Glas-CO2

Sachbericht Teil I: Kurzbericht zum Forschungsprojekt

„Kreislaufführung des Kohlendioxids aus dem Glasschmelzprozess zur Herstellung synthetischer Brennstoffe (Glas-CO2)
Teilprojekt A: Technische Modellierung und technologische Bewertung;
Teilprojekt B: Techno-ökonomische Analyse“

im Aufruf KlimPro-Industrie des BMBF

Fördernummer: 01LJ2005(A und B)

Laufzeit: 01.04.2021 – 31.03.2024

Forschungseinrichtung 1:
Hüttentechnische Vereinigung der Deutschen Glasindustrie (HVG) e.V.
Offenbach a.M.

Forschungseinrichtung 2:
Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V. (DLR)
Institut für Technische Thermodynamik
Stuttgart

Autoren:
Ferdinand Drünert, Yoga Rahmat, Julia Weyand,
Francisco Moser, Bernhard Fleischmann, Ralph-Uwe Dietrich

Finanziert von der Europäischen Union
NextGenerationEU

GEFÖRDERT VOM
Bundesministerium für Bildung und Forschung

1 Aufgabenstellung des Projekts

Im Rahmen des Projekts „Kreislaufführung des Kohlendioxids aus dem Glasschmelzprozess zur Herstellung synthetischer Brennstoffe (Glas-CO2)“ wurde die Möglichkeit untersucht, Carbon Capture and Utilization (CCU) Technologien in der Glasindustrie zu nutzen und das CO_2, welches im Abgas enthalten ist, mit Power-to-Gas Technologien in einen Brennstoff umzuwandeln. Dieser Brennstoff soll anschließend zum Erhalt der Prozesswärme in der Schmelzwanne erneut eingesetzt werden. Überschüsse an CO_2 aus dem Schmelzprozess sollen mit diesem Ansatz in einen synthetischen Brennstoff überführt werden und so alle CO_2-Emissionen verhindern. Im Projekt wurden verschiedene Prozessketten simuliert und in technologischer, ökonomischer und ökologischer Hinsicht evaluiert. Die hier erzeugten Daten sollen die Einschätzung zu Potenzialen und Risiken von CCU in der Glasindustrie ermöglichen und somit einen möglichen Weg zur CO_2-neutralen Glasproduktion aufzeigen.

2 Ablauf des Vorhabens

Das Vorhaben gliederte sich in drei Arbeitspakete:

1. AP 1: Der Erhebung eines generalisierten Basisszenarios, Technologievergleich und der Erstellung angepasster Modelle für die einzelnen erforderlichen Prozessschritte des Kreislaufkonzepts mit verschiedenen technischen Lösungen.

In diesem Arbeitspaket stand das Erfassen der Energie- und Masseströme der Glasproduktion und die Bewertung von möglichen Technologien in der auf die Glasproduktion folgenden Prozesskette im Vordergrund. Für die hierfür erforderlichen Technologien konnten fünf Module definiert werden, nämlich Schmelzaggregat (1), Abgasreinigung (2), Herstellung von hochreinem Synthesegas (3), Brennstoffsynthese (Methan, Methanol) (4) und Elektrolyse von Wasser (5). Diese Module wurden durch ein Wärmenutzungskonzept miteinander verknüpft.

2. AP 2: Prozesssimulation, Validierung und Bewertung der CO_2-neutralen Glasschmelze mit verschiedenen Szenarien und Randbedingungen.

In diesem Arbeitspaket wurden aus den Technologien von AP 1 fünf Kombinationen ausgewählt und umfassend technologisch sowie techno-ökonomisch simuliert:

(I) Methan als Brennstoff; Synthese von H_2 mit einem PEM Elektrolyseur
(II) Methan als Brennstoff; Synthese von H_2 mit einem alkalischen Elektrolyseur (AEL)
(III) Methanol als Brennstoff; Synthese von H_2 mit AEL
(IV) Verbrennung von H_2 (AEL) und Synthese von Methanol aus dem CO_2-Überschuss
(V) Verbrennung von H_2 (AEL) ohne Weiterbehandlung des Abgases als Referenzfall

Abschließend erfolgte eine ökonomische und ökologische Bewertung aller Fälle.

3. AP 3: Auswertung verschiedener Szenarien der CO_2-neutralen Glasschmelze mit Ausblick für die Umsetzung und Auslegung erster Demonstrationsanlagen.

Im letzten Arbeitspaket wurde die Umsetzbarkeit der Prozesskette untersucht. Dabei wurde unter Berücksichtigung der technologischen Reife (TRL) der verwendeten Technologien der TRL des Gesamtprozesses bestimmt und Hemmnisse für eine Markteinführung untersucht. Mit potenziellen Kooperationspartnern wurde Kontakt aufgenommen, um eine Umsetzbarkeit der untersuchten Prozesskette zu evaluieren.

3 Wesentliche Ergebnisse

Wir konnten im Projekt GlasCO2 zeigen, dass die Vermeidung von CO_2 aus der Glasproduktion möglich ist, indem der Kohlenstoff innerhalb eines Kreislaufprozesses in einen Brennstoff umgewandelt wird. Durch die Herstellung von synthetischen Brennstoffen aus dem CO_2 der Rohstoffe konnten wir die CO_2-Emissionen vollständig verhindern. Alle verwendeten Technologien sind auf dem Markt erhältlich und haben eine technische Reife mit einem TRL von 8 oder 9. Die Prozesskette wurde in technischer, ökonomischer sowie ökologischer Hinsicht evaluiert.

Aus ökologischer Sicht stellt die Integration eines Kohlenstoffkreislaufs eine Herausforderung dar. Während der Wasserbedarf in unserer Simulation mit 0,7 bis 0,9 $t_{Wasser}\ t^{-1}_{Glas}$ höher liegt als der typische Wasserverbrauch eines Schmelzaggregats (0,3 $t_{Wasser}\ t^{-1}_{Glas}$), schätzen wir den Mehrverbrauch an Wasser aktuell nicht als kritisch ein. Auch die Nebenbestandteile und Abfallprodukte sind aufgrund der geringen Anteile an kritischen Komponenten nicht problematisch. Allerdings ist der Stromverbrauch des Gesamtkreislaufs mit einer erforderlichen Energie von 2,8 – 3,7 $MWh_{el}\ t^{-1}_{Glas}$ durch Konversionsverluste sehr hoch (im Vergleich erfordern fossile Technologien einen Einsatz von 1,0 $MWh_{Erdgas}\ t^{-1}_{Glas}$). Im Vergleich zur Direktbefeuerung mit Wasserstoff liegen die Energien zur On-Site Elektrolyse bei 2,2 $MWh_{el}\ t^{-1}_{Glas}$. Durch den kontinuierlichen Bedarf an Brennstoff über 24 Stunden und 365 Tagen im Jahr ist eine Dynamisierung der Wasserstoffproduktion zwar technisch möglich, aber mit hohen Speicherbedarfen verbunden.

Die hier betrachtete Prozesskette geht mit hohen Kosten einher. Entscheidender Faktor für die ökonomische Sinnhaftigkeit ist der Strompreis: Selbst im Vergleichsfall mit Wasserstoffverbrennung gehen bei einem Strompreis von 60 € MWh^{-1}_{el} Kosten von 301 € t^{-1}_{Glas} einher, das entspricht geschätzten Vermeidungskosten von brennstoffbedingten CO_2-Emissionen (ca. 75% der Emissionen) über 900 € $t^{-1}_{CO_2}$. Demgegenüber liegen die Kosten zur Vermeidung der rohstoffbedingten Emissionen (25% des CO_2-Gesamtvolumens) bei zusätzlichen 1000 – 1850 € $t^{-1}_{CO_2}$. Durch die hohen Kosten für Wasserstoffspeicher ist aus ökonomischer Sicht eine dynamische Wasserstoffproduktion für die Glaserzeugung nicht sinnvoll.

Dennoch ist mit dem erarbeiteten Konzept erstmals eine CO_2-neutrale Glasproduktion möglich. Das Projekt stellt ebenfalls die dafür benötigten ökonomischen Parameter zur Verfügung.

Glas-CO2

Sachbericht Teil II: Eingehende Darstellung zum Forschungsprojekt

„Kreislaufführung des Kohlendioxids aus dem Glasschmelzprozess zur Herstellung synthetischer Brennstoffe (Glas-CO2)
Teilprojekt A: Technische Modellierung und technologische Bewertung;
Teilprojekt B: Techno-ökonomische Analyse“

im Aufruf KlimPro-Industrie des BMBF

Fördernummer: 01LJ2005(A und B)

Laufzeit: 01.04.2021 – 31.03.2024

Forschungseinrichtung 1:
Hüttentechnische Vereinigung der Deutschen Glasindustrie (HVG) e.V.
Offenbach a.M.

Forschungseinrichtung 2:
Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V. (DLR)
Institut für Technische Thermodynamik
Stuttgart

Autoren:
Ferdinand Drünert, Yoga Rahmat, Julia Weyand,
Francisco Moser, Bernhard Fleischmann, Ralph-Uwe Dietrich

Finanziert von der Europäischen Union
NextGenerationEU

GEFÖRDERT VOM
Bundesministerium für Bildung und Forschung

0 Zusammenarbeit der Projektpartner 7
0.1 Übersicht über die beteiligten Partner 7
0.1.1 Hüttentechnische Vereinigung der Deutschen Glasindustrie (HVG) e.V. 7
0.1.2 Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V. (DLR) 7
0.2 Aufgabenverteilung im Projekt 8
0.3 Zusammenarbeit während der Projektdurchführung 10
0.4 Herausforderungen und Lösungsansätze 10
0.5 Bewertung der Zusammenarbeit 11
1 Einleitung 12
1.1 Vorstellung des techno-ökonomischen Modells 14
2 Modellbeschreibung 16
2.0 Allgemeine Eingangsparameter und Basisbedingungen 16
2.1 Schmelzaggregat (Modul 1) 17
2.2 Abgasaufbereitung (Modul 2) 20
2.2.1 Nasswäscher 21
2.2.2 . Stickstoffabreicherung (Nitrogen Removal Unit, NRU) 22
2.3 Herstellung von hochreinem Synthesegas (Modul 3) 23
2.3.1 Hydrogenierung 24
2.3.2 ZnO- und Al_2O_3-Schutzbetten 24
2.4 Brennstoffsynthese (Modul 4) 24
2.4.1 Methanisierung 25
2.4.2 Methanolsynthese 26
2.5 Wasserstoffsynthese (Modul 5) 28
2.5.1 Vergleich von AEL mit PEM 28
2.5.2 Eingangsparameter für die statische Elektrolyse 29
2.5.3 Dynamische Strombeschaffung mit PEM-Elektrolyseur 29
2.5.4 Parameter für die ökonomische Analyse 31
3 Ergebnisse 34
3.1 Technische Analyse 34

3.1.1 Einordnung des Technischen Reifegrads (technical readiness level, TRL) 34
3.1.2 Wärmebetrachtung 35
3.1.3 Verbraucher für elektrische Energie 40
3.1.4 Prozesswirkungsgrade 41
3.2 Ökonomische Analyse 42
3.2.1 Investitionsausgaben (CAPEX) 42
3.2.2 Betriebsausgaben (OPEX) und Nettoherstellungskosten (NPC) 44
3.2.3 Sensitivitätsanalyse 46
3.2.4 Ökonomische Betrachtung einer dynamischen Wasserstoffsynthese 49
3.3 Ökologische Analyse 50
3.3.1 Wasserbilanz 50
3.3.2 Brennstoffbilanz 51
3.3.3 Rohstoffbilanz 53
4 Auswertung 55
4.1 Carbon Capture and Utilization im Kreislaufprozess 55
4.2 Anreicherungen im Kreislaufprozess 55
4.3 Technische Reife des Gesamtprozesses 56
4.4 Einordnung der Prozesswirkungsgrade und Wärmebilanz 56
4.5 Einordnung der ökonomischen Analyse 57
4.6 Einordnung der ökologischen Analyse 58
4.7 Einordnung der Marktreife 59
4.7.1 Chancen 60
4.7.2 Herausforderungen 60
4.7.3 Hemmnisse und Potenziale 61
5 Zusammenfassung 62
Danksagung 63
Literaturverzeichnis 64
Anhang 72
Ergänzungen 76

1 Positionen des Zahlenmäßigen Nachweises 76
2 Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Projektarbeit 76
3 Voraussichtlicher Nutzen des Projekts 76
4 Fortschritte zum Projekt von Seiten Dritter 77
5 Geplante und durchgeführte Veröffentlichungen zum Projekt 77

Abkürzungsverzeichnis

AEL	Alkalischer Elektrolyseur
Aspen Plus®	Prozessimulationssoftware von Aspen Technology Inc.
Bh	Betriebsstunden (business hours)
BP	Nebenprodukt (byproduct)
CAPEX	Investitionsausgaben (Capital Expenditure)
CCS	Abtrennung und Speicherung von Kohlenstoff (carbon capture and storage)
CCU	Abtrennung und Nutzung von Kohlenstoff (carbon capture and utilization)
CCUS	Oberbegriff zu CCU und CCS
CEPCI	Kostenindex für chemische Produktionsstätten (Chemical Engineering Plant Cost Index)
DAC	Abtrennung von CO_2 aus der Luft (direct air capture)
DACCS	Verbindung von DAC mit CCS
DKL	Dampfkreislauf
EU ETS	Emmissionshandelssystem der Europäischen Union (EU trading system)
FW	Fernwärme
Fälle I – V	Siehe Abschnitt 2
HPS	Hochdruckdampf (high pressure steam)
η	Wirkungsgrad, mit η_{HtF} als Wirkungsgrad Wärme-zu-Brennstoff und η_{PtF} als Wirkungsgrad Leistung-zu-Brennstoff
KW	Kühlwasser
KF	Kühlfalle
K	Stromkosten in € MWh^{-1}. Im Bericht verwendet als $K_{ökon}$ (Preisgrenze für günstige Strom), K_{min} und K_{max} (minimaler und maximaler Strompreis) im jeweils betrachteten Zeitraum
Me	Methan
MeOH	Methanol
MPS	Mitteldruckdampf (medium pressure steam)
NPC	Nettoproduktionskosten (net production costs)
OPEX	Betriebsausgaben (Operational Expenditure)
p	Leistung in MW. Im Bericht verwendet für die Elektrolyse, mit p_{max} als maximal mögliche Elektrolyseurleistung und p_0 als Elektrolyse-Standby-Leistung
PEM	Protonenaustausch-Membran (proton exchange membrane) Elektrolyseur

PtG	Leistung-zu-Brennstoff (power-to-gas)
PW	Prozesswärme
S	Speicherkapazität für Wasserstoff in Stunden Normbetrieb, mit S_{ist} als ist- und S_{max} als maximalen Füllstand
SNG	Synthetisches Methanol (synthetic natural gas)
SynFuel	Synthetischer Brennstoff (synthetic fuel)
SynMeOH	Synthetisches Methanol
TEPET+	DLR-eigenes Softwarepaket zur techno-ökonomischen und ökologischen Evaluation (Techno-Economic and Ecological Process Evaluation Tool)
THG	Treibhausgase
VW	Vorwärmung
WÜ	Wärmeübertrager

0 Zusammenarbeit der Projektpartner

0.1 Übersicht über die beteiligten Partner

0.1.1 Hüttentechnische Vereinigung der Deutschen Glasindustrie (HVG) e.V.

Seit ihrer Gründung im Jahr 1920 beschäftigt sich die Hüttentechnische Vereinigung der Deutschen Glasindustrie e.V. (HVG) mit den Themenkomplexen Energieeffizienz des Schmelzprozesses, mit Messsonden rund um die Glasschmelzwanne, mit dem Korrosionsverhalten der Materialien sowie mit der Physik und Chemie der Glasschmelze. Dabei war ein Forschungsschwerpunkt der letzten Jahre der Einfluss verschiedener Brenngase auf die Glasherstellung. Der Einfluss der Verwendung biogener Brenngase auf die Glasherstellung ist ebenso Teil abgeschlossener Vorhaben wie die Analyse von Prozessschwankungen aufgrund von Gasbeschaffenheitsänderungen. Im Rahmen der Analyse von Gasqualitätsschwankungen auf die Glasherstellung wurde umfangreiches Know-How zur Messung von Gasqualitäten und deren Einfluss auf die Feuerung von Glasschmelzaggregaten gesammelt. In Zusammenarbeit mit der DLR wurden im Rahmen des Kopernikus Projekts SynErgie branchenspezifische Analysen des Glasherstellungsprozesses vorgenommen die als Ausgangsposition für das hier vorgestellte Projekt dienen.

0.1.2 Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V. (DLR)

Das Deutsche Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V. (DLR) ist das Forschungszentrum der Bundesrepublik Deutschland für Luft- und Raumfahrt. Seine Arbeiten in Luftfahrt, Raumfahrt, Energie, Verkehr und Sicherheit sind in nationale und internationale Kooperationen eingebunden. Die öffentlich geförderte Energieforschung ist in besonderem Maße den Zielen der Energiewende verpflichtet. Das DLR liefert Beiträge in Form technischer Entwicklungen und stellt zugleich Orientierungswissen in Form von Studien bereit. Die DLR-Energieforschung konzentriert sich auf die umweltfreundliche, effiziente und kostengünstige Energiebereitstellung und -speicherung im energiewirtschaftlich relevanten Maßstab. Die Abteilung „Energiesystemintegration“ beschäftigt sich mit innovativen Energiespeicher- und Energiewandlungssystemen. Im Projekt werden die vorhandenen methodischen Kompetenzen zur Analyse von Kraftwerks- und industriellen Prozessen und zur techno-ökonomischen Bewertung von Prozessstufen und Umwandlungsprozessen eingesetzt. Darüber hinaus hat das DLR zahlreiche geförderte Verbundprojekte mit Industriepartnern im Bereich der Prozessanalyse und Integration von Energiespeichern in Kraftwerke und industrielle Prozesse durchgeführt (Prosper Plus, ITES, ADELE, TESIN, THESAN, FlexiTES) und nimmt eine führende Rolle in nationalen und internationalen Netzwerken ein (ProcessNet, EERA,

IEA). In der Abteilung „Techno-ökonomische Analyse“ wurden in der Vergangenheit Power-to-Liquid-Konzepte vorwiegend für einen nachhaltigen Flugverkehr entwickelt. Für die techno-ökonomische Bewertung wurde eine transparente, nachvollziehbare Methodik im hauseigenen Tool **T**echno-**E**conomic **P**rocess **E**valuation **T**ool (TEPET) entwickelt. Diese ermöglicht die Berechnung jahresspezifischer Investitions- und Produktionskosten von alternativen Kraft- und Brennstoffen in einem Vertrauensbereich von ±30 % nach AACE-Standard und stellt damit eine belastbare Vergleichbarkeit unterschiedlicher Herstellungsrouten von Brennstoffen für die CO_2 „neutrale“ Glasschmelze her. Für die anvisierten Arbeiten sind neben der techno-ökonomische Bewertungsmethodik auch die Vorarbeiten zur Simulation und Kostenschätzung der Erzeugung von Synthesegas relevant (Wirbelschichtvergasung bzw. Flugstromvergasung und Wasser-Gas-Shift). Entsprechende Prozesssimulationen und experimentelle Erfahrungen in der Synthesegaserzeugung sind vorhanden. Aufbauend auf der Synthesegaserzeugung ist die Prozessoptimierung und Abstimmung der einzelnen Prozessschritte auf den Gesamtprozess ein essenzieller Teil der techno-ökonomischen Bewertung. Dies wurde bereits bis zur Fischer-Tropsch-Synthese erfolgreich dokumentiert. Erfahrungen im Bereich der Glasproduktion sowie des Produktionsprozesses konnten durch das Kopernikus-Projekt SynErgie aufgezeigt werden, indem technische Hemmnisse und organisatorische Restriktionen der elektrischen Lastflexibilisierung, in enger Zusammenarbeit mit der HVG, identifiziert wurden. Für das Projekt CO_2-neutrale Glasschmelze wird mit institutseigenen Mitteln die bestehende Methodik der techno-ökonomischen Bewertung weiterentwickelt und um die ökologische Bewertung ergänzt. Dies erfolgt im Rahmen der laufenden Methodik-Erweiterung auf die gesamte Grundstoffindustrie mit dem künftigen Anwendungspotenzial für Stahl, Zement, Chemie, Glas und Feuerfest sowie für die Umrüstung der konventionellen Kraftwerkstechnik auf erneuerbare Energie.

