigung: wie HTEL

LIMITIERUNGEN

- Für LNG_HTEL sind die einzelnen Schritte ohne weitere Anpassungen bzw. Optimierungen hintereinandergeschaltet. Für entsprechende Maßnahmen zwischen HT-Elektrolyse, Methanisierung und Verflüssigung werden Energiesparpotentiale erwartet.
- Für LNG_OxyFuel beziehen sich die Daten auf eine voll wärmeintegrierte Anlage, sind allerdings extrem stark simulationsbasiert.
- Die Entwicklung der Investitionskosten für die Jahre 2030 und 2050 wurde für alle Prozessschritte außer der Elektrolyse an Hand der interpolierten CEPCI-Indizes abgeschätzt. Dabei werden die jeweiligen reziproken Werte als Substitut für einen gesicherten Forecast der Kostenentwicklung eingesetzt. Dem liegt die Annahme zugrunde, dass die Kostenreduktion in dem Maße eintritt, wie rückwirkend eine Verteuerung eingetreten wäre.
- Aufgrund der sehr hohen Unsicherheit ist auf die Berechnung von möglichen Lohnkosten für den laufenden Betrieb verzichtet worden. Da es sich um modulare, dezentrale, Container-basierte Anlagen handelt, ist es zweifelhaft, ob überhaupt (dauerhaft) Personal vonnöten ist, oder ob es eine Art Fernwarte geben wird, aus der viele Anlagen gesteuert werden.
- Personal für Wartung und Instandhaltung wurde über einen Zuschlag berücksichtigt.

15. Bereitstellung von STF

Autoren: Andreas Patyk (ITAS), Dominik Poncette (ITAS)

SYSTEMGRENZEN

Eine Systembeschreibung und schematische Darstellung findet sich im LCA-Kapitel. Folgende Prozesskette wird betrachtet:

- CO₂-Bereitstellung aus Biogas: Details siehe LRG_HTEL
- Wasserstoffbereitstellung: PEM-Elektrolyse
- Methanolsynthese inkl. Methanol/Wasser-Trennung durch Destillation
- MTG-Benzinsynthese

Die Anlagenkapazität wird auf 90 kg Benzin/h gesetzt (1 MW Outputleistung).

DATENGRUNDLAGE

Alle benötigten Materialien werden zu gegenwärtigen Marktpreisen zugekauft. Datengrundlagen nach Prozessgruppen:

- CO₂-Bereitstellung: siehe LRG_HTEL
- Wasserstoffbereitstellung:
 - Betrieb: Daten vollständig gemäß [2]
 - Anlage: Abschätzung in Absprache mit den Projektpartnern
- Methanolsynthese:
 - Betrieb: Angaben des technischen Partners TUBAF
 - Anlage: Abschätzung in Absprache mit den Projektpartnern
- MTG-Benzinsynthese:
 - Betrieb: Angaben des technischen Partners TUBAF basierend auf Messungen und Simulationen
 - Anlage: Abschätzung in Absprache mit den Projektpartnern

LIMITIERUNGEN

- Die Betriebskosten sind für alle Prozessschritte (außer Elektrolyse) für alle Jahre gleich angenommen worden. Hier wird höchstwahrscheinlich eine Reduzierung der Verbräuche eintreten. Darüber hinaus sind Kostenschwankungen der Preise für benötigte Materialien sowie Prozessdampf und Elektrizität zu erwarten. Für die Elektrolyse wurde ein in der Zukunft verminderter Energieverbrauch angenommen (aus [2]).
- weitere wie LRG_HTEL

16. Bereitstellung von FT-Diesel

Autoren: Andreas Patyk (ITAS), Dominik Poncette (ITAS)

SYSTEMGRENZEN

Folgende Prozesskette wird betrachtet:

- CO₂-Bereitstellung: Direct Air Capture von Climeworks
- Synthesegas-Bereitstellung: SOEC von Sunfire
- Synthesegas-Komprimierung: Standard-Kompression
- Diesel- & Wachs-Produktion: Fischer-Tropsch-Synthese von Ineratec

Alle benötigten Materialien werden zu gegenwärtigen Marktpreisen zugekauft.