0.2 Aufgabenverteilung im Projekt

Tabelle 1: Tabellarische Übersicht über die im Projekt zu erledigenden Aufgaben.

AP	*Aufgaben HVG*	*Aufgaben DLR*
1.1	Auswahl von Technologien zur Herstellung von Wasserstoff; Zusammenstellung möglicher Prozessketten anhand der verfügbaren Technologien	Auswahl von Technologien zur Brennstoffsynthese und zur Abreicherung von CO_2 aus dem Abgas; Ermittlung von Randbedingungen bezüglich der Reinheit
1.2	Definition einer beispielhaften Schmelzwanne und Erfassen aller zugehörigen Randparameter unter Berücksichtigung möglicher Prozessketten.	

1.3	Auswahl geeigneter Synthesetechnologien und Elektrolyseure für die zu untersuchenden Szenarien; Festlegung von zu untersuchenden Prozessketten. Evaluation von Strompreisszenarien anhand historischer Marktdaten	Zusammenstellung aller für die Simulation erforderlichen Parameter für alle zu untersuchenden Technologien
2.1	Abbilden aller für das Basisszenario relevanten Technologien in einem Python-Modell; Abgleich der Randbedingungen mit den erforderlichen bzw. resultierenden Technologieparametern	Erstellen von Modellen zu den verschiedenen untersuchten Modulen in Aspen Plus®; Definition von Eingangs- und Ausgangsparametern
2.2	Verknüpfung der Module aus 2.1 zu einem Kreislaufprozess über eine Python-Simulation	Verknüpfung der Module für das Basisszenario (Produkt: Methan; Wasserstoff aus PEM-Elektrolyseur) in Aspen Plus® zu einer vollständigen Prozesskette
2.3	Auswertung der ökonomischen Analyse und Vergleich aller Prozessketten	Ökonomische Bewertung der in Aspen Plus® abgebildeten Prozesskette durch TEPET
2.4	Auswertung und Vergleich aller Prozessketten in ökologischer Hinsicht; Evaluation von Optimierungspotenzial in allen Prozessketten	Erfassung aller Nebenprodukte, Wasser-, Ressourcen- und Energieverbrauch
3.1	Klärung der technischen Reife für die Abgasreinigung und Wasserstoffsynthese	Klärung der technischen Reife für die Brennstoffsynthese
3.2	Ermittlung von CO_2-Vermeidungskosten	Kontextualisierung von CAPEX und OPEX in Hinsicht auf die allgemeine Wirtschaftlichkeit der untersuchten Prozessketten
3.3	Untersuchen von Umsetzungsmöglichkeiten für eine Prozesskette; Zusammenfassen der Vor- und Nachteile jeder Prozesskette	
3.4	Ermittlung von zu klärenden Randbedingungen bzgl. Lagerung von Zwischenprodukten; Evaluation der Bedingungen gemäß RED III	
3.5	Aufnahme von Gesprächen mit möglichen Kooperationspartnern für ein potenzielles Folgeprojekt; Vorbereitung des Abschlussberichts.	

Die HVG hat im Projekt vorwiegend das Design der Prozessketten durchgeführt. Hierbei stand die Auswahl geeigneter Technologien, Erfassung von Randbedingungen und das Abbilden der Prozesskette in Python zur Evaluation von Anreicherungseffekten im Vordergrund. Weiterhin erfolgte die Evaluation und Kontextualisierung der techno-ökonomischen Analyse in Hinsicht auf den industriellen Standard heutiger Glasproduktion überwiegend durch die HVG.

Das DLR war für die Durchführung der techno-ökonomischen Analyse verantwortlich. Dies umfasst die ausführliche stationäre Simulation der Prozessketten in Aspen Plus® und die wirtschaftliche Betrachtung mittels TEPET. Anschließend erfolgte die Sensitivitätsanalyse und deren Kontextualisierung in Hinsicht auf die Wirtschaftlichkeit der Prozessketten.

Die Ergebnisse des Projekts wurden auf verschiedenen Fachtagungen wie dem International Congress on Glass, Process.Net oder der DGG Jahrestagung in Form von Postern und Vorträgen vorgestellt. Veröffentlichungen in Fachzeitschriften erfolgen kurz nach Veröffentlichung dieses Berichts.

0.3 Zusammenarbeit während der Projektdurchführung

Im Projekt legten HVG und DLR großen Wert auf eine enge Zusammenarbeit, die durch regelmäßigen und intensiven Austausch geprägt war. Die Kooperation basierte auf einer Struktur aus zweiwöchentlichen Videokonferenzen, ergänzt durch zusätzliche Besprechungen bei Bedarf. Dies ermöglichte einen kontinuierlichen Informationsfluss und eine schnelle Reaktion auf neue Erkenntnisse oder unerwartete Herausforderungen. Beide Partner arbeiteten eng bei der Auswertung und Interpretation der Simulationsergebnisse zusammen, was eine gemeinsame Entscheidungsfindung und zügige Anpassungen der Modelle ermöglichte. Ein besonderer Vorteil lag in der gezielten Kombination der unterschiedlichen Fachkompetenzen von HVG und DLR, die einen interdisziplinären Ansatz zur Entwicklung ganzheitlicher Lösungen förderte. Diese Zusammenarbeitsstruktur bildete die Grundlage für die erfolgreiche Bewältigung der komplexen Projektaufgaben und die kontinuierliche Verbesserung der Modelle und Simulationen.

0.4 Herausforderungen und Lösungsansätze

Eine zentrale Herausforderung des Projekts stellte die hohe Komplexität der modellierten Prozessketten mit ihren zahlreichen einzelnen Technologien dar. Besonders anspruchsvoll erwies sich die Abbildung der Prozessketten in drei Tools mit unterschiedlichen Aufgaben (Python, Aspen Plus® und TEPET), was eine intensive Abstimmung zwischen beiden Forschungseinrichtungen erforderte.

Um diese Herausforderung zu bewältigen, etablierten die Partner einen regelmäßigen Austausch. Dieser ermöglichte es, Abweichungen in den verschiedenen Modellen zu minimieren und die Konsistenz der Ergebnisse sicherzustellen. Durch die gemeinsame Evaluation der Prozessketten konnten zudem ineffiziente Maßnahmen identifiziert und unerwartete Phänomene wie Anreicherungseffekte weitgehend aufgearbeitet werden.

Diese Vorgehensweise führte nicht nur zu einer Verbesserung der Modellqualität, sondern förderte auch den Wissenstransfer zwischen den Forschungseinrichtungen. Die enge Zusammenarbeit ermöglichte es, die komplementären Expertisen beider Partner optimal zu nutzen und innovative Lösungsansätze für komplexe Problemstellungen zu entwickeln. Auch der erfolgte Wechsel der bearbeitenden Person seitens des DLR innerhalb der Projektlaufzeit stellte sich aufgrund der regelmäßigen Kommunikation als unproblematisch heraus. Vielmehr bereicherte der Personalwechsel die Bearbeitung des Projekts um neue Blickwinkel und ermöglichte neue Ansätze und Herangehensweisen.

0.5 Bewertung der Zusammenarbeit

Die Zusammenarbeit zwischen den beiden Forschungseinrichtungen im Projekt wird von allen Beteiligten als äußerst positiv bewertet. Der freundliche und professionelle Umgang schuf eine produktive Arbeitsatmosphäre, die maßgeblich zum Projekterfolg beitrug. Durch die Kombination der unterschiedlichen fachlichen Hintergründe der beteiligten Wissenschaftler konnten wertvolle Synergieeffekte erzielt werden. Dies ermöglichte erstmals die Durchführung technologischer und ökonomischer Evaluationen von Kohlenstoffkreisläufen mit integrierter Brennstoffsynthese.

Die Kommunikation zwischen den Partnern erwies sich als besonders effektiv. Bei Rückfragen oder neuen Ideen standen beide Forschungseinrichtungen jederzeit kurzfristig für einen Austausch via Videokonferenz zur Verfügung. Dieser regelmäßige und zeitnahe Dialog förderte nicht nur den kontinuierlichen Projektfortschritt, sondern auch die Entwicklung innovativer Lösungsansätze. Die Bereitschaft beider Partner, flexibel auf neue Erkenntnisse und Herausforderungen zu reagieren, trug zusätzlich zur Dynamik des Projekts bei.

Besonders hervorzuheben ist die gemeinsame Ausrichtung auf die Projektziele, die eine fokussierte und zielgerichtete Zusammenarbeit ermöglichte. Die offene Diskussionskultur und der respektvolle Umgang miteinander schufen ein Umfeld, in dem kreative Ideen gedeihen konnten. Diese gelungene Kooperation kann als Modell für zukünftige Forschungsprojekte dienen und unterstreicht die Bedeutung einer gut funktionierenden Partnerschaft für den Erfolg komplexer wissenschaftlicher Vorhaben.

1 Einleitung

Der Klimawandel gilt als eine der größten Gefahren der heutigen Zeit, mit enormen Auswirkungen auf Gesundheit, Ökonomie und Ökologie [1, 2, 3]. Allein in dem Zeitraum von 1880 (Beginn weltweiter systematischer Aufzeichnungen des Temperaturverlaufs) bis 2023 ist die globale jährliche Durchschnittstemperatur von 14°C um mindestens 1,2°C angestiegen [4]. Seit 1982 hat sich der Trend zur globalen Erwärmung noch einmal deutlich verstärkt [5]. Inzwischen ist der anthropogene Anteil am Temperaturanstieg, ausgelöst durch einen erhöhten Anteil an Treibhausgasen (THG) in der Atmosphäre, mehrfach belegt [6, 7, 8]. Über 78% der THG-Wirkung ist dabei auf CO_2 zurückzuführen [9]. Da der Klimawandel nicht nur mit einer „leicht erhöhten Temperatur“ einhergeht, sondern auch immense Schäden verursacht [10], haben sich die vereinten Nationen in Paris verpflichtet, die THG-Emissionen zu begrenzen. Mit den gefassten Beschlüssen soll erwirkt werden, dass die globalen jährlichen Durchschnittstemperaturen auf „gut unter 2°C über dem vorindustriellen Niveau“ begrenzt werden [11], d.h. sie sollte deutlich unter 16°C liegen [12]. In der Europäischen Union soll die Reduktion an THG-Emissionen über die Kopplung von Emissionen an das EU ETS erfolgen. Diese Zertifikate sind über den freien Markt erhältlich und sollen mit der Zeit verknappt werden, bis sie nach 2050 nicht mehr ausgegeben werden [13]. Die Wirksamkeit des Zertifikate-Handels konnte bereits trotz ihres bisher geringen Preises von unter 100 € je Tonne emittierter CO_2-Äquivalente (t eq_{CO_2}) belegt werden [14]. Durch die Begrenztheit der Zertifikate steigt der Preis naturgemäß an und wird unserer Meinung nach langfristig auf Kosten von Technologien wie Direct Air Carbon Capture and Storage (Filterung von CO_2 aus der Luft; DACCS) hinauslaufen. Die Kosten von DACCS werden in Studien auf etwa $100 bis $825 pro Tonne CO_2 im Jahr 2050 geschätzt [15, 16], liegen aber derzeit mit über 1200 € t_{CO_2} (ohne Transport) noch deutlich darüber [17, 18].

Industrielle Hochtemperatur-Prozesse emittieren besonders viel CO_2: 2022 wurden in der EU27 Emissionen $CO_{2,\,eq.}$ von 354 Mt dem Sektor „Industrielle Verbrennung und Prozesse“ zugeordnet [19]. Gerade die industrielle Verbrennung kann mit Wasserstoff defossilisiert werden [20]. Viele Hochtemperaturprozesse, wie z.B. in der Stahl-, Zement- oder Glasherstellung, emittieren aber durch chemische Prozesse weitere THG und erfordern weitere Maßnahmen, wie CCUS Technologien, um CO_2-Neutralität zu erreichen [21, 22, 23]. Mögliche Maßnahmen werden in diversen Forschungsprojekten untersucht, wie z.B. die Eignung von CCS in der Zementindustrie [24] oder einer Wasserstoff-Direktreduktion in der Stahlindustrie [25]. Da in der europäischen Glasindustrie, nach Scope 1 (direkte CO_2-Emissionen am Standort [26]) im Jahr 2022 verantwortlich für etwa 21 Mt_{eqCO_2} [27], diese rohstoffbedingten Emissionen aber „nur“ etwa 25% der Gesamtemissionen ausmachen, thematisieren Leuchtturmprojekte aus der Branche bisher nur die Beheizung durch Wasserstoff [28], voll-elektrisches Schmelzen [29] und Mischungen davon in Hybridöfen mit bis zu 80% Stromanteil [30, 31, 32]. Die Vermeidung von Rohstoffbedingten Emissionen wird

dabei, trotz Dringlichkeit und fehlender technologischer Reife von geeigneten Technologien, vorerst nicht betrachtet und auf die Zeit nach 2030 verschoben. Theoretisch denkbar wäre mit den bisher erarbeiteten Maßnahmen zwar die Produktion von CO_2-neutralem Glas durch entsprechende Beheizung, wenn nur Recyclingmaterial im Gemenge verwendet wird. Dieses ist jedoch ein wertvoller, begrenzter Rohstoff und durch Verluste im Materialzyklus des Glases nicht in ausreichender Menge verfügbar. Aus diesem Grund thematisiert diese Studie die Möglichkeit, mit Hilfe von Carbon Capture and Utilization CO_2-neutral Glas zu produzieren. Wir kombinieren hierfür die CCU-Ansätze mit einer On-Site PtG Produktion und ermöglichen damit nicht nur die Vermeidung der rohstoff-, sondern zugleich auch der wärmebedingten CO_2-Emissionen der Glasproduktion. In einem techno-ökonomischen Modell emulieren wir verschiedene vollständige Kohlenstoffkreisläufe, die von der Emission des CO_2 in der Glasproduktion über eine Abgasreinigung bis hin zur Synthese eines Erdgassubstituts mit on-site generiertem Wasserstoff verschiedene Komponenten miteinander vergleichen. Dieser Ansatz erfordert eine vergleichsweise hohe Komplexität und weist höhere Verluste im energetischen Wirkungsgrad auf, ist aber nur von dem Vorhandensein grünen Stroms vor Ort abhängig und kann in Unterprozessen an Dienstleister ausgelagert werden. Mit dem synthetischen Brennstoff wird aus dem Kohlenstoff-Überschuss ein marktfähiges Produkt erstellt, welches zwar wie die entsprechenden kohlenstoff-haltigen Rohstoffe der Glasproduktion (Soda, Kalk, Dolomit) fossilen Ursprungs ist, aber auch nicht zu direkten THG-Emissionen führt und in CCS-Prozessen einen Nutzen haben kann. Gleichzeitig sind keine großen Eingriffe in den Schmelzprozess und die bestehenden Schmelzaggregate erforderlich. Wir untersuchen die synthetischen Brennstoffe Erdgas, Methanol und Wasserstoff mit zusätzlicher Verwertung des Kohlenstoffüberschusses, und wir vergleichen die Wirtschaftlichkeit mit einem Referenzfall: der Herstellung von Wasserstoff ohne Verwertung von CO_2 aus dem Abgas.

1.1 Vorstellung des techno-ökonomischen Modells

Unser techno-ökonomisches Modell umfasst fünf Module: (1) Glasofen, (2) Abgasreinigung, (3) Synthesegasaufbereitung, (4) Brennstoffsynthese und (5) Wasserstoffsynthese. Während wir bei der Wasserstoffsynthese (5) und der Brennstoffsynthese (4) unterschiedliche Produkte oder Verfahren analysieren, ist die Aufbereitung (2 und 3) jeweils an die Anforderungen der Folgeprodukte angepasst. Aus diesen Komponenten haben wir fünf Kreislaufprozesse (Fälle) ausgewählt und näher untersucht:

(I) Me-PEM: Herstellung von synthetischem Erdgas (SNG) mit Wasserstoff aus einem Protonenaustausch-Membran-Elektrolyseur (PEM); dieser Fall wurde auch für die Simulation bei dynamischem Stromverbrauch verwendet.
(II) Me-AEL: Herstellung von SNG mit Wasserstoff aus einem alkalischen Elektrolyseur bei einem statischen Stromverbrauch (AEL)
(III) MeOH: Herstellung von synthetischem Methanol mit Wasserstoff aus einem AEL
(IV) H_2-MeOH: Wasserstoffsynthese mit AEL und direkter thermischer Verwertung; CO_2-Emissionen aus den Rohstoffen werden in synthetisches Methanol überführt
(V) Ref.-H_2: Wasserstoffsynthese mit einem AEL und direkte thermische Verwertung; CO_2 aus den Rohstoffen wird emittiert.

Fall (V) dient hier als Referenzfall, mit dem die Vermeidungskosten von CO_2-Emissionen berechnet werden können. Abbildung 1 zeigt ein allgemeines Ablaufschema für alle betrachteten Fälle.

Im Folgenden beschreiben und kontextualisieren wir ausgewählte Technologien, welche die Anforderungen an die jeweiligen Kohlenstoff-Kreisläufe erfüllen. Die techno-ökonomische Analyse erfolgt hierbei in drei Schritten: Mit einer Simulation in Python werden alle relevanten Stofftransporte detailliert abgebildet und deren chemischen Reaktionsprodukte je Prozessschritt berechnet. Durch dieses Vorgehen können wir vor allem Anreicherungen innerhalb von größeren Prozesskreisläufen erfassen. Parallel dazu werden alle Prozessschritte in Aspen Plus® abgebildet und anschließend auf Basis verschiedener thermodynamischer Modelle durch die DLR-eigene Software TEPET+ evaluiert. Wärmeintegration der Simulationen wird mittels TEPET+ durchgeführt. In dieser Studie betrachten wir folgende ökonomische Kennzahlen: Investitionsausgaben (CAPEX), Betriebsausgaben (OPEX) und Nettoherstellungskosten (NPC). In TEPET+ führen wir weiterhin Fallstudien und Sensitivitätsanalysen durch, um die Veränderung der ökonomischen Kennzahlen durch Variation der Prozessparameter zu erfassen.

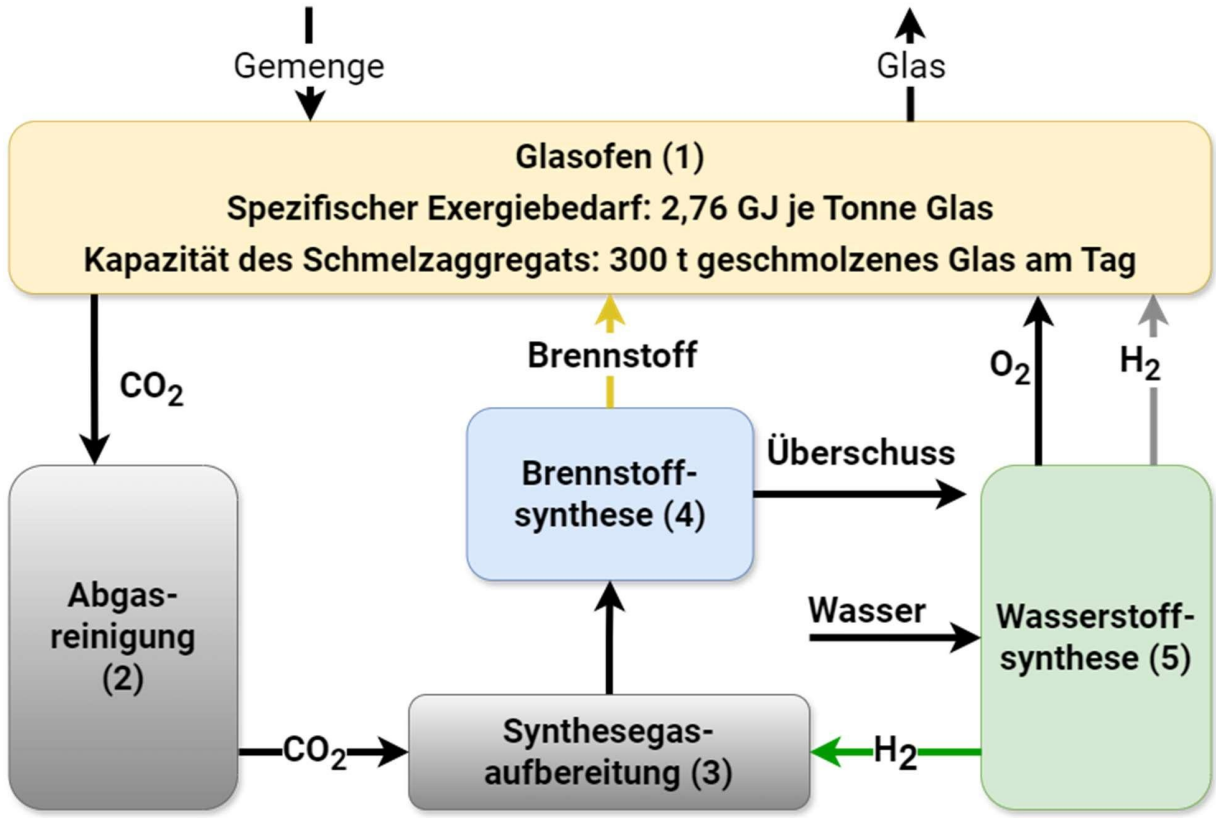

Abbildung 1: Allgemeines Prozessschema für die betrachteten Kreislaufprozesse. Schwarze Linien beschreiben Stoffströme, die in Fällen (I) bis (IV) angenommen wurden. In den Fällen (I) bis (III) wurde die Synthese eines Brennstoffs (gelb) unter Verwertung von Wasserstoff (grün) angenommen. Im Fall (IV) wird Wasserstoff direkt verbrannt (grau) und nur der CO_2-Überschuss verwertet. Im Fall (V) betrachten wir nur das Schmelzaggregat (1) und die Wasserstoffsynthese (5).

2 Modellbeschreibung

2.0 Allgemeine Eingangsparameter und Basisbedingungen

Hauptziel dieser Studie ist die Substitution von fossilem Erdgas durch einen Synthetischen Brennstoff (SynFuel) als primäre Energiequelle für den Glasofen. Mit einer typischen Anlagenlebensdauer von 15 Jahren sind Schmelzaggregate in der Glasindustrie sehr langlebig. Eine Reparatur der Schmelzwanne bei Raumtemperatur ist in dieser Zeit nicht möglich, eine Temperatur der Glasschmelze von ca. 1500°C muss das gesamte Jahr (8760 Bh) mit geringen Schwankungen beibehalten werden. Folglich ist das Hauptprodukt für die wirtschaftliche Bewertung des Projekts ein SynFuel, welches den Exergiebedarf des Glasofens (also den Bedarf an nutzbarer Wärme, vgl. 2.1) decken kann. Überschüssiges SynFuel aufgrund von CO_2-Emissionen aus dem Gemenge wurde daher in dieser Simulation als Nebenprodukt (BP) dieses Prozesses betrachtet und als fossiler Brennstoff oder Chemikalie mit einem durchschnittlichen Marktpreis verkauft. Die hierfür verwendeten Preise in Euro aus dem Jahr 2022 sind in Abschnitt 2.4 abgebildet. Weitere Parameter wie CEPCI, Lohnkosten, der festgelegte Zinssatz für die Berechnung der Nettoproduktionskosten und der nominale Lohnindex sind in Tabelle 2 angegeben.

Tabelle 2: Basisbedingungen für die ökonomische Analyse.

Basisbedingungen	
Anlagenstandort	Deutschland
Basisjahr	2022
$CEPCI_{2022}$ Index	816
Basiswährung	€
Volllaststunden (FLh)	8760 h/Jahr
Anlagenlebensdauer	15 Jahre
Zinssatz	7 %
Lohnkosten	45,1 €/h
Nominal Lohnindex (2022)	113
Exergiebedarf des Glasofens (Hauptprodukt)	2,76 GJ t^{-1}_{Glas}

In allen Modulen verwendeten wir, sofern erforderlich, Kühlwasser (KW) als Hauptkühlmedium und Mitteldruckdampf (MPS) und Hochdruckdampf (HPS) als Hauptheizmedium. Für die notwendige Druckstufe in den jeweiligen Prozessen modellierten wir bei Bedarf ergänzend Pumpen und Kompressoren. Die verwendeten physikalischen Parameter Temperatur, Druck und Wirkungsgrade sind in Tabelle 3 zusammengefasst. Die für die ökonomische Analyse benötigten allgemeinen Equipment-Modelle sind zusammen mit dem jeweilig erforderlichen Aspen Plus® - und Thermodynamischen Modell in

Tabelle 4 abgebildet.

Tabelle 3: Allgemeine Basisbedingungen für die Prozessmodellierung und -simulation.

Basisbedingungen			Literaturquellen & Anmerkungen
KW	1 bar	20 °C	Süßwasser in Deutschland
MPS	25 bar	215 °C	[33, 34]
HPS	33,45 bar	245 °C	[35]
Wärmeübertrager	ΔT_{pinch} = 10 K	Δp = 0 bar	eigene Annahme
Kompressoren Wirkungsgrad	95 % (isen.)	95 % (mech.)	eigene Annahme
Pumpen Wirkungsgrad	75 % (pump)	90 % (driver)	[36]
Dampfkreislauf Wirkungsgrad	40%		generisches Modell in TEPET+

Tabelle 4: Allgemeine Equipment- und thermodynamische Modelle in Aspen Plus®

Equipment	SNG	Syn-MeOH	Aspen Plus® Modell	Thermodynamisches Modell
Kompressoren	✓	✓	Compr	SRK
Wärmeübertrager	✓	✓	HeatX	SRK
Flashtrommel/Kühlfalle	✓	✓	Sep2	NRTL
Pumpen	✓	✓	Pump	NRTL
Membrane	✓	✓	Sep	SRK

2.1 Schmelzaggregat (Modul 1)

Ausgangspunkt unseres Modells ist ein Schmelzaggregat mit einer Tageskapazität von 300 t geschmolzenem Glas am Tag. Da Braunglas ein empfindliches Redox-Gleichgewicht aufweist und in alternativen Beheizungsverfahren des Schmelzaggregats zu Problemen führen kann, haben

wir diese Glasart für unsere Simulation ausgewählt (vgl. Tabelle 5), aber die Prozesskette ist prinzipiell von der Glassorte unabhängig. Die Zusammensetzung des Abgases beruht zum einen auf den Zersetzungsprodukten von Gemenge und Befeuerung bei Verwendung eines typischen Gemengesatzes, zum anderen auf Referenzdaten zu Schadgasgehalten im Rohgas aus Emissionsmessungen der HVG. Da die Schmelzaggregate und Abgaskanäle nicht komplett abgedichtet werden können, haben wir einen Falschluft-Anteil von 10% angenommen (zusammen mit weiteren Parametern abgebildet in Tabelle 6). Zur Erzeugung der Prozesswärme haben wir eine Oxy-Fuel-Befeuerung (100% Sauerstoff als Oxidator) der Glaswanne angenommen, da diese Technologie geringe Abgasmengen und hohe CO_2-Anteile im Abgas mit einem niedrigen spezifischen Wärmebedarf von 3 bis 3,5 $GJ_{Erdgas}\ t^{-1}_{Glas}$ (0,83 bis 0,97 $MWh_{Erdgas}\ t^{-1}_{Glas}$) kombiniert [37]. Ein Kritikpunkt der in der Literatur aufgeführten Angaben für den spezifischen Wärmebedarf bei Oxy-Fuel-Befeuerung ist die Tatsache, dass wenige Referenzanlagen existieren [37]. Daher haben wir uns für den höheren Wert von 3,5 $GJ_{Erdgas}\ t^{-1}_{Glas}$ (0,97 $MWh_{Erdgas}\ t^{-1}_{Glas}$) als Ausgangspunkt für unsere Berechnung entschieden. Unter Berücksichtigung der Wärmeverluste durch das Abgas und der Wärmeeinträge durch Vorwärmung haben wir dadurch einen Exergiebedarf von 2,76 $GJ\ t^{-1}_{Glas}$ ermittelt. Durch den deutlich höheren spezifischen Wärmebedarf einer AirFuel-Verbrennung und der ebenfalls deutlich höheren Abgasmenge haben wir von einer AirFuel-Verbrennung abgesehen, da dadurch ebenfalls deutlich höhere Kosten aufkommen würden. Ein weiterer Energieeintrag (bis zu 20%) kann, sofern erforderlich, über elektrische Zusatzheizung erfolgen. Mit einem Scherbeneinsatz von 55% ist die Recycling-Rate eher gering, sodass einerseits bessere Glasqualitäten produziert werden können, andererseits weniger Scherben dem Markt entzogen werden. Weiterhin haben wir angenommen, dass durch Vorheizen der Brennstoffe und des Sauerstoffs Energieeinsparungen vorgenommen werden. Diese Energieeinsparungen sind abhängig von dem jeweiligen Brennstoff und sind in der Auswertung der Kreislaufprozesse angegeben. Um eine vollständige Verbrennung zu ermöglichen, haben wir ein Brennstoff-Sauerstoff-verhältnis λ = 1,01 angenommen, d.h. eine leicht überstöchiometrische Verbrennung. Dies entspricht zwar nicht ganz dem Standard der heutigen Glasproduktion ($\lambda \approx 1{,}05$), ermöglicht aber eine sauerstoffarme Abluft und damit geringere Kosten in der Abgasaufbereitung.

Tabelle 5: Gemengesatz eines beispielhaften Braunglases in Gewichts-%. Abweichungen zu 100% entstehen durch Rundung der Werte.

Sand	25,3
Soda	7,5
Kalkstein	4,9
Dolomit	3,5
Feldspat	3,2
Natriumsulfat	0,1
Kohlestaub	0,1
Eisen-Pyrit	0,2
Filterstaub	0,2
Eigenscherben	15
Fremdscherben	40

Da die Glasproduktion zwar Quelle des Kohlenstoffs ist, aber CO_2 nicht das Hauptprodukt darstellt, haben wir diese zwar technologisch erfasst, jedoch auf die ökonomische Analyse der Glasproduktion verzichtet. Das Ausgangsprodukt für die ökonomische Analyse des Kreislaufs ist dadurch das Abgas aus dem Verbrennungsraum (bestehend aus den Verbrennungsprodukten des Brennstoffs zusammen mit den rohstoff- und prozessbedingten Emissionen aus der Glasschmelze) mit einer Temperatur von etwa 1450°C. Für eine weitere Nutzung der Abwärme haben wir in den Fällen I bis IV zunächst angenommen, dass die Abgastemperatur mit eingesprühtem Wasser auf die maximale Operationstemperatur des Wärmetauschers (1000°C) abgesenkt (gequencht) wird, um anschließend in Wärmetauschern auf 200°C, also oberhalb des Taupunkts der Schwefelsäure, gekühlt zu werden. Die Nutzwärme des Wärmetauschers wird für einen Dampfkreislauf verwendet. Die ökonomische Analyse für die Wärmenutzung des Abgases erfolgte gemäß Angaben in

Tabelle 4. In Fall (V) sind wir von Quenching mit Luft ausgegangen und haben keine weitere Abgasbehandlung simuliert.

Tabelle 6: Verwendete Parameter des Moduls (1) Glasofen

Basisbedingungen		Literaturquellen & Anmerkungen
Glasproduktionskapazität	300 t_{Glas}/d	55 % Scherben im Gemenge
Modellierte Glassorte	Behälterglas (braun)	Prozesskette ist weitestgehend unabhängig von Glassorte
Spezifischer Exergiebedarf	2,76 GJ t^{-1} (0,77 MWh t^{-1})	Ermittelt für Erdgas nach [37]
CO_2 aus dem Gemenge	80 kg t^{-1}_{Glas}	Entspricht 0,28 kg s^{-1}
Gemengefeuchtigkeit	2%	
Falschluft	10%$_{vol}$ des Abgases	
Sauerstoffanteil nach der Verbrennungsstrecke	1%$_{vol}$ (feuchtes Abgas)	Entspricht λ = 1,01
Betriebsdruck des Glasofens	1,1 bar	
Temperatur des Abgases bei Verlassen des Verbrennungsraums	1450°C	
Temperaturbereich der Wärmetauscher	1000°C (Eingang) 200°C (Ausgang)	
KW-bedarf Quenching	0,86 t_{KW} $MW^{-1}_{Quenching}$	Von 1450°C auf 1000°C

2.2 Abgasaufbereitung (Modul 2)

In der Abgasaufbereitung wird das 200°C warme Abgas auf die Prozesstemperatur der Stickstoffabreinigung von 40°C abgekühlt und der Großteil der Schadgase und des Wasserdampfs abgetrennt. Zwei möglichen Vorgehensweisen einer Post-Combustion Behandlung sind für die Abgasaufbereitung verbreitet:

Einerseits kann CO_2 aus dem feuchten Abgas isoliert werden, z.B. durch Swing-Adsorption Prozesse oder eine Aminwäsche [38]. Diese Verfahren gehen mit einem Verluststrom an CO_2 einher, da dieses nicht vollständig von den Trägermedien aufgenommen werden kann [39, 40, 41]. Diesen Ansatz haben wir in unserem Vorgehen ausgeschlossen, da Sulfate ein gängiges Läutermittel in der Glasproduktion sind und zu einer SO_2-Belastung von ca. 0,2%$_{vol.}$im feuchten Abgas (0,5%$_{vol}$ im trockenen Abgas) führen. In Verfahren wie der Aminwäsche führen sie jedoch zu einer starken Degradation des Trägermaterials und damit zu sehr hohen Kosten [42].

Andererseits können andere Komponenten aus dem Abgasstrom entfernt werden, z.B. durch Kondensation des Wasserdampfs. Mit steigender Komplexität des Abgases steigt dadurch auch die Länge der erforderlichen Prozesskette und damit auch potenziell die Investitionskosten. Dem gegenüber können alle problematischen Komponenten isoliert betrachtet und an die Erfordernisse der Brennstoffsynthese angepasst werden [43]. In unserem Modell haben wir für die Abgasreinigung zwei Technologien berücksichtigt: Als erste Stufe haben wir einen Nasswäscher

implementiert, um den Großteil der Abgasfeuchte zu kondensieren und den Anteil an SO_2 und Halogenide auf etwa 10 ppm_{vol} abzusenken. In der zweiten Stufe entfernen wir Stickstoff mit Hilfe eines Membranfilters (Nitrogen Removal Unit, NRU), um Anreicherungen im Kreislaufprozess zu verhindern. Diese Maßnahmen sind weitestgehend ausreichend, um CO_2 für Transport oder Speicherung zu isolieren, wobei der Sauerstoffgehalt je nach Quelle teilweise über den empfohlenen Grenzwerten liegt [44, 45]. Die Simulation von Nasswäscher und Membranfilter erfolgte nach den in Tabelle 7 angegebenen Parametern.

Tabelle 7: Aspen Plus® und Thermodynamische Modelle für die Abgasreinigung

Equipment	Aspen Plus® Modell	Thermodynamisches Modell
Nasswäscher	Heater & Flash2	SRK
Nitrogen Removal Unit (NRU)	Sep	SRK

2.2.1 Nasswäscher

Nasswäscher sind industrieller Standard für die Abgasreinigung. Sie gelten als unempfindlich und in der Lage, eine große Bandbreite an Schadgasen innerhalb eines Temperaturbereichs von 20 bis 80°C zu entfernen, aber sie neigen bei hohen Schwefelanteilen zur Korrosion [46]. Die Schadgase werden in Form eines Schlamms von dem Gas abgetrennt und erfordern eine nachträgliche Behandlung, um die Waschlösung zurückzugewinnen. In diesem Projekt war die Hauptaufgabe des Nasswäschers, SO_2 aus dem Abgas zu entfernen – hierfür eignet sich besonders eine $CaCO_3$-Waschlösung bei einem pH-Wert zwischen 5 und 7. Typischerweise werden so Schadgaswerte für SO_x, HF, HCl und Staub in der Größenordnung von 10 ppm_{vol} erzielt [47]. Die Staubabreinigung erfolgt dabei mechanisch an der Tropfenoberfläche, während SO_x und Halogenide (Hal) durch chemische Reaktion mit $CaCO_3$ abgereichert werden (vgl. Gleichung 1 und 2). Zusätzlich zu der Abtrennung von Schadstoffen dient der Nasswäscher zur Kühlung des Abgases. Um das Abgas von 200°C auf die Prozesstemperatur des Folgeprozesses (Stickstoff-sensitive Membran, 40°C) abzukühlen ist eine Kühlleistung zwischen 2.1 und 3.1 MW (je nach Prozesskette, vgl. Abschnitt 3.1.2) erforderlich. Da für das Kühlwasser eine Temperatur von 15°C angenommen wurde, ist die Kühlleistung durch den geringen Temperaturunterschied von 25°C zur Zieltemperatur des Gases (40°C) gering. Dadurch wird für diesen Schritt mit ca. 34 t MW^{-1} viel Kühlwasser benötigt; dieses Kühlwasser kann jedoch in der Aufbereitung des Schlamms wieder zurückgewonnen werden.

Tabelle 8 fasst die verwendeten Parameter des Nasswäschers wie Temperatur- und Druckniveau, Reaktionsbedingungen und Kühlwasserbedarf zusammen.

Tabelle 8: Eingangsparameter für den Nasswäscher.