DATENGRUNDLAGE

Allgemein: Interne Wärmeströme werden mit 0,03 €/kWh bepreist, d.h. ein Prozess der Wärme abgibt bekommt eine Gutschrift, benötigte Wärme verursacht Kosten.

- CO₂-Bereitstellung:
 - Daten wurden vollumfänglich von Climeworks zur Verfügung gestellt. (Ausnahmen: Kosten für Instandhaltung und Versicherung wurde mit Zuschlägen berechnet)
- Synthesegas-Bereitstellung: SOEC von Sunfire

- Daten wurden fast vollumfänglich von Climeworks zur Verfügung gestellt. (Ausnahmen: Kosten für Instandhaltung und Versicherung wurde mit Zuschlägen berechnet)
- Synthesegas-Komprimierung:
 - Es wird ein handelsüblicher Kompressor angenommen, dessen Preis Literatur-basiert berechnet wurde. Der Preis wird über alle Jahre konstant angenommen unter der Annahme, dass die Verteuerung aufgrund von Inflation und Steigerung der Rohstoffpreise der Standardisierung für diesen Anwendungsfall gegenübersteht.
- Diesel- & Wachs-Produktion:
 - Daten wurden fast vollumfänglich von Ineratec zur Verfügung gestellt.
 - Kosten für Instandhaltung und Versicherung wurde mit Zuschlägen berechnet
 - Entwicklung der Investitionskosten für die Jahre 2030 und 2050 wurde unter Zuhilfenahme der interpolierten CEPCI-Indizes abgeschätzt. Dabei werden die jeweiligen reziproken Werte als Substitut für einen gesicherten Forecast der Kostenentwicklung eingesetzt. Dem liegt die Annahme zugrunde, dass die Kostenreduktion in dem Maße eintritt, wie rückwirkend eine Verteuerung eingetreten wäre.

LIMITIERUNGEN

- In der Prozesskette die Prozessschritte ohne weitere Abstimmung hintereinandergeschaltet. Bei einer engeren Abstimmung, besonders zwischen SOEC und FT-Synthese, werden Energiesparpotentiale erwartet. (z.B. Verringerung der Rückgas-Menge)
- Alle Daten (außer jenen der Kompression) entstammen der Selbstauskunft der jeweiligen Firmen. Hier ist lediglich eine Plausibilitätsprüfung, nicht jedoch eine objektive inhaltlich Prüfung möglich gewesen. Dies gilt insbesondere für die von den Firmen selbst erstellten Forecasts der Investitionskostenentwicklung (Climeworks, Sunfire).
- Aufgrund der sehr hohen Unsicherheit ist auf die Berechnung von möglichen Lohnkosten für den laufenden Betrieb verzichtet worden. Da es sich um modulare, dezentrale, Container-basierte Anlagen handelt, ist es zweifelhaft, ob überhaupt (dauerhaft) Personal vonnöten ist, oder ob es eine Art Fernwarte geben wird, aus der viele Anlagen gesteuert werden.
- Personal für Wartung und Instandhaltung wurde über einen Zuschlag mitberücksichtigt

17. Bereitstellung und Nutzung von OME

Autor: Nils Tenhumberg (tkIS)

SYSTEMGRENZEN

Die techno-ökonomische Analyse basiert auf dem Benchmarkprozess zur Darstellung des OME₃₋₅ aus CO₂ und H₂ bzw. CO₂ und H₂O. Die mehrstufige Synthese des OME₃₋₅ umfasst die folgenden Produktionsprozesse: Wasserelektrolyse, Methanol-, Formaldehyd-, OME₁-, Trioxan- und OME₃₋₅-Synthese.