Eingangsparameter Nasswäscher		Literaturquellen & Anmerkungen
Nasswäscher-Typ	Sprühwäscher ($CaCO_3$)	[47, 48]
Eingangstemperatur Abgas	200°C	Von Wärmetauscher Glasofen
Ausgangstemperatur Abgas	40°C	Prozesstemperatur NRU
Eingangstemperatur Kühlwasser	15°C	
Ausgangstemperatur Schlamm	40°C	
pH-Wert Nasswäscher	6 – 7	[48]
Kühlwasserbedarf	34 $t_{Kühlwasser}$ $MW^{-1}_{Kühlung}$	Von 200°C auf 40°C
Bedarf an $CaCO_3$	1,05 $mol_{CaCO3}/mol_{Hal+SOx}$	
Abtrennungsrate	99%	Staub, SO_x, Halogenide; [48]
Mindestanteil Schadstoff	10 ppm_{vol} (HF: 1 ppm_{vol})	[47]
Druckabfall	1,5 kPa	[48]
Reinheitsgrad Roh-CO_2	$\Sigma_{Schadgase}$: 120 ppm_{vol}	Bezogen auf trockenes Abgas

$$2\,HHal + CaCO_3 \rightleftharpoons CaHal_2 + CO_2 + H_2O \quad (1)$$

$$SO_x + CaCO_3 \rightleftharpoons CaSO_{x+1} + CO_2 \quad (2)$$

2.2.2 . Stickstoffabreicherung (Nitrogen Removal Unit, NRU)

Aufgrund der Anreicherung von Stickstoff im Kohlenstoffkreislauf durch Falschluft ist eine NRU erforderlich: Ohne eine NRU können sich im Fall von synthetischem Methan (SNG) über 20%$_{vol}$ Stickstoff im Brennstoff anreichern, während im Fall von Methanol die Synthesereaktion durch Verdrängungseffekte gestört wird. In der Industrie sind NRU auf Basis von Membrantechnologien für die Verbesserung der Erdgasqualität etabliert und können bis zu 92,75%$_{vol}$ des Stickstoffs aus dem Gasgemisch abtrennen, während CO_2 zu 99,9%$_{vol}$ im Permeat verbleibt [49, 50]. In Tabelle 9 sind die verwendeten Parameter der NRU (Druck und Abtrennungsraten) zusammengefasst.

Tabelle 9: Eingangsparameter der Abgas-Entstickung.

Eingangsparameter NRU		Literaturquellen & Anmerkungen
Entstickungsverfahren	Membranfilter	[51]
Temperaturniveau	40°C	
Abtrennungsrate N_2 (Permeat)	92,75 %$_{vol}$	[52, 53]
Verlustrate CO_2 (in Permeat)	0,01 %$_{vol}$	[52, 53]

2.3 Herstellung von hochreinem Synthesegas (Modul 3)

Während das roh-CO_2 weitestgehend den Anforderungen für CCS entspricht, reicht der Reinheitsgrad nicht für die empfindlichen Katalysatoren der Kohlenwasserstoffsynthese aus. Katalysatoren für die Methanisierung beruhen üblicherweise auf Nickel, welches auf ein Trägermaterial (häufig Al_2O_3) aufgebracht wird [54]. Für die Methanolsynthese werden mit Wasserstoff und reduzieren sowohl Sauerstoff als auch SO_x zu H_2O bzw. H_2S. Der Schwefel vergleichbare Katalysatoren auf Basis von Cu, ZnO und Al_2O_3 verwendet [55]. Beide Katalysatoren reagieren empfindlich auf Halogenide, Staub und Schwefel, sodass diese Bestandteile nicht 10 ppb_{vol} überschreiten sollten [56]. Sauerstoff ist zwar für die Reaktion weniger kritisch, limitiert aber die Effektivität der Reaktion [ebd.]. Um entsprechende Anforderungen zu erfüllen, kombinieren wir den CO_2-Eingangsstrom in einer katalysierten Hydrogenierung sowie die Halogenide werden anschließend in einem zweistufigen Schutzbett abgereichert, um ein synthesefähiges CO_2-H_2-Gemisch zu erhalten. Die zugehörigen Equipmentparameter für die Simulation sind in Tabelle 10 wiedergegeben. Tabelle 11 bildet die allgemeinen physikalischen und chemischen Parameter des Moduls (3) ab.

Tabelle 10: Equipmentparameter für das Modul (3) Synthesegas

Equipment	Aspen Plus® Modell	Thermodynamisches Modell
CO_2-Kompressor	MCompr (3-stufig)	SRK
Hydrogenierung	RCSTR & Calculator Block	SRK
Schutzbetten	RCSTR & Calculator Block	SRK

Tabelle 11: Eingangsparameter für das Modul (3) – Aufbereitung Synthesegas

Eingangsparameter		Literaturquellen & Anmerkungen
Temperaturniveau Modul (3)	260°C	Vollständige Umsetzung zu H_2S
Katalysator Hydrogenierung	Fe_2O_3 / γ-Al_3O_3	[57]
Verbrauch Al_2O_3-Schutzbett		[58]
Verbrauch ZnO-Schutzbett	$9{,}7 \cdot 10^{-5}$ kg_{ZnO} Nm^{-3}	[59]
Schadstoffanteil nach Schutzbett	10 ppb_{vol}	[59, 60]

2.3.1 Hydrogenierung

Zur Reduktion von Schwefel und Sauerstoff wird das roh-CO_2 mit Wasserstoff in einer katalytischen Reaktion zu H_2S bzw. H_2O umgewandelt (vgl. Gleichungen 3 und 4) [61]. Dieses Vorgehen ermöglicht die Abtrennung von Schwefel in dem nachgelagerten Schutzbett und die Abtrennung von H_2O durch Kondensation. Durch die exotherme Natur der Reaktion erhitzt sich das Rohgas in der Hydrogenierung; dieser Effekt wird ausgenutzt, um das Synthesegas auf die optimale Temperatur der Schutzbetten zu bringen. Um die vollständige Umsetzung der beiden Komponenten zu ermöglichen, ist ein Überschuss an Wasserstoff erforderlich. In unserer Simulation wird dies durch die Zugabe der für die SynFuel erforderlichen Menge an Wasserstoff umgesetzt.

$$SO_2 + 3\,H_2 \rightleftharpoons H_2S + 2\,H_2O \quad (3)$$

$$O_2 + 2\,H_2 \rightleftharpoons 2\,H_2O \quad (4)$$

2.3.2 ZnO- und Al_2O_3-Schutzbetten

Schutzbetten sind in der Industrie gängige und kostengünstige Verfahren, um Katalysatoren in nachgelagerten Folgeprozessen zu schützen. In dieser Simulation haben wir ein Schutzbett mit aktiviertem Aluminiumoxid eingesetzt, um Chloride und Fluoride vom Synthesegas abzutrennen. Ein derartiges System ist auch für die Fischer-Tropsch-Synthese üblich und kommerziell erhältlich [60]. Zur Entschwefelung im ppb-Bereich ist die Umsetzung nach H_2S erforderlich (s.o.), und wird industriell in Form eines ZnO-Schutzbetts eingesetzt [60]. Bei einem Temperaturniveau von 260°C ist für beide Schutzbetten eine nahezu vollständige Umsetzung von Halogeniden und Sulfiden unter hinreichenden Reaktionsgeschwindigkeiten möglich. In beiden Fällen müssen die Adsorbermaterialien (ZnO und aktiviertes Al_2O_3) regelmäßig regeneriert bzw. ersetzt werden.

2.4 Brennstoffsynthese (Modul 4)

Durch den kontinuierlichen Betrieb des Schmelzaggregats ohne Wartungspausen über einen Zeitraum von 5 bis 25 Jahren ist ein entsprechender ununterbrochener Zustrom an Brennstoffen erforderlich. In unserer Simulation haben wir uns daher für einen kontinuierlichen Prozess zur Brennstoffsynthese entschieden, um energetische Optimierungen zu ermöglichen. Für die Fälle (I) und (II) haben wir für die Methanisierung das TREMP™ Verfahren von Topsøe ausgewählt, einen vierstufigen Prozess in adiabatischen Festbettreaktoren (Absatz 2.4.1). Die Umsetzung zu Methanol in den Fällen (III) und (IV) erfolgt in einem Lurgi- Siedewasserreaktor (Absatz 2.4.2). Das molare Verhältnis von H_2 zu CO_2 wurde entsprechend dem stöchiometrischen Verhältnis der Reaktion eingestellt, d.h. 4:1 für SNG und 3:1 für Syn-MeOH. Die Prozessparameter Temperatur,

Druck und Wasserstoffrate, sowie die Grenzwerte für Schadstoffbelastung und die Katalysatormaterialien, sind in Tabelle 13 abgebildet. Die zugehörigen Equipmentparameter der Simulation sind in Tabelle 12 abgebildet.

Tabelle 12: Equipmentparameter für die Simulation der Brennstoffsynthese.

Equipment	SNG	Syn-MeOH	Aspen Plus® Modell	Thermodynamisches Modell
TREMP™-Reaktoren (2.4.1)	✓		RPlug als Festbettreaktor	SRK
Lurgi-Reaktor (2.4.2)		✓	RPlug als Rohrbündelreaktor	SRK
Destillationskolonne (2.4.2)		✓	RadFrac	NRTL

2.4.1 Methanisierung

Das TREMP™ Verfahren kombiniert eine effiziente Methanisierung mit der Möglichkeit zur Energierückgewinnung [62]. In einem drei- bis vierstufigen Prozess werden die hohen Umsetzungsgeschwindigkeiten bei hohen Temperaturen mit den hohen Umsatzraten bei geringeren Temperaturen ausgenutzt. Für die Methanisierung sind mehrere parallel ablaufende, exotherme Reaktionsschritte verantwortlich (siehe Gleichungen 6 bis 8). Parallel dazu findet zusätzlich der Wasser-Gas-Shift statt (Gleichung 5; Gleichgewichtsreaktion). Durch die deutlich exotherme Natur der Reaktion und das Auftreten von Reaktionswasser ist nach jedem Prozessschritt eine Kühlung erforderlich. Für die effiziente Umsetzung zu Methan haben wir Temperaturen von 700°C,

Tabelle 13: Eingangsparameter für die Brennstoffsynthese

Basisbedingungen	SNG	MeOH	Literaturquellen & Anmerkungen
Edukte Molverhältnis (H_2:CO_2)	4:1	3:1	stöchiometrisches Verhältnis der Reaktion
Temperatur Eingang	720°C	230°C	
Temperatur Ausgang	250°C	240°C	
Synthesedruck	3 MPa	8 MPa	
Katalysatormaterial	Ni-basiert	$Cu/ZnO/Al_2O_3$	[63] (SNG) / [64] (MeOH)
Toleranz Halogenide, H_2S, Staub	100 ppb_{vol}	100 ppb_{vol}	[65]
Toleranz Sauerstoff	10 ppm_{vol}	10 ppm_{vol}	[65]
Purgation	0%	16,2%	Nur Methanolsynthese

530°C, 400°C und 420°C für die jeweiligen Prozessschritte angenommen. Dies führt zu Umsetzungsraten (gesamt) von 69% nach Stufe 1, 88% nach Stufe 2, 92% nach Stufe 3 und 97% nach Stufe 4. In

Tabelle 14 ist die modellierte Zusammensetzung des SNG beschrieben.

$$CO_2 + H_2 \rightleftharpoons CO + H_2O \qquad \Delta H^0 = \quad 41{,}2\, kJ/mol \qquad (5)$$

$$2CO + 2H_2 \rightarrow CH_4 + CO_2 \qquad \Delta H^0 = -247{,}3\, kJ/mol \qquad (6)$$

$$CO + 3H_2 \rightarrow CH_4 + H_2O \qquad \Delta H^0 = -206{,}2\, kJ/mol \qquad (7)$$

$$CO_2 + 4H_2 \rightarrow CH_4 + 2H_2O \qquad \Delta H^0 = -165{,}0\, kJ/mol \qquad (8)$$

Tabelle 14: SNG-Zusammensetzung in $\%_{vol}$. Abweichungen zu 100% entstehen durch Rundung der Werte.

CH_4	94,51
CO	0,03
CO_2	1,22
H_2	3,45
O_2	0,70
N_2, N_2O	<0.01

Tabelle 15: Zusammensetzung des synthetischen Methanols in $\%_{vol}$. Abweichungen zu 100% entstehen durch Rundung der Werte.

CH_3OH	97,26
CO	<0,01
CO_2	0,97
H_2	<0,01
H_2O	1,77
N_2, N_2O	<0,01

2.4.2 Methanolsynthese

In der industriellen Methanolsynthese sind zwei Reaktortypen besonders häufig vertreten. Adiabatische Festbettreaktoren (in dieser Simulation nicht verwendet) operieren üblicherweise mit vorgeheiztem Synthesegas und mehreren Katalysatorbetten, welche im Zwischenraum direkt oder indirekt gekühlt werden. Demgegenüber bestehen polytrophe Reaktoren aus einem mit Katalysator gefüllten Rohrbündel, im Aufbau vergleichbar mit einem Rohrbündelwärmeübertrager [66].

Der Lurgi-Siedebettreaktor kombiniert einen polytrophe Reaktoren mit einem Wärmetauscher zur Vorwärmung. Das Synthesegas fließt hierbei durch mit einem Katalysator befüllte Rohre und wird von Wasser am Siedepunkt unter Dampferzeugung gekühlt [35]. Derartige Reaktoren ermöglichen daher eine effizientere Wärmenutzung und sind zeitgleich gut geeignet für

Synthesegase mit einem hohen CO_2-Anteil [66]. Aus diesen Gründen haben wir uns in unserer Simulation für den Lurgi-Aufbau entschieden. Die Umsetzung von CO_2 zu Methanol ist in den Gleichungen 9 und 10 beschrieben [66]. Parallel findet die Wassergas-Shift-Reaktion statt (Gleichung 5). Das rohe Produkt wird anschließend destilliert und so auf eine Reinheit von 97,26% Methanol gebracht.

Tabelle 15 zeigt die modellierte Zusammensetzung des synthetischen Methanols.

$$CO + 2H_2 \rightarrow C\mathrm{H_3}OH \qquad \Delta H^0 = -90{,}5\,kJ/mol \qquad (9)$$

$$CO_2 + 3H_2 \rightarrow C\mathrm{H_3}OH + H_2O \qquad \Delta H^0 = -49{,}5\,kJ/mol \qquad (10)$$

Die Lurgi-Reaktion verläuft in einen Kreislaufprozess und ermöglicht somit die Ansammlung gasförmiger Nebenbestandteile. Daher wird ein Teil des Reaktionsgases (10%) in einer Purgation abgetrennt und für die Synthese verworfen. Damit an dieser Stelle keine CO_2-Emissionen entstehen, haben wir diesen Purge-Strom mit dem vorgewärmten Methanol gemischt, welcher in den Glasofen eingebracht wird. Weiterhin können gasförmige Bestandteile aus der Destillation, welche nicht wieder kondensieren, mit dem Purge-Strom vermengt werden (6,2% des Gesamtanteils). Durch dieses Vorgehen werden 16,2% des Syntheseprodukts in Rohform in die Glasschmelze als Brennstoff eingebracht und trägt geringfügig zur Wärmegewinnung bei. Die Zusammensetzung dieses Purge-Stroms ist in Tabelle 16 abgebildet.

Tabelle 16: Purge-Strom, welcher als Nebenprodukt der Methanolsynthese anfällt und mit dem Brennstoff vor Einbringen in das Schmelzaggregats vorgemischt wird. Abweichungen zu 100% entstehen durch Rundung der Werte.

Bestandteil	Anteil in $\%_{vol}$
H_2	53,26
CO_2	20,06
CH_3OH	16,23
N_2	6,05
H_2O	4,40
CO	<0,01
N_2O	<0,01

2.5 Wasserstoffsynthese (Modul 5)

Wasserstoff ist die Grundlage für die Erzeugung von Brennstoff oder kann alternativ auch selbst als Brennstoff verwendet werden. Für die Synthese von Wasserstoff sind verschiedene Verfahren möglich, wie z.B. Fermentation von biologischen Abfällen, Fermentationsprozesse oder die elektrolytische Spaltung von Wasser [67]. Durch die begrenzte Verfügbarkeit von biologischen Wasserstoffträgern und den hohen Flächenbedarf bei der Wasserstoffsynthese haben wir uns in dieser Studie für elektrolytisch hergestellten Wasserstoff entschieden. Drei Elektrolyse-Technologien haben wir in Betracht gezogen: Die Alkalische Elektrolyse (AEL), die Protonenaustausch-Membran-Technologie (PEM) und die Hochtemperatur-Elektrolyse durch eine Festoxid-Elektrolyseurzelle (solid oxide electrolysis cell, SOEC). Während PEM im MW-Maßstab bereits verfügbar ist (TLR 9) und AEL sogar im GW-Maßstab weite Verbreitung finden, sind SOEC bisher aber noch nicht ausreichend verfügbar (TLR < 8), sodass wir diese Technologie nicht in unsere techno-ökonomische Betrachtung aufgenommen haben.

2.5.1 Vergleich von AEL mit PEM

AEL ist eine etablierte Elektrolysetechnologie und wird bereits seit den 1920er Jahren im großen Maßstab genutzt [68]. Im Vergleich zu PEM zeichnet sich AEL durch geringere Investitionskosten und einen etwas höheren Wirkungsgrad aus [68, 69]. Für den dynamischen Betrieb ist die AEL durch höhere Anlaufzeiten aufgrund des kalten Standby etwas schlechter geeignet. Dagegen heben sich PEM-Elektrolyseure durch ihre Flexibilität hervor und sind daher besonders für einen dynamischen Betrieb der Elektrolyse geeignet, z.B. durch direkte Verbindung von volatiler erneuerbarer Stromproduktion mit der Elektrolyse [70, 71]. Tabelle 17 zeigt die wichtigsten Parameter der jeweiligen Elektrolysetechnologien in der Übersicht. Die Simulation des Elektrolyseurs erfolgte nach einem Black-Box-Modell, das aus Heater, Pump, Sep, und RStoic besteht, und mit SRK thermodynamischen Modell simuliert wurde.

Tabelle 17: Berücksichtigte Parameter bei der Auswahl der Elektrolysetechnologie

Parameter	PEM	AEL	Literaturquellen & Anmerkungen
Energieeffizienz (LHV_{H2} h^{-1} / P_{el})	51%	53,3%	[72, 73]
Anfahrzeit	Minuten	1 h	[74, 75]
H_2 aus dem Elektrolyseur	30 bar	30 bar	mögliches Druckniveau
	80°C	80 °C	mögliches Temperaturniveau

2.5.2 Eingangsparameter für die statische Elektrolyse

Für den statischen Betrieb der Elektrolyseure sind wir von einer konstanten Verfügbarkeit von elektrischer Energie ausgegangen. Da der Energiepreis in den letzten Jahren starken Schwankungen unterlag (vgl. Abbildung 2), haben wir uns für einen Strompreis von 60 € MWh^{-1} (incl. Zuschläge wie EEG-Umlage, Herkunftszertifikate etc.) als Vergleichsgröße entschieden. Dieser Strompreis orientiert sich an dem von der Politik erwarteten langfristigen Durchschnittstrompreis [76], während 250 € MWh^{-1} als oberes Limit diente, vergleichbar mit den hohen Strompreisen von 2022, welche als Folge des Überfalls von Russland auf die Ukraine auftraten. Die Simulation erfolgte anschließend mit den in Tabelle 17 angegebenen Wirkungsgraden.

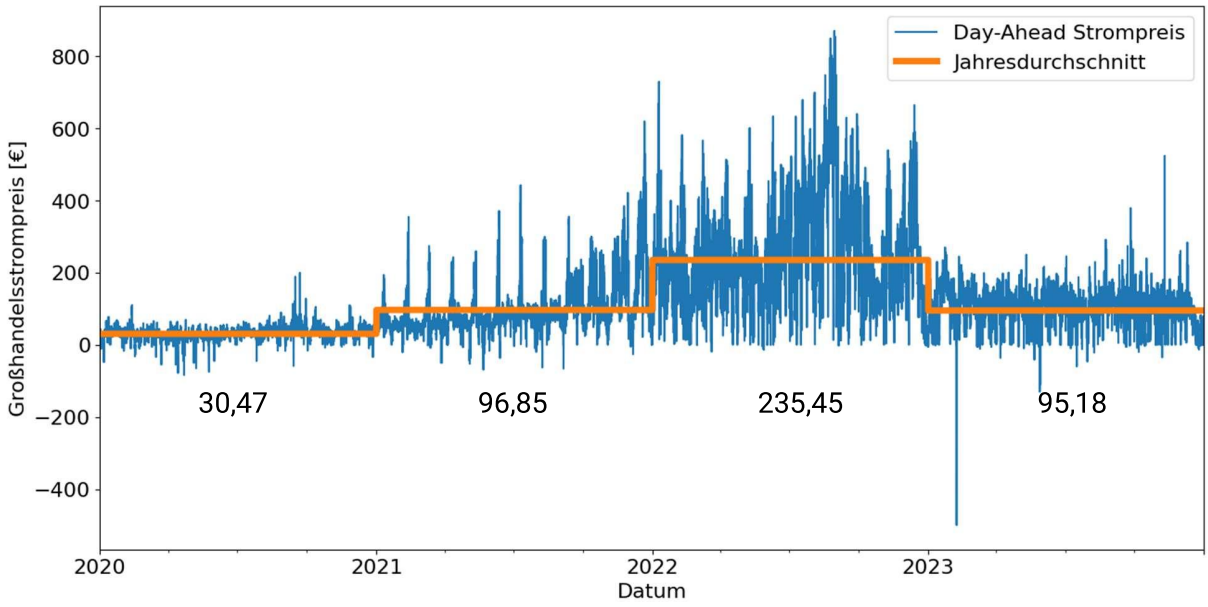

Abbildung 2: Großhandelspreise an der Day-Ahead Strombörse von 2020 bis 2023 nach [77].

2.5.3 Dynamische Strombeschaffung mit PEM-Elektrolyseur

Um die Vorteile der PEM maximal zu nutzen, haben wir die Simulation auf einen dynamischen Betrieb angepasst. Als Referenz für einen dynamischen Strommarkt haben wir die Daten des Day-Ahead-Markts der Strombörse in Leipzig für die Jahre 2020 bis 2022 verwendet. Diese werden durch die Bundesnetzagentur zur Verfügung gestellt und ermöglichen so den Betrieb einer Elektrolyse mit auf 24 Stunden in die Zukunft begrenzter Strompreisprognose [77].

Um einen dynamischen Betrieb zu ermöglichen, haben wir die Dimensionierung der Elektrolyseure angepasst, d.h. die Produktion von Wasserstoff über den kontinuierlichen Bedarf der

Brennstoffsynthese skaliert. Zusätzlich ermöglichen Wasserstoffspeicher ein Aussetzen des Elektrolyseurs über einen begrenzten Zeitraum. Die aktuelle Speicherkapazität (skaliert auf den Verbrauch der Brennstoffsynthese je Stunde) wird in diesem Fall mit S_{ist} gekennzeichnet, bei einer maximalen Kapazität S_{max}. Für die Analyse des dynamischen Betriebs haben wir einen Algorithmus entwickelt, welcher den durchschnittlichen Strompreis über den betrachteten Zeitraum mit dem realisierten Strompreis vergleicht und die Elektrolyseurleistung p an die jeweiligen Anforderungen anpasst (siehe Abbildung 3). Dabei beschreibt p_{max} die maximal mögliche Elektrolyseurleistung und p_0 die Standby-Leistung. Bei hohem Strompreis ermöglichen wir so ein strategisches Ausschalten der Elektrolyse, während die Speicher die kontinuierliche Synthese des Brennstoffs gewährleisten. In einer zweiten Ebene stellen wir weiterhin sicher, dass die Speicher weder über ihr Limit gefüllt noch unter Leerstand verbraucht werden können.

Als Kriterium für einen niedrigen Strompreis haben wir verschiedene Verfahren miteinander verglichen: Identifikation des maximal lohnenswerten Strompreises $K_{ökon}$ durch den (a) Day-Ahead-Median; (b) Day-Ahead-Mittelwert; (c) Median der letzten Woche; (d) Mittelwert der letzten Woche; (e) das Verhältnis von Speicherfüllstand zu der Differenz von höchstem zu niedrigstem Strompreis (Day-Ahead, siehe Gleichung 11). Dabei sind K_{min} und K_{max} das jeweilige Minimum bzw. Maximum des Strompreises innerhalb der nächsten 24 Stunden, während S_{ist} und S_{max} den jeweiligen Speicherstand beschreiben. Der so ermittelten Referenzwert wurde anschließend mit einem empirischen Faktor von 1,2 multipliziert, da dies in allen Versuchsreihen zu einem besseren Ergebnis führte.

$$K_{\text{ökon}} = (K_{max} - K_{\min}) \bullet (1 + K_{min} + \left(\frac{S_{ist}}{S_{max}}\right) \tag{11}$$

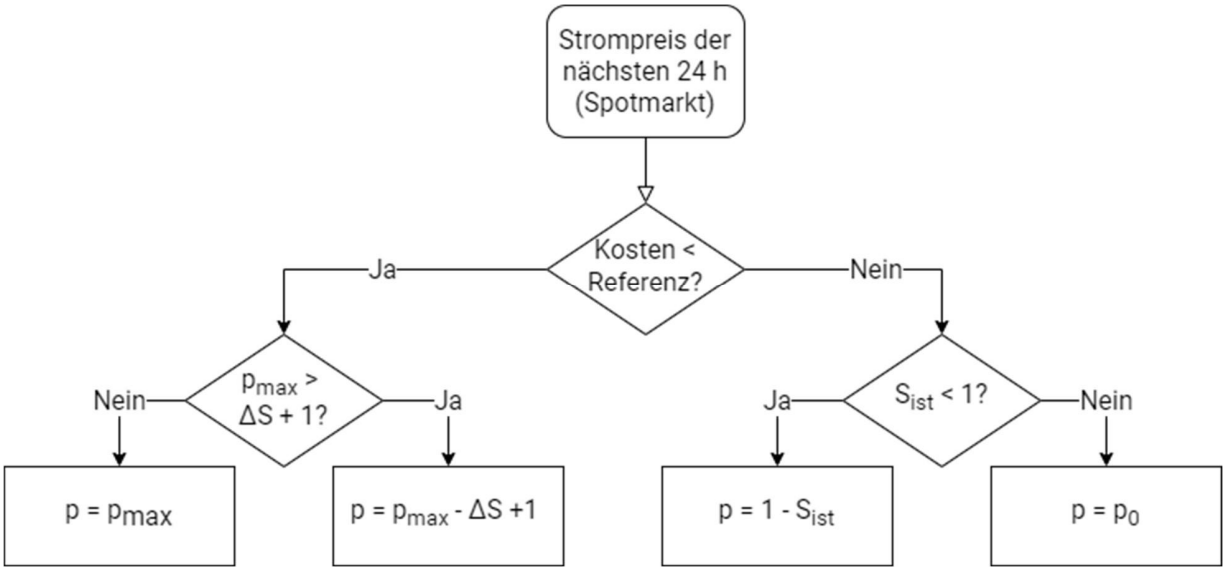

Abbildung 3: Algorithmus zur Bestimmung der günstigsten Strompreise in Abhängigkeit zur vorhandenen Speicherkapazität

Mit Hilfe des oben beschriebenen Algorithmus haben wir die Daten der Bundesnetzagentur (Großhandelspreise für Strom am Day-Ahead-Markt) analysiert, um Potentiale für die Einsparung von Stromkosten zu evaluieren. Dabei war der Ausgangspunkt der dynamische Betrieb des PEM-Elektrolyseurs unter Speicherung von Wasserstoff (mit einer anschließenden Verwertung durch eine Methanisierung), da sowohl die Glasproduktion als auch die Methanisierung als kontinuierliche Verfahren nicht für einen dynamischen Betrieb geeignet sind. Als mögliche Dimensionen wurden die quantitative Auslegung des Elektrolyseurs (*Dimensionierung*) in Bezug zum Normwert und die *Speicherkapazität* von Wasserstoffspeichern untersucht. Dabei wurden der Parameter *Dimensionierung* von 100% über 125%, 150%, 175% und 200% variiert, und der Parameter *Speicherkapazität* für Speicher über 1, 2, 4, 6 und 12 Stunden. Um die Konsistenz der Ergebnisse zu gewährleisten, wurden die Jahre 2020 bis 2023 untersucht. Zusätzlich zu den hier beschriebenen Angaben haben wir angenommen, dass 1% der Nennleistung durch den Elektrolyseur verbraucht wird, wenn er im Standby betrieben wird. Bei der Kompression von Wasserstoff haben wir weiterhin einen Energieverlust von 10% angenommen.

2.5.4 Parameter für die ökonomische Analyse

In der ökonomischen Analyse werden 3 wirtschaftlichen Kennzahlen betrachtet, nämlich Investitionsausgaben (CAPEX), Betriebsausgaben (OPEX), und Nettoherstellungskosten (NPC). Um CAPEX zu berechnen, sind die Kostenfunktionen der Komponenten erforderlich, die von der jeweiligen Auslegungsgröße abhängen, z.B. Wärmeübertragungsfläche für Wärmeübertrager, elektrische Leistung für Elektrolyseur, Kompressoren und Pumpen, usw. Tabelle 32 und

Tabelle 33 (im Anhang) zeigen die Kostenfunktionen, auf dessen Basis CAPEX und OPEX berechnet werden. Die angewandte Methodik entspricht einer Genauigkeit von ±30% nach dem AACE (Association for the Advancement of Cost Engineering) Standard in der Klasse 3 und 4 [33]. Weitere Erläuterungen zum Thema CAPEX, OPEX und NPC befindet sich im Anhang.

OPEX besteht aus direkten und indirekten OPEX. Die direkten OPEX decken alle Kosten für die Rohstoffe und Betriebsmittel der Anlage ab (siehe Tabelle 18). Für den elektrischen Strom haben wir als wichtigsten Rohstoff einen Preis von 60 € MWh^{-1}_{el}, nach dem von der Politik erwarteten langfristigen Durchschnittstrompreis [76]. Der durchschnittliche deutsche Day-Ahead Strompreis 2022 betrugt dagegen etwas unter 250 € MWh^{-1}_{el}, also etwas mehr als das Vierfache des betrachteten Werts. Daher haben wir zusätzlich in einer Sensitivitätsanalyse die Entwicklung der ökonomischen Parameter in Abhängigkeit zum Strompreis betrachtet. Die Betriebsmittelkosten stammen aus der TEPET+ Datenbank ([33, 34]). Für die H_2-Erzeugung mittels des Elektrolyseurs ist deionisiertes Wasser erforderlich, weil die Ionen im Wasser die Elektroden beschädigen können. Die zugehörigen Kosten stammen aus Vorbehandlungsschritten, wie Filtration, Koagulation, Flockung, Belüftung, Umkehrosmose und Ionenaustausch. Die daraus resultierende Qualität ist vergleichbar mit Kesselspeisewasser (Boiler-feed water). In der Simulation dient Kühlwasser (KW) als das Hauptkühlungsmittel, solange keine Wärmeintegration für jeweilige Komponenten möglich ist. Wegen niedrigerer Qualitätsanforderung und wenigerer Vorbehandlungsschritte liegen die Kosten für KW deutlich unter den Kosten für deionisiertes Wasser. Die Abwassernachbehandlung wird in dieser Studie nicht betrachtet. Das Abwasser wird aber bepreist, damit die Nachbehandlungskosten in der ökonomischen Analyse berücksichtigt sind. Als Integrations-Optionen werden Fernwärme (FW) und Dampfkreislauf (DKL) berücksichtigt, um die Abwärme durch Wärmeintegration zurückzugewinnen. Wir haben den Marktpreis für die Katalysatoren als Kosten angenommen. Für den Brennstoff-Überschuss haben wir ebenfalls marktübliche Preise für fossil-basierten Brennstoff angenommen, in diesem Fall für das Jahr 2022. Die indirekten OPEX umfassen alle zusätzlichen Ausgaben, die nicht direkt mit der Anlagenproduktionskapazität zusammenhängen, d.h. Überwachung, Wartung, Gemeinkosten usw. Die implementierten indirekten OPEX-Kostenfaktoren basieren auf der Arbeit von Peters et al. [78].

Tabelle 18: Die Kosten für Rohstoffe und Betriebsmittel (direkte OPEX).

Rohstoffe & Betriebsmittel	€/[Einheit]	Quelle
Strom [MWh_{el}]	60-250	
Deionisiertes Wasser [m^3]	3.23	[33, 34]
Kühlwasser [1000 m^3]	3	[33, 34]

Abwasser [m³]	1.46	[33, 34]
Fernwärme [kWh]	0,064	[31, 32]
Ni-basierter SNG-Katalysator [kg]	30	[79] (Marktpreis)
Cu-basierter Syn-MeOH-Katalysator [kg]	95.24	[80] (Marktpreis)
ZnO Katalysator Schutzbetten [kg]	3	[34]
Durchschnitts-Marktpreis Nebenprodukt [MWh]		fossil-basiert, 2022
SNG / Natural Gas EU Dutch TTF	132	[81]
Syn-MeOH / Methanol MMSA (USA & Rotterdam)	76	[82]

3 Ergebnisse

In diesem Kapitel analysieren wir die technischen, ökonomischen und ökologischen Simulationsergebnisse. Wir vergleichen alle 5 definierten Fälle miteinander, um die ideale techno-ökonomische Leistung zu ermitteln. Eine Sensitivitätsanalyse zeigt die Auswirkungen des Strompreises auf die Nettoherstellungskosten (NPC) und CO_2-Zertifikate auf den Referenzfall (Ref-H2). Anschließend bewerten wir in der ökologischen Analyse die Kreisläufe in ökologischer Hinsicht.

3.1 Technische Analyse

In diesem Abschnitt diskutieren wir die Einordnung des TRL (Definition siehe Anhang C) der Komponente, die Wärmebetrachtung und Prozesswirkungsgrade (Leistung-zu-Brennstoff, Wasserstoff-zu-Brennstoff) der Prozesskreisläufe.

3.1.1 Einordnung des Technischen Reifegrads (technical readiness level, TRL)

Eine grundlegende Anforderung an die Prozesskette war die technische Reife der jeweiligen Prozessschritte. Die eingesetzten Technologien der Schmelzanlage (1), nämlich Quenching und Abgaskühlung zwischen 1000°C und 200°C sind industriell verfügbar. Während Quenching nach heutigem Standard eher mit Luft durchgeführt wird, um Wasser zu sparen, ist das Eindüsen von Wasser in das heiße Abgas unproblematisch. Auch die Abgaskühlung ist umsetzbar; hier ist aber auf eine Abreinigung von Feststoffen aufgrund der hohen Staubbelastung im Abgas zu achten. Dadurch schätzen wir den TRL für beide Technologien als hoch ein (9).

Die in der Abgasreinigung (2) eingesetzten Technologien (Nasswäscher und Stickstoff-Membranfilter) werden ebenfalls bereits großindustriell eingesetzt. In beiden Fällen wurden die Technologien jedoch noch nicht flächendeckend in der Glasindustrie eingesetzt. Einzelne Berichte zum Einsatz von Nasswäschern in der Glasindustrie Deutschlands sind zwar bekannt, aber für die bisherigen Anforderungen an die Abgasreinigung war der Einsatz bisher nicht erforderlich. Stickstoffsensitive Membranen sind in deutlich größerem Maßstab in der Erdgasgewinnung im Einsatz, weniger aber zur Behandlung von CO_2-reichem Abgas. Durch die weite Verbreitung der Technologien, aber die geringe Erfahrung in der Glasindustrie, schätzen wir den Reifegrad für diesen Fall auf Stufe 8 ein.

Zur Aufbereitung von Synthesegas (3) haben wir den Einsatz von Schutzbetten sowie eine Hydrogenierung angenommen. Diese Verfahren sind aus der Fischer-Tropsch-Synthese bekannt und wurden bereits vielfach in der Schwerölindustrie erprobt. Den Reifegrad schätzen wir, aufgrund der Ähnlichkeit der Ausgangsprodukte, auf Stufe 9 ein.

Die in den Modulen (4) eingesetzten Verfahren der Brennstoffsynthese sind bereits gut untersucht. In dem hier betrachteten Maßstab ist die Technologie als etabliert (Stufe 9) einzuschätzen. Auch die Technologien für Elektrolyseure (5) sind bereits gut untersucht und haben in dem hier verwendeten Maßstab einen hohen Reifegrad (Stufe 9).

3.1.2 Wärmebetrachtung

Die Wärmebetrachtung umfasst alle Stoffströme, die innerhalb der Prozesskette eine Temperaturänderung erfahren. Da sowohl die Verbrennung des SynFuel als auch die Brennstoffsynthese stark exotherm sind, ist eine Kühlung der entsprechenden Produktströme erforderlich. Für das Abgas des Schmelzaggregat bedeutet dies ein Abkühlen in drei Prozessschritten, nämlich Quenching, Abkühlen im Wärmetauscher mit Dampfkreislauf und Nasswäscher. In der Brennstoffsynthese erfolgt die Kühlung in Form einer Kühlfalle (KF) nach der Synthese sowie innerhalb des Syntheseprozesses mit Kühlwasser (KW). Ein Teil der Prozesswärme (PW) kann für die Prozesskette genutzt werden: Zum einen ist die Vorwärmung (VW) des Brennstoffs auf ca. 500°C und des Oxidators auf 410°C durch direkte Kopplung an Wärmeübertrager (WÜ) möglich. Zum anderen kann die Abwärme für die Erwärmung des gereinigten Abgases nach Modul (2) für die Aufbereitung von Synthesegas genutzt werden (260°C). Der größte Teil der Wärmenutzung erfolgt über Dampfkreisläufe (DKL) beim Abkühlen des Roh-Abgases in Modul (1) und in der Methan-Synthese (Fall I und II) des Moduls (3). Für die übrige Wärme haben wir die Erzeugung von Fernwärme (FW) vorgesehen. Tabelle 19 zeigt die Übersicht aller Prozessschritte mit Wärmeaufnahme und -Abgabe.