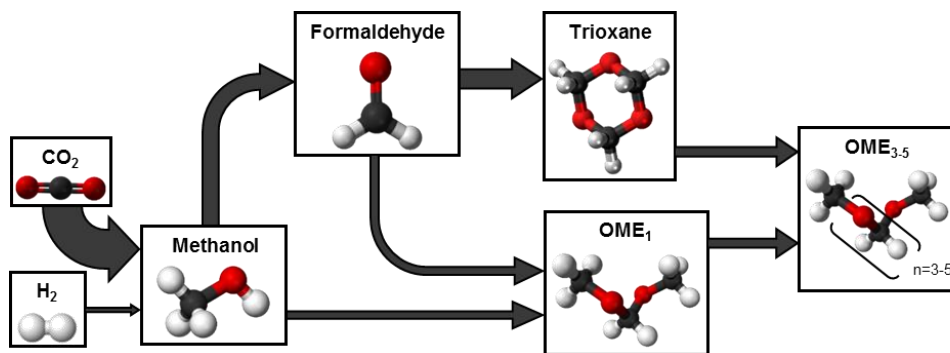


Abbildung B.3: Schematische Darstellung des Benchmarkprozess zur Synthese des OME₃₋₅ (ohne Elektrolyse).

DATENGRUNDLAGE

Die techno-ökonomische Analyse basiert auf der Aspen-Simulation der RWTH Aachen für den Benchmark-Prozess zur Herstellung des OME₃₋₅. Die einzelnen Produktionsprozesse der OME₃₋₅-Synthese (Methanol-, Formaldehyd-, OME₁-, Trioxan-, OME₃₋₅-Synthese) wurden unabhängig voneinander in Aspen dargestellt. Die Energieintegration über die gesamte Prozesskette wurde berücksichtigt.

Grundlage für die Kostenrechnung der techno-ökonomischen Analyse ist die Parameterliste in Tabelle B.1.

Die jährliche Produktionskapazität der modellierten Anlage beträgt 220.000 t OME₃₋₅. Die tatsächliche Produktionsleistung ist abhängig von dem betrachteten Stromszenario bzw. der Anzahl der Stunden im jeweiligen Stromszenario. Die Stromstunden und die Auslastung der Anlagen der einzelnen Szenarien beziehen sich auf die gesamte Produktionsanlage.

Die Investitionskosten (ohne Stack) für die Elektrolyse wurden anhand der NOW-Studie 2018 bestimmt. Aufgrund der unterschiedlichen Abschreibungszeiträume für die Anlagen und den Elektrolysestack sind die Kosten für den Elektrolysestack in den Betriebskosten der Elektrolyse enthalten.

Die Investitionskosten für die Methanol- und die Formaldehydanlage wurden auf Basis verfügbarer Literaturdaten anhand der Kapazität und des Chemical Engineering Plant Cost Index (CEPCI) skaliert. Für die Methanolanlage wurde die Verwendung von CO₂ als Feed berücksichtigt. Die Investitionskosten für die OME₁-, Trioxan- und OME₃₋₅-Anlage wurden anhand der mittels der Aspenmodelle ermittelten Materialeinsatzkosten (MEK) und der Faktormethode bestimmt.

Die Betriebskosten wurden anhand der in den Aspen-Modellen ermittelten Energieverbräuche unter Berücksichtigung der Energieintegration über die gesamte Prozesskette ermittelt.

Die Investitionskosten für 2030 und 2050 für die OME₃₋₅-Synthese wurden anhand des CEPCI-Index für 2030 und 2050 (Annahme: Steigerung von 2% /Jahr) skaliert. Die Investitionskosten für die Elektrolyse in 2030 und 2050 wurde anhand der Angaben in der NOW-Studie 2018 berechnet. Für die Elektrolyse wurde kein Inflationsausgleich berücksichtigt bzw. angenommen, dass der Inflationsausgleich bereits in den spezifischen Investitionskosten 2030 und 2050 enthalten ist.

LIMITIERUNGEN

In der Berechnung der Herstellungskosten wurden keine Kosten für die Katalysatoren der OME₁-, Trioxan- und OME₃₋₅-Synthese berücksichtigt.

Die Betriebskosten sind für alle Prozessschritte (außer Elektrolyse) für alle Jahre gleich angenommen worden. Es sind jedoch Kostenschwankungen der Preise für benötigte Materialien sowie Prozessdampf und Elektrizität zu erwarten.