Als Ergebnis der Wärmeintegration werden die zusammengesetzten Kurven der Prozesskreisläufe gezeigt. Die Wärmeintegration erfolgt durch die Annäherung der Pinch-Temperatur, die als der Mindest-Temperaturunterschied zwischen den heißen und kalten Strömen im Prozess definiert ist. In dieser Analyse liegt die Pinch-Temperatur bei 10 K. Die Wärmeübertrager, die passende Enthalpie-Mengen und Temperatur-Niveaus bzw. -Unterschiede haben, werden integriert. Die restliche Prozesswärme kann mithilfe der externen Integration-Optionen abgedeckt werden, u.a. DKL, FW und KW. Diese Strategie ermöglicht eine optimierte Wärmerückgewinnung im Prozesskreislauf. Da die Brennstoffsynthesen exotherm sind, haben die Prozesskreisläufe viel Abwärme und dementsprechend mehr Kühlungs- als Heizbedarf. Der Referenzfall (V) hat keine Möglichkeit zur Wärmeintegration, weil keine Brennstoffsynthese implementiert wird.

Tabelle 19: Übersicht über alle Wärmeleistungen nach Prozessschritt. Die Prozesswärme der Brennstoffsynthese (var) liegt für Fälle I + II bei 750°C auf 250°C und für Fälle III + IV bei 250°C auf 240 °C.

Modul / Stoffstrom	Temperatur		Wärmeleistung [MW]					Nutzungs-konzept
	Eingang	Ausgang	I	II	III	IV	V	
(1) Quenching (Abgas)	1450°C	1000°C	1,7	1,7	2,3	2,0	k. A.	Nicht möglich
(1) Kühlung (Abgas)	1000°C	200°C	3,6	3,6	4,7	4,0	k. A.	DKL
(2) Nasswäscher (Abgas)	200°C	40°C	2,2	2,2	2,9	3,0	k. A.	Nicht möglich
(4) PW Synthese	var.	var.	3,9	3,9	1,6	0,6	k. A.	DKL, WÜ
(4) PW Reaktorprodukte	240°C	115°C	k. A.	k. A.	3,6	1,2	k. A.	FW, KW
(4) KF Synthese	var.	30°C	4,1	4,1	2,6	0,9	k. A.	FW, KW
(4) Kondensator	60 °C	60 °C	k. A.	k. A.	2,1	0,6	k. A.	KW
(1) VW SynFuel	30°C	410°C	0,7	0,7	1,9	1,1	1,1	WÜ
(1) VW Oxidator	25°C	500°C	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	WÜ
(3) VW CO_2	40°C	260°C	0,2	0,2	0,2	0,1	k. A.	WÜ
(3) VW Wasserstoff	80°C	260°C	0,5	0,5	0,4	0,1	k. A.	WÜ
(4) Reboiler	20°C	115°C	k. A.	k. A.	1,9	0,5	k. A.	WÜ
(4) Reaktor-Edukte	75°C	230°C	k. A.	k. A.	3,6	1,2	k. A.	WÜ
(5) PW Elektrolyseur	20°C	80°C	0,5	0,5	0,5	0,1	0,1	WÜ

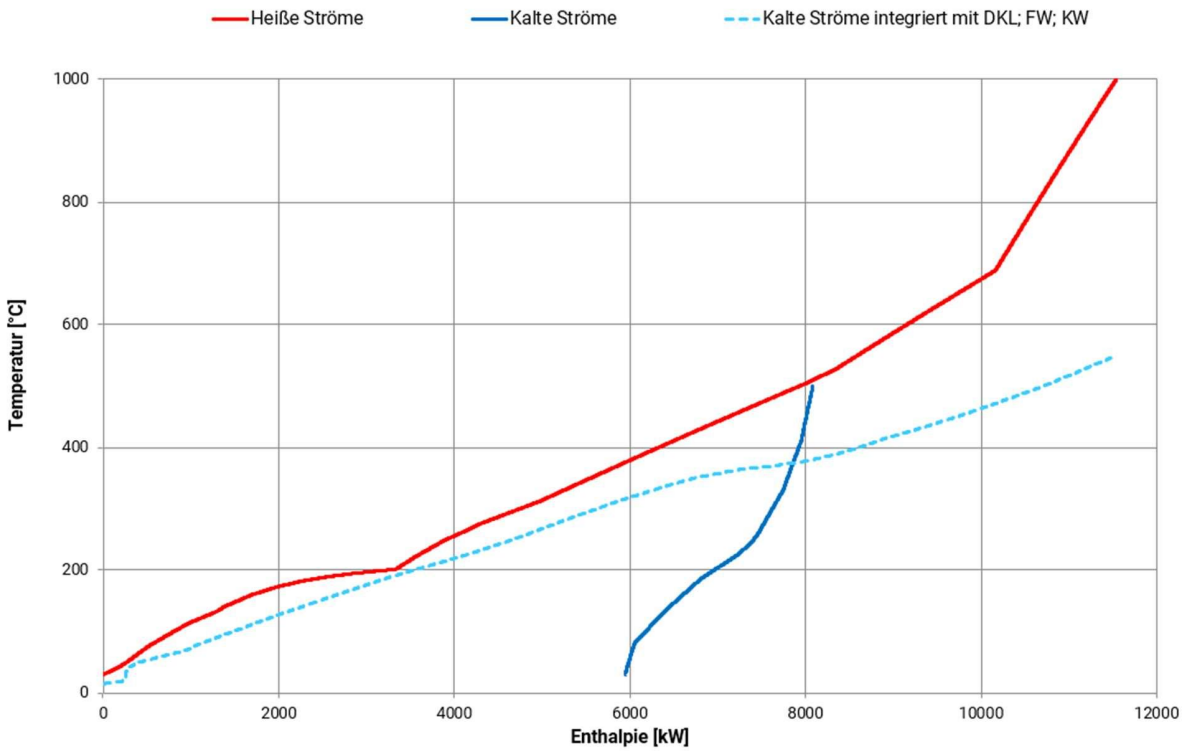

Abbildung 4: Zusammengesetzte Kurven der Fälle I (Me-PEM) und II (Me-AEL) mit Integration-Optionen: Dampfkreislauf (DKL), Fernwärme (FW), und Kühlwasser (KW)

Die Methan-Fälle (I) und (II) haben vernachlässigbar unterschiedliche Kurven, weil sich nur die Elektrolyseur-Technologie unterscheiden und die verfügbare Prozesswärme aus der gleichen SNG-Synthese kommt (Abbildung 4). Insgesamt beträgt in Methan-Fällen die Enthalpie der heißen Ströme 11,7 MW_{th} (rote Linie), und der kalten Ströme 2,3 MW_{th} (blaue Linie). Die Abwärme von 9,4 MW_{th} wird mit DKL, FW, und KW abgedeckt. Die durchgestrichene hellblaue Linie ist die integrierte kalte zusammengesetzte Kurve. Nach der Wärmeintegration verschiebt sich der Pinch-Punkt von 492 °C auf 193 °C.

Abbildung 5 zeigt, dass der Fall III (MeOH-AEL) eine Enthalpie von 14,6 MW_{th} in den heißen Strömen aufweist, die kalten Ströme eine Enthalpie von 8,9 MW_{th}. Wegen des Wärmebedarfs der Destillationskolonne beträgt die Abwärme 5,7 MW_{th} und ist damit niedriger als die Abwärme in den Methan-Fällen. Diese Abwärme wird mit DKL, FW, und KW abgedeckt. Nach der Wärmeintegration verschiebt sich der Pinch-Punkt von 492 °C auf 115 °C.

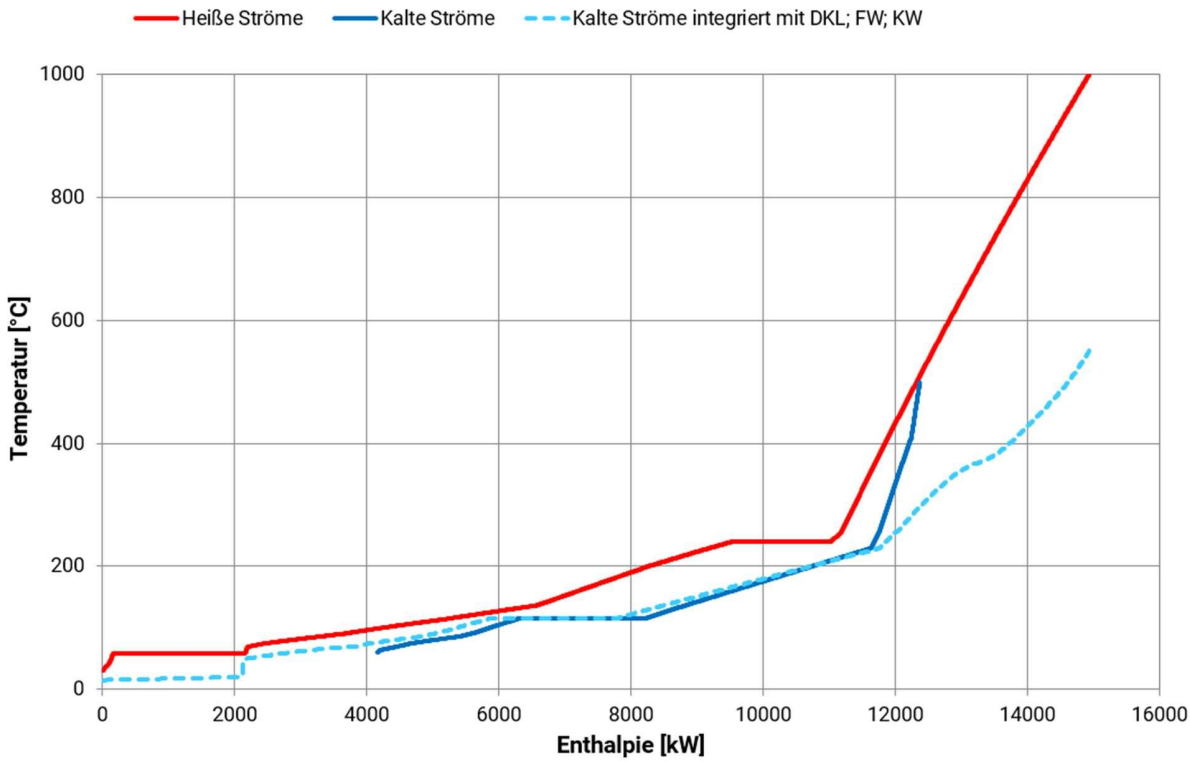

Abbildung 5: Zusammengesetzte Kurven des Falls (III) MeOH-AEL mit Integration-Optionen: Dampfkreislauf (DKL), Fernwärme (FW), und Kühlwasser (KW).

Da die Brennstoffsynthese nur weniger als die halbe Produktionskapazität des Falls (III), hat der Fall (IV) H_2/MeOH generell niedrigere Enthalpie-Flüsse (Abbildung 6). Insgesamt beträgt die Enthalpie der heißen Ströme 7,3 MW_{th} und die der kalten Ströme 3,5 MW_{th}. Die restliche Abwärme mit 3.8 MW_{th} wird durch DKL, FW, und KW abgedeckt. Nach der Wärmeintegration verschiebt sich der Pinch-Punkt von 496 °C auf 232 °C.

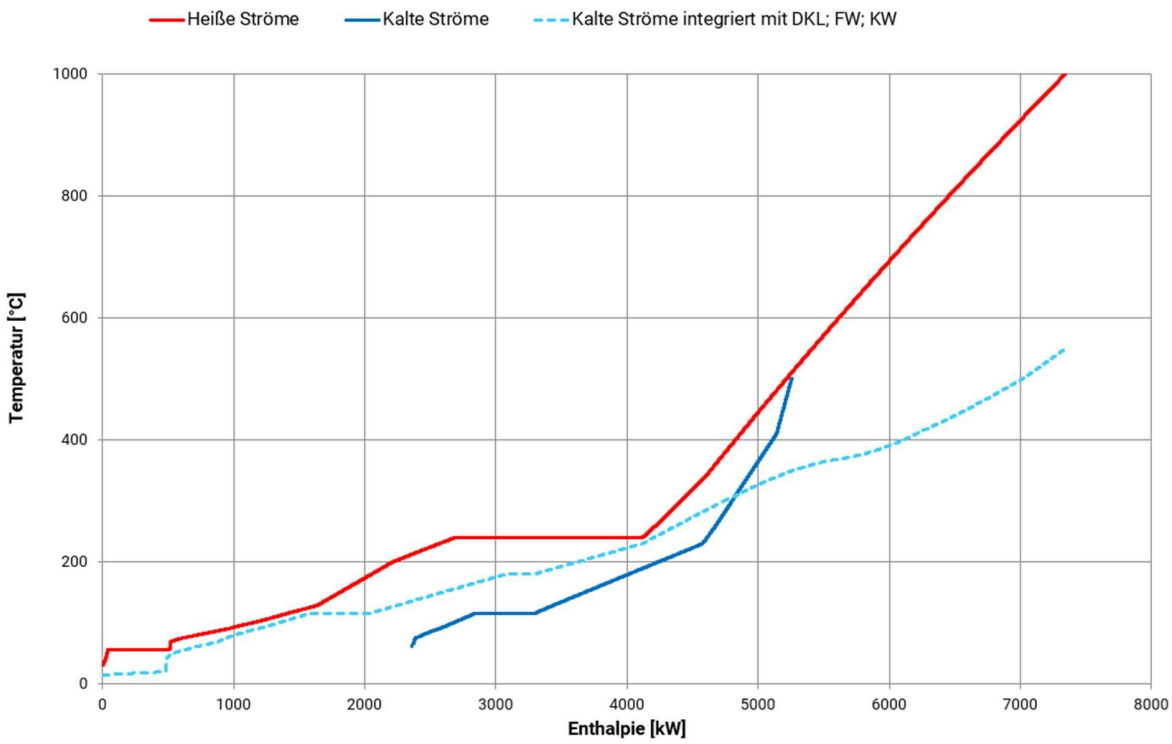

Abbildung 6: Zusammengesetzte Kurven des Falls (IV) H2/MeOH mit Integration-Optionen: Dampfkreislauf (DKL), Fernwärme (FW), und Kühlwasser (KW).

Im Endeffekt bekommen die Prozesskreisläufe mehr Energie-Rückgewinnung durch Wärmeintegration. Tabelle 20 umfasst die Wärmenutzung der Prozesskreisläufe nach den Integrations-Optionen, nämlich DKL, FW, und KW. Da die Abwärme im Quenching und Nasswäscher nicht möglich zu integrieren ist, wird sie hier unberücksichtigt. Ein Teil von PW-Synthese in den Methan-Fälle wurde durch WÜ integriert (0,9 MW_{th}). Die Rest-PW-Synthese und die Wärme aus Abgas-Kühlung wurden mit DKL integriert, um 3,1 MW_{el} Strom zu erzeugen. Wegen des unpassenden Temperaturniveaus kann die PW-Synthese der MeOH-Fälle nur mit WÜ integriert werden. Diese Wärme deckt dann den Wärmebedarf des Reboilers. Die Wärme aus Abgas-Kühlung kann in den Fällen III und IV genutzt werden, um 1,9 MW_{el} bzw. 1,6 MW_{el} Strom zu erzeugen. Andererseits steht dem Fall V keine Möglichkeit zur weder Strom- noch FW-Erzeugung zur Verfügung. Die Abwärme im Temperatur-Bereich ca. 70-150 °C kann mit FW integriert werden. Die Niedrigtemperatur-Abwärme wird aber nur mittels KW aufgenommen und ihr Enthalpie-Gehalt kann damit nicht zurückgewonnen werden. Eine mögliche Technologie dazu wäre die Niedrigtemperatur-Wärmepumpe, die aber in dieser Studie nicht berücksichtigt wird. Trotz ihrer Vorteile erhöht die Wärmeintegration die Investitionsausgaben (CAPEX) der Anlage durch den Kauf zusätzlicher

Komponenten, wie z.B. Rekuperator und Turbine für DKL, und Wärmeübertrager zur Fernwärme-Erzeugung. Dies wird aber ökonomisch ausgeglichen durch die Verringerung der OPEX.

Tabelle 20: Wärmenutzung der Prozesskreisläufe über DKL, FW, und KW.

Fall	I	II	III	IV	V
DKL [MW_{th}]	7,6	7,6	4,7	4,0	k. A.
[MWel]	3,1	3,1	1,9	1,6	k. A.
FW [MW_{th}]	3,1	3,1	2,4	0,8	k. A.
KW [MW_{th}]	1,0	1,0	0,2	0,1	k. A.

3.1.3 Verbraucher für elektrische Energie

Als einziger externer Energieträger wird elektrischer Strom fast ausschließlich für den Elektrolyseur benötigt. Weitere Energieverbraucher mit einer Leistung von unter 1 MW sind Gebläse zum Druckausgleich und Kompressoren zum Erreichen des Synthesedrucks in der Brennstoffsynthese. Da im Fall V (Referenzfall) keine Abgasreinigung stattfindet, ist die Elektrolyse der einzige Energieverbraucher für diesen Fall. Gleichzeitig kann ein Teil der Wärmeleistung zurück in Strom konvertiert werden: Durch die hohen Temperaturen des Abgases sowie in der ersten Stufe des TREMP™ Prozesses konnten wir zu diesen Prozessschritten einen Dampfkreislauf (DKL) in unser Modell integrieren. Tabelle 19 zeigt eine Übersicht über alle Stromverbraucher und -erzeuger des Kreislaufprozesses mit ihrer jeweiligen Leistung. Mit deutlichem Abstand ist die größte Leistung für den Betrieb des Elektrolyseurs erforderlich. 4 bis 7 % der elektrischen Leistung können durch Abwärmenutzung wieder zurückgewonnen werden.

Tabelle 21: Übersicht über die elektrischen Stromverbraucher und -erzeuger in MW_{el}

Fall	I (Me-PEM)	II (Me-AEL)	III (MeOH)	IV (H2/MeOH)	V (Ref H2)
Σ Strombedarf	48,38	46,30	43,28	36,79	27,75
Elektrolyseur	48,08	46,00	42,37	36,93	27,70
Kompressoren	0,30	0,30	0,90	0,14	0,05
Gebläse	0,0025	0,0025	0,001	0,001	k. A.
Σ Stromerzeugung	3,05	3,05	1,89	1,62	0
DKL (Abgas)	1,45	1,45	1,89	1,62	k. A.
DKL (Synthese)	1,60	1,60	k. A.	k. A.	k. A.
Gesamtstrombedarf	45,80	43,72	41,29	35,17	27,75

3.1.4 Prozesswirkungsgrade

Die vorgenannten Fälle wurden im Hinblick auf die definierten Key Performance Indikatoren (KPI), d.h. den PtG Wirkungsgrad η_{PtF} und den Wasserstoff-zu-Brennstoff Wirkungsgrad η_{HtF} analysiert (siehe Abschnitt B). Tabelle 22 zeigt den Vergleich dieser KPI für die ausgewählten Fälle. Alle KPI korrelieren positiv miteinander: die Fälle mit hohen η_{HtF} haben auch hohe η_{PtF}. Die Werte von η_{PtF} hängen vom Wirkungsgrad der Elektrolyse, der verfügbaren Wärme für die Wärmeintegration und η_{HtF} ab. Der Referenzfall (V) liefert die höchsten Wirkungsgrade, da hier H_2 direkt im Glasofen verbrannt wird und dadurch nur der Elektrolyse-Wirkungsgrad betrachtet werden muss. Wegen der thermodynamischen Grenze für die Methanisierung von 83,7% haben die SNG-Fälle (I) und (II) schlechtere η_{HtF}-Werte als MeOH-Fall (III) mit einer thermodynamischen Grenze von 88%, obwohl Methan höheren LHV als MeOH hat. Dies ist auf den höheren chemischen Bedarf an Wasserstoff für die SNG-Synthese zurückzuführen: Um ein Mol SNG herzustellen sind 4 Mol H_2 erforderlich (vgl. Gleichung 8), während ein Mol Methanol nur 3 Mol H_2 erfordert (siehe Gleichung 10). Dank der hohen Wärmeverfügbarkeit für die Wärmeintegration im SNG-Fall (II) nähert sich der tatsächliche Wirkungsgrad η_{PtF} dem Wirkungsgrad von Fall III (MeOH) mit nur 0,8 % Unterschied an, obwohl der η_{HtF}-Unterschied ca. 4,5 % beträgt. Da in Fall (IV) Wasserstoff direkt verbrannt und nur das Gemenge-CO_2 umgewandelt wird, liegt der Wirkungsgrad η_{HtF} von 96,4 % im Fall (IV) über dem Wirkungsgrad von Fall (III).

Da die Prozesskreisläufe eine unterschiedliche Abgaszusammensetzung haben unterscheidet sich durch die unterschiedliche Exergie (d.h. der nutzbaren Wärme) der spezifische Wärmebedarf zur Glasherstellung. Im Fall von SNG haben wir durch die Ähnlichkeit zu Erdgas den Literaturwert für den spezifischen Wärmebedarf von 3,5 $GJ_{SNG}\ t^{-1}_{Glas}$ (0,97 $MWh_{SNG}\ t^{-1}_{Glas}$) angenommen. Für Methanol haben wir einen spezifischen Wärmebedarf von 3,71 $GJ_{Syn\text{-}MeOH}\ t^{-1}_{Glas}$ (1,03 $MWh_{SynMeOH}\ t^{-1}_{Glas}$) berechnet, wobei hier die Purgation mit in die Verbrennungsreaktion einbezogen wurde. Analog dazu berücksicht Fall IV (H_2 + MeOH) ebenfalls die Purgation, verwendet aber als sonstigen Brennstoff Wasserstoff. Die daraus resultierende spezifische Wärme von 3,79 $GJ_{H_2}\ t^{-1}_{Glas}$ (1,05 $MWh_{H_2}\ t^{-1}_{Glas}$) liegt etwas über der Reaktion ohne Purgation im Fall V (3,72 $GJ_{H_2}\ t^{-1}_{Glas}$ bzw. 1,03 $MWh_{H_2}\ t^{-1}_{Glas}$). Diese Unterschiedlichkeit beeinflusst nicht die Prozesswirkungsgrade, sondern die ökonomische Leistung der Prozesskreisläufe (siehe Abschnitt 3.2).

Tabelle 22: Prozesswirkungsgrade η_{PtF} und η_{HtF}.

Fall	I (Me-PEM)	II (Me-AEL)	III (MeOH-AEL)	IV (H_2/MeOH)	V (Referenz)
η_{PtF}	44,3 %	46,4 %	47,2 %	51,4 %	53,3 %
η_{HtF}	82,8 %	82,8 %	87,3 %	96,4 %	100 %

3.2 Ökonomische Analyse

In dieser Studie berechnen wir die wirtschaftlichen Kennzahlen auf Basis der in Aspen Plus® abgebildeten Simulationen. Dieser Abschnitt beinhaltet die Analyse über die Investitionsausgaben (CAPEX), Betriebsausgaben (OPEX), und Nettoproduktionskosten (NPC). Die Berechnungsgrundlage dazu befindet sich im Anhang A (Kapitel 8).

3.2.1 Investitionsausgaben (CAPEX)

Abbildung 7 zeigt die gesamten Fixed Capital Investment (FCI) aller Fälle. Die Kostenfunktionen der Komponenten befinden sich in Tabelle 32 und

Tabelle 33 im Anhang A. Der Elektrolyseur verursacht mit ca. 55-63 % der gesamten FCI von Fällen (I)-(IV) den größten Anteil der Kosten. Der Referenzfall besteht aus nur 3 Komponenten, nämlich Elektrolyseur, Kompressoren und Speichertank, wobei Elektrolyseur 94 % der FCI ausmacht. Der Anteil des Elektrolyseurs in den Fällen (I) und (II) ist höher als in den Fällen (III) und (IV), weil die SNG-Synthese mehr H_2 benötigt als dieselbe Stoffmenge synthetisches Methanol. Die FCI des Nasswäschers hängen von der Kühlleistung des Nasswäschers ab, der sich in allen Fällen geringfügig unterscheidet. Im Fall der Brennstoffsynthese unterscheiden sich die FCI aufgrund der Größe des Equipments: Das TREMP™-Verfahren hat 4 Festbettreaktoren in Serie, während das Lurgi-Konzept nur einen Rohrbündelreaktor erfordert. Dies macht die SNG-Reaktoren im direkten Vergleich teuer. Aufgrund des höheren Betriebsdrucks kosten allerdings die Kompressoren für synthetisches Methanol mehr. Weiterhin erfordern die Fälle (III) und (IV) eine zusätzliche Destillationskolonne, die auf die Kosten zur Produktaufbereitung kommt, sodass die entsprechende Prozesskette zur Brennstoffsynthese insgesamt teurer ist. In den Kreisläufen kann mindestens ein Dampfkreislauf mit dem Wärmetauscher zum Abkühlen des Abgases verknüpft werden. In den SNG-Fällen (I) und (II) kann ein zusätzlicher Dampfkreislauf mit dem ersten adiabatischen Festbettreaktor verknüpft werden. Dies begünstigt die OPEX, erhöht aber den CAPEX-Anteil des Dampfkreislaufs. Insgesamt erfordert der Referenzfall Investitionen über 60 Mio. $€_{2022}$, wobei der nächstgünstigste Fall (IV) ungefähr das Doppelte kostet. Die restlichen Fälle erfordern Investitionen von mehr als 120 Mio. $€_{2022}$.

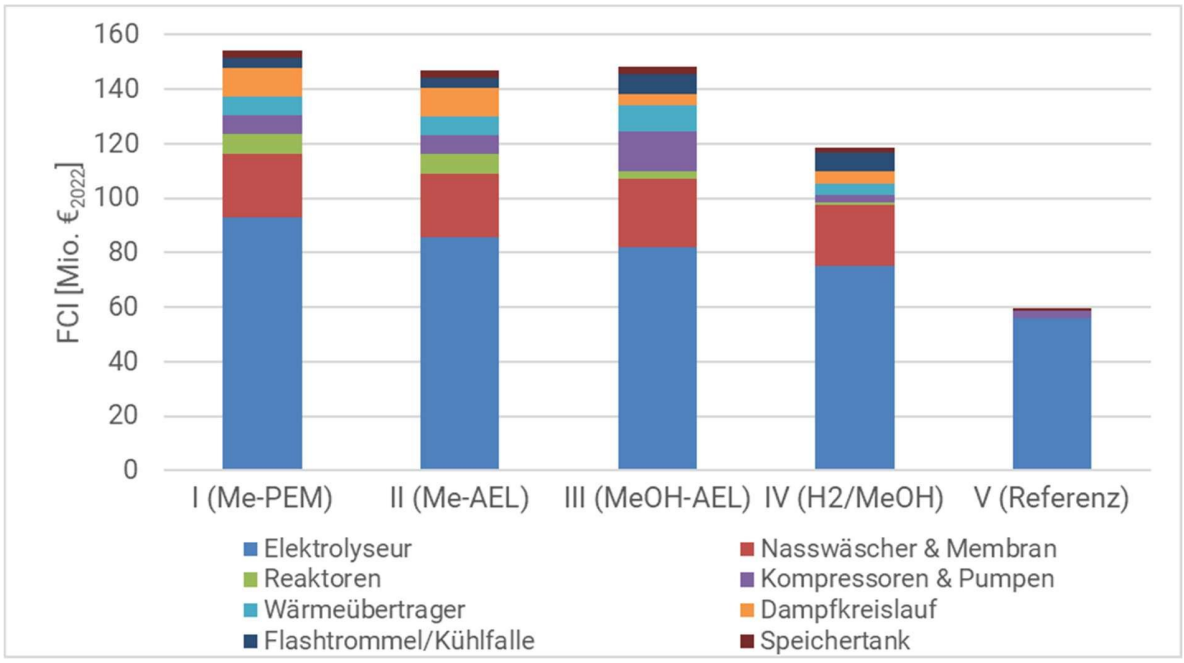

Abbildung 7: Fixed Capital Investment (FCI) Ergebnisse mit Wärmeintegration.

3.2.2 Betriebsausgaben (OPEX) und Nettoherstellungskosten (NPC)

Die Glas-Herstellungskosten (NPC) sind in Abbildung 8 zusammengefasst. Die Ergebnisse sind ohne Verkauf vom Brennstoff-Überschuss berechnet worden, dessen Produktionspotential in Tabelle 29 aufgelistet ist. Die negativen Zahlen kommen durch die Wärmenutzung in Form von DKL und FW zustande. Während FW direkt bepreist wird, haben wir die aus dem DKL erzeugte Strommenge vom gesamten Strombedarf abgezogen. Kühlwasser betrachten wir als Verbrauch, und es wurde als Teil der Rest-OPEX berechnet. FCI in Abbildung 7 wurden für die NPC-Berechnung annualisiert. Mit mehr als 90% entfällt der größte Anteil der Stromkosten auf die Produktion von H_2 mit Hilfe des Elektrolyseurs (siehe Abschnitt 3.1.3).

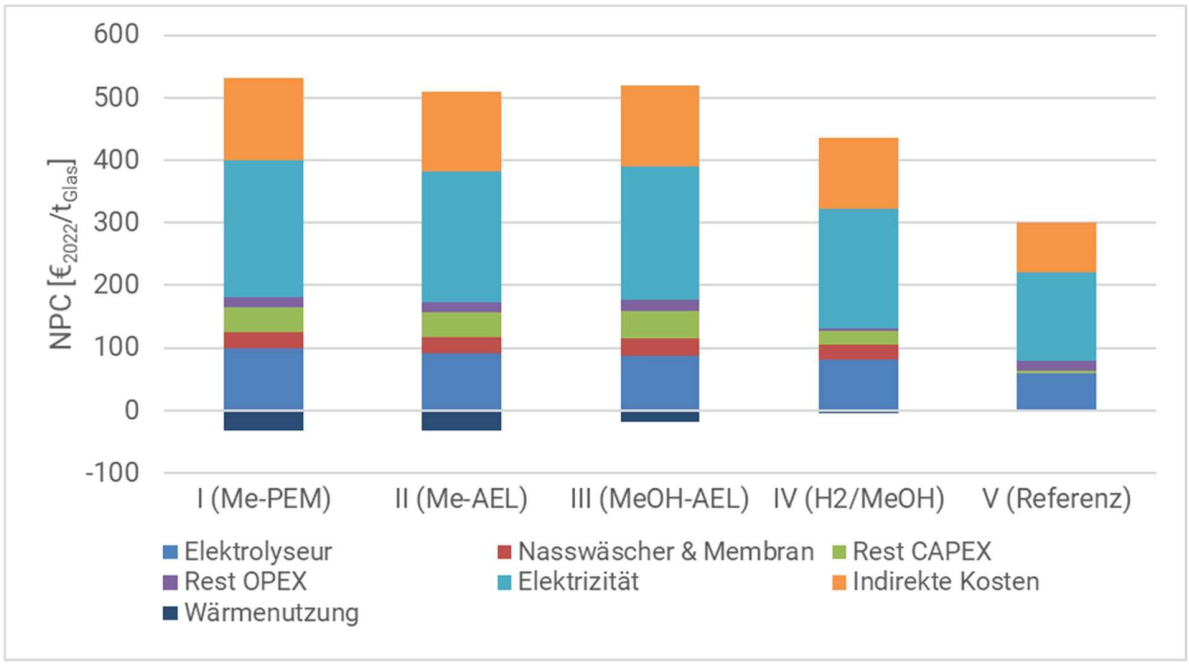

Abbildung 8: Net Production Cost (NPC) Ergebnisse pro Tonne hergestelltes Glas, ohne Verkauf von SynFuel-Überschüssen.

Insgesamt gehen, vergleichbar zum zum Bedarf an elektrischer Energie, ca. 57-67 % der NPC auf den Elektrolyseur zurück. In den evaluierten Fällen würde die Produktion einer Tonne Glas Energiekosten von 301-503 $€_{2022}$ mit sich bringen. In Abbildung 4 ist der Fall III (MeOH-AEL) am teuersten, obwohl er höheren Prozesswirkungsgrad als die Methan-Fälle. Dies liegt daran, dass die Prozesse verschiedene spezifische Wärmebedarfe haben. Wenn man die Fälle in Hinblick auf die gesamte produzierte Energiemenge (LHV-Wert) im Brennstoff vergleicht, ist der Fall III (MeOH-AEL) besser als die Methan-Fälle (IV). Tabelle 23 zeigt die Übersicht der NPC pro Tonne Glas und pro MWh_{LHV} produzierten Brennstoff, sowie das Verkaufspotential von Syn-Fuel-Überschüssen. Die NPC_{LHV}-Werte korrelieren positiv mit den Prozesswirkungsgraden, wobei der effizienteste Prozess die niedrigsten NPC_{LHV} hat. Deswegen liegt der Wert für den Fall III zwischen den Fällen II und IV. Allerdings sind die NPC-Werte vom Fall III vergleichbar mit den Werten von Methan-Fällen (nur 4 € t^{-1}Glas-Unterschied zu Fall I, und 4 € MWh-1LHV zu Fall II). Der SNG-Überschuss beträgt 0,39 t/h, und SynMeOH-Überschuss 0,75 t/h. Trotz geringerer Masse enthält SNG-Überschuss dank des Heizwerts einen höheren Energiefluss als der SynMeOH-Überschuss. Zudem kann man das SNG als fossiles Methan für einen höheren Preis als fossiles Methanol verkaufen (siehe Tabelle 18). Das jährliche Verkaufspotential beträgt 5,91 Mio. € für Methan und 2,86 Mio. € für Methanol. Das bedeutet für die Simulation NPC-Abzüge in Höhe von 54 € t^{-1}_{Glas} (56 € MWh^{-1}_{LHV}) für Fälle (I) und (II) sowie 26 € t^{-1}_{Glas} (23 bzw. 25 € MWh^{-1}_{LHV}) für Fälle (II). und(IV). Wenn der Brennstoff-Überschuss verkauft wird, bleibt die Merit-Order, also die

Tabelle 23: Vergleich NPC pro Tonne Glas und pro MWh_{LHV} Brennstoff, sowie das Verkaufspotential von Syn-Fuel-Überschüssen.

Fall	I (Me-PEM)	II (Me-AEL)	III (MeOH-AEL)	IV (H_2/MeOH)	V (Referenz)
Wärmebedarf [GJ_{LHV} t^{-1}_{Glas}]	3,5	3,5	3,71	3,79	3,72
NPC_{Glas} [€ t^{-1}_{Glas}]	499	477	503	433	301
NPC_{LHV} [€ MWh^{-1}_{LHV}]	514	491	487	411	291
SynFuel-Überschuss [t h^{-1}]	0,39	0,39	0,75	0,75	k.A.
Verkaufspotential [Mio. € y^{-1}]	-5,91	-5,91	-2,86	-2,86	k.A.
$Verkaufspotential_{Glas}$ [€ t^{-1}_{Glas}]	-54	-54	-26	-26	k.A.
$Verkaufspotential_{LHV}$ [€ MWh^{-1}_{LHV}]	-56	-56	-23	-25	k.A.

Reihenfolge der Vorteilhaftigkeit in Hinblick auf die Tonne hergestelltes Glas. Jedoch ändert sich die Reihenfolge der NPC_{LHV}, wobei der Fall III (MeOH-AEL) am teuersten wird, genauso wie für NPC_{Glas}.

3.2.3 Sensitivitätsanalyse

Die NPC-Ergebnisse wurden zuerst mit dem Strompreis 60 $€_{2022}$ MWh^{-1}_{el} berechnet. Da die Prognose des Strommarkts schwierig ist, haben wir zusätzlich eine Sensitivitätsanalyse durchgeführt, welche die Korrelation von NPC mit dem Strompreis zeigt (Abbildung 9). Wir setzen den Fall (V) als Referenzwert ein (blaue gerade Linie, y = 0). Die y-Achse zeigt den Unterschiedswert zwischen den anderen Fällen und dem Referenzfall. Zusätzliche Kosten durch die CO2-Bepreisung im Referenzfall werden auch gezeigt, um die Sensitivität des CO_2-Zertifikatspreis zu verstehen. Mit dem Zertifikatspreis in Höhe von 100 € $t^{-1}_{CO_2}$ erhöht sich die NPC des Referenzfalls auf 9,32 € t^{-1}_{Glas}. Der NPC-Unterschied korreliert linear mit dem Zertifikatspreis, also 27,95 € t^{-1}_{Glas} bei 300 € $t^{-1}_{CO_2}$ und 46,58 € t^{-1}_{Glas} bei 500 € $t^{-1}_{CO_2}$.

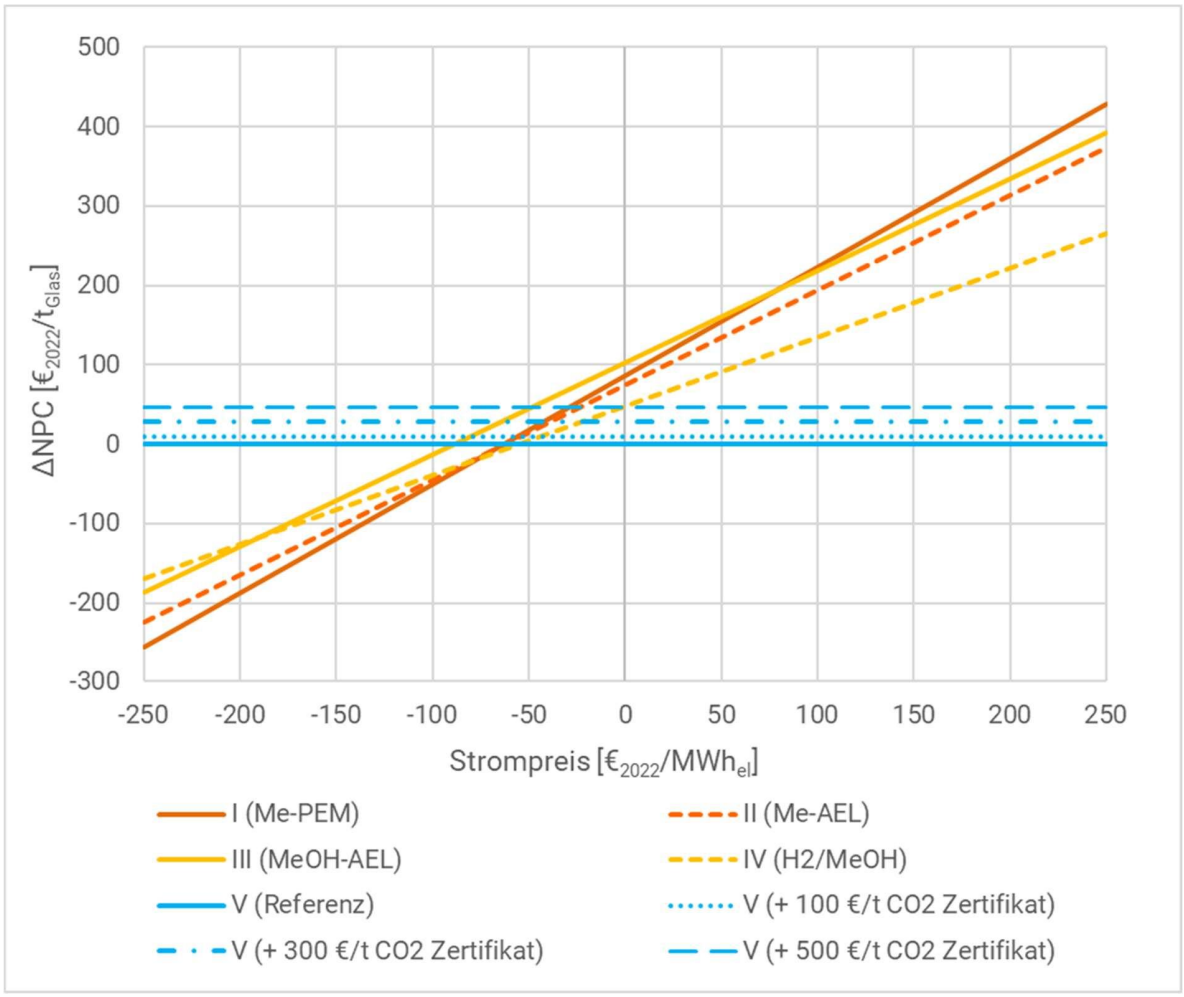

Abbildung 9: Sensitivitätsanalyse ΔNPC (zum Referenzfall) gegen Strompreis, mit zusätzlichen Referenzfällen inkl. CO_2-Zertifikat.

Im positiven Strompreis-Bereich hat der Fall I (Me-PEM) den größten Unterschied zu dem Referenzfall, da PEM mit den verwendeten Parametern weniger effizient als die AEL ist. Der Schnittpunkt zwischen dem Fall I (Me-PEM) und Fall III (MeOH-AEL) liegt bei einem Strompreis von 75 € MWh^{-1}_{el}. Ab diesem Punkt ist Fall III (MeOH-AEL) wegen der höheren Prozesswirkungsgrade (siehe Tabelle 22) preisgünstiger als Fall I (Me-PEM). Der Fall IV (H_2/MeOH) hat den höchsten Prozesswirkungsgrad und ist daher auch am preisgünstigsten. Im positiven Bereich ist der Fall II (Me-AEL) besser als Fälle I und III wegen des höheren Prozesswirkungsgrads und des niedrigeren Wärmebedarfs zur Glasherstellung. Die Strompreis-Schnittpunkte zwischen den Fällen und der Referenz befinden sich alle im negativen Bereich (Tabelle 24). Dieses Ergebnis zeigt, dass höhere CO_2-Zertifikatspreise erforderlich wären, um einen Vorteil gegenüber dem Kauf von Zertifikaten zu erzielen. Tabelle 25 umfasst die erforderlichen CO_2-Zertifikatspreise für drei

Tabelle 24: Strompreis-Schnittpunkte zwischen den Fällen und der Referenz mit CO_2-Zertifikat.

Strompreis [€/MWh_{el}]	V (Referenz)	V + 100 €/t_{CO2}	V + 300 €/t_{CO2}	V + 500 €/t_{CO2}
I (Me-PEM)	-63	-56	-43	-29
II (Me-AEL)	-63	-55	-39	-24
III (MeOH-AEL)	-89	-81	-65	-49
IV (H_2/MeOH)	-55	-44	-22	-1

verschiedene Strompreise. Die Kosten für CO_2-Zertifikate beziehen sich in dieser Tabelle auf den Referenzfall (V), also ausschließlich auf die Rohstoff-bedingten CO_2-Emissionen. In allen Fällen sind selbst im Fall von Stromkosten über 60 € MWh^{-1}_{el} Kosten für CO_2-Zertifikate von mehr als 1000 € $t^{-1}_{CO_2}$ erforderlich, um einen ökonomischen Vorteil für die Fälle I bis IV zu erwirtschaften. Bei höherem Strompreis erhöhen sich die Breakevens-Punkte je nach Fall bis ca. 2841 – 4208 € t^{-1}_{CO2}. Der Fall III (MeOH-AEL) hat vergleichbare Schnittpunkte wie Fall I (Me-PEM). Jedoch sind seine Schnittpunkte ein bisschen niedriger als Fall I bei höherem Strompreis.

Tabelle 25: Schnittpunkte zwischen dem CO_2-Zertifikatspreis und den Fällen mit verschiedenen Strompreisen.

CO_2-Zertifikat [€ $t^{-1}_{CO_2}$]	Strompreis		
	60 € MWh^{-1}_{el}	120 € MWh^{-1}_{el}	250 € MWh^{-1}_{el}
I (Me-PEM)	1812	2694	4605
II (Me-AEL)	1575	2345	4015
III (MeOH-AEL)	1849	2594	4208
IV (H_2/MeOH)	1069	1628	2841

3.2.4 Ökonomische Betrachtung einer dynamischen Wasserstoffsynthese

Die Analyse potenzieller Einsparungen von Stromkosten durch eine dynamische Wasserstoffsynthese ergibt, dass durch Selektion günstigerer Energiepreise (vgl. Abbildung 2) geringere Stromkosten entstehen können (siehe Abbildung 10). Die dynamische Grenzwerterfassung ist hierfür allerdings kein geeignetes Medium: Zwar können bei größeren Speicherkapazitäten und mittleren Dimensionierungen so Kostenreduktion ermöglicht werden, aber weder ist dieser Ansatz konsistent, noch ist es für kleinere Speicher geeignet. In den anderen Verfahren reichen dagegen bereits geringe Dimensionierungsfaktoren und Speicherkapazitäten aus, um leichte Strompreisreduktionen zu realisieren. Dabei werden auch die zusätzlichen Energieaufwände kompensiert, welche durch die Kompression bzw. den Standby-Betrieb entstehen.

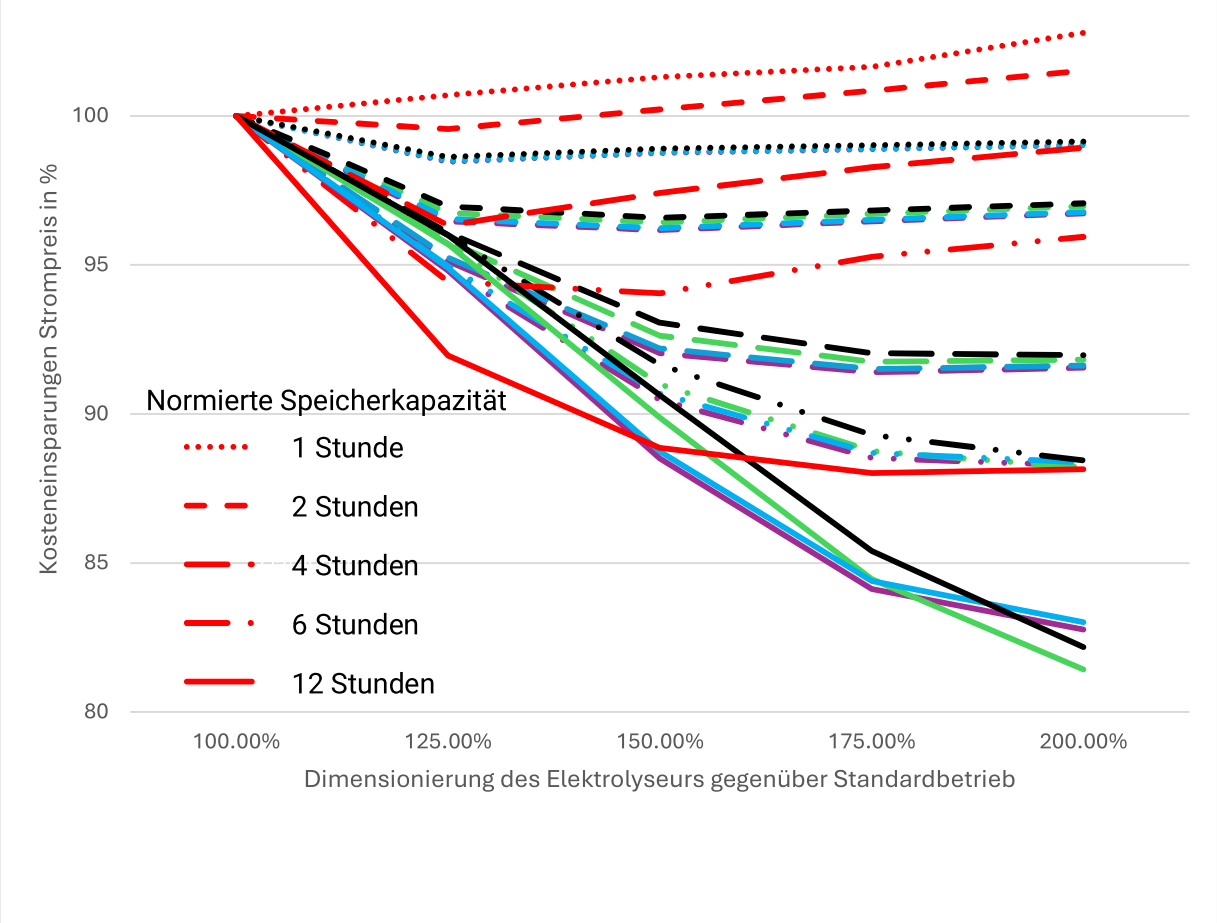

Abbildung 10: Kostenoptimierung des Strompreises durch dynamischen Betrieb des Elektrolyseurs. Die Berechnungsverfahren des Algorithmus erfolgten hierbei nach 24-Stunden-Mittelwert (lila), 24-Stunden-Median (grün), Langzeit-Mittelwert (blau), Langzeit-Median (schwarz) und dynamischen Grenzwert (rot). Die Linienstärke gibt die Speicherkapazität an.

Im Vergleich zur Berechnung durch den Mittelwert gibt der Median häufiger bessere Ergebnisse aus. Dabei ist meistens die Betrachtung der letzten 24 Stunden effektiver als eine Langzeitbetrachtung der Strompreise, d.h. die Betrachtung aller bis dahin verfügbaren Strompreise.

Durch die Verwendung von 24-Stunden-Median oder -Mittelwert können also Kosteneinsparungen durch den Stromverbrauch realisiert werden. Zur effizienten Kostenoptimierung sollten allerdings beide Parameter (Dimensionierung und Speicherkapazität) gemeinsam angehoben werden, da sonst keine Verbesserungen der Stromkosten realisiert werden können. Die Höhe der Kosteneinsparungen am Beispiel des Medians ist in Tabelle 26 zusammengefasst.

Tabelle 26: Potenziale zur Stromeinsparung bei dynamischem Elektrolyseurbetrieb.

Dimensionierung Speicherkapazität	125%	150%	175%	200%
1 h	1,4%	1,1%	1,0%	0,9%
2 h	3,0%	3,4%	3,2%	2,9%
4 h	3,9%	6,9%	8,0%	8,0%
6 h	4,0%	8,3%	10,7%	11,6%
12 h	4,0%	9,4%	14,6%	17,8%

3.3 Ökologische Analyse

Wir haben für diese Studie die benötigten Ressourcen und Nebenprodukte in drei Gruppen geteilt: Die Wasserbilanz (inklusive Wasserverluste durch die Kühlung), die Rohstoffbilanz (exklusive Wasser) und die Brennstoffbilanz. Die zur ökologischen Analyse zugehörige Betrachtung des Energieverbrauchs wurde in der technischen Analyse bereits ausreichend besprochen (s.o.).

3.3.1 Wasserbilanz

Der Wasserbedarf ist aufgeteilt in drei Bereiche: Kühlwasser in geschlossenen bzw. halbgeschlossenen Kreisläufen, Kühlwasser im offenen Kreislauf und Wasserbedarf für die Elektrolyse. Während der Elektrolyseur die höchste Anforderung an die Wasserqualität hat, ist die Anforderung an das Kühlwasser im offenen Kreislauf am geringsten. Kühlwasser im geschlossenen und halbgeschlossenen Kreislauf wurde in dieser Simulation so weit wie möglich wieder gewonnen, sodass nur Kühlwasserverluste durch Verdampfen ausgeglichen werden müssen. Tabelle 27 fasst die Wasserbilanz des Kreislaufprozesses in einer Übersicht zusammen.

Als offenen Kreislauf haben wir das Quenching betrachtet, um das Abgas des Schmelzaggregats von 1450°C auf 1000°C abzukühlen und somit eine Wärmenutzung zu ermöglichen. Weiterhin wird das Abgas durch eingesprühtes Kühlwasser im Nasswäscher von 200°C auf die Prozesstemperatur (40°C) gebracht. Da dieser Prozess durch die geringe Temperaturdifferenz zum Kühlwasser sehr viel Wasser erfordert, wird hierfür das aus dem im Nasswäscher anfallenden Abwasser rezykliert; an dieser Stelle haben wir einen Verlust durch Verdampfung und Leckagen von 2% angenommen und nur den Überschuss an Abwasser betrachtet. Für halbgeschlossene Kühlkreisläufe (Brennstoffsynthese, Elektrolyse) haben wir ebenso einen Wasserverlust von 2% angenommen.

Demgegenüber fällt innerhalb verschiedener Prozessschritte Wasser zurückgewonnen: Aus dem Schlamm des Nasswäschers werden Calciumsulfat und Halogenide von dem umgebenen Wasser abgetrennt und das Wasser direkt für den Prozess wieder verwendet. Weiterhin gewinnen wir in der Kühlung der Brennstoffsynthese Wasser zurück, welches als Nebenprodukt der Reaktion anfällt. Als dritte Quelle produziert die dem Elektrolyseur zugehörigen Entsalzungsanlage mit gelösten Ionen angereichertes Abwasser. In Tabelle 27 ist eine Übersicht aller Verbräuche und Abwasserquellen in der Übersicht dargestellt.

Tabelle 27: Wasserbilanz der Gesamtprozesskette in t h^{-1}.

Fall	I / II (Me+PEM/AEL)	III (MeOH)	IV (H_2/MeOH)	V (Ref H_2)
Σ Wasserverbrauch [t h^{-1}]	13,64	19,24	12,09	5,54
Quenching	1,43	1,95	1,74	Luft
Elektrolyseur	9,87	9,77	8,58	5,54
Kühlung (halbgeschlossen)	2,34	7,52	1,77	0
Σ Abwasser [t h^{-1}]	8,29	7,75	6,62	1,76
Nasswäscher	2,14	2,92	3,59	k. A.
Brennstoffsynthese	2,83	1,90	0,46	k. A.
Entsalzung	3,32	2,93	2,57	1,76

3.3.2 Brennstoffbilanz

In dem hier betrachteten Kreislaufprozess wird Brennstoff durch PtG-Technologien aus elektrischer Energie und mit Carbon Capture Methoden gewonnenem CO_2 hergestellt. Dadurch produzieren wir einerseits synthetischer Brennstoff (SynFuel), andererseits existiert mit dem Schmelzaggregat auch ein Verbraucher des synthetischen Brennstoffs. Durch rohstoffbedingte Emissionen aus der Glasschmelze entsteht im Kreislaufprozess ein Überschuss an

synthetischen Brennstoff, welcher hauptsächlich auf Na_2CO_3, $MgCO_3$ und $CaCO_3$ im Gemengesatz zurückzuführen ist. Durch das unterschiedliche Verbrennungsverhalten der SynFuels unterscheiden sich auch die zugehörigen Abgaszusammensetzungen je nach Fall, wobei die Schadgase weitestgehend konstant bleiben. In Tabelle 28 haben wir die jeweiligen erwarteten Abgaszusammensetzungen und -mengen am Abgaskanal des Schmelzaggregats zusammengefasst.

Tabelle 29 zeigt die zugehörige Übersicht über sowohl SynFuel-Produktion als auch den Bedarf an Brennstoff für die Glasschmelze. Mit der von Fall zu Fall unterschiedlichen Abgasmenge und -Zusammensetzung unterscheidet sich auch die Brennerleistung. So ist im Vergleich zu Methan der volumenbezogene Heizwert von Methanol geringer, sodass bei der Verbrennung eine größere Abgasmenge, und damit auch ein größerer Wärmeverlust, entsteht. Zeitgleich ist für die Synthese von Methanol mit einem stöchiometrischen Verhältnis von 3:1 ein geringeres Volumen an Wasserstoff erforderlich als für Methan (4:1). Dadurch entsteht bei der Methanol-Synthese ein geringerer Energiebedarf als bei der Methansynthese, während die direkte Verbrennung von Wasserstoff den geringsten Energiebedarf (vgl. Umsatz Wasserstoff) aufweist.

Tabelle 28: Abgaszusammensetzung aller betrachteten Fälle am Übergang von Schmelzaggregat zu Quenching. Angaben in $\%_{vol}$ und Nm^3 beziehen sich auf das trockene Abgas. Abweichungen zu 100% entstehen durch Rundung der Werte.

	I / II (Me+PEM/AEL)		III (MeOH)		IV (H_2/MeOH)		V (Ref H_2)	
	[t h^{-1}]	[$\%_{vol}$]	[t h^{-1}]	[$\%_{vol}$]	[t h^{-1}]	[$\%_{vol}$]	[t h^{-1}]	[$\%_{vol}$]
H_2O	2,3	k. A.	3,3	k. A.	3,9	k. A.	3,8	k. A.
CO_2	3,4	80,2%	4,6	79,1%	1,1	52,0%	1,0	51,6%
N_2	0,5	16,4%	0,7	17,7%	0,5	40,3%	0,5	40,5%
O_2	0,07	2,3%	0,1	2,4%	0,1	5,5%	0,1	5,6%
SO_2	0,040	0,64%	0,040	0,47%	0,040	1,31%	0,040	1,38%
HCl	0,009	0,26%	0,009	0,19%	0,009	0,54%	0,009	0,56%
HF	0,002	0,09%	0,002	0,06%	0,002	0,18%	0,002	0,19%
NO	0,002	0,06%	0,002	0,06%	0,001	0,08%	0,001	0,08%
CO	0,002	0,06%	0,002	0,06%	0,001	0,01%	$1e^{-4}$	80 ppm
Staub	0,002	80 ppm	0,002	80 ppm	0,001	80 ppm	0,001	80 ppm
Summe	6,3	2,2 kNm^3	8,7	3,0 kNm^3	5,7	1,1 kNm^3	5,4	1,0 kNm^3

Tabelle 29: Produktion und Verbrauch aller Brennstoffe

Fall	I + II (Me-PEM/AEL)	III (MeOH)	IV (H_2/MeOH)	V (Ref H_2)
Brennerleistung [MW]	12,2	12,9	13,0	13,0
SynFuel	Methan	Methanol	Wasserstoff	Wasserstoff
Heizwert SynFuel [GJ t^{-1}]	45,68	20,61	119,91	119,91
Syntheseprodukt	Methan	Methanol	Methanol	k. A.
Umsatz Wasserstoff [t h^{-1}]	0,74	0,71	0,64	0,41
Produktion Sauerstoff [t h^{-1}]	5,92	4,84	4,56	3,12
Verbrauch Sauerstoff [t h^{-1}]	-3,43	-3,48	-3,15	-3,04
Bilanz Sauerstoff [t h^{-1}]	2,49	1,32	1,41	0,08
Verbrauch SynFuel [t h^{-1}]	-0,91	-2,25	-0,43 (H_2)	-0,40
Produktion SynFuel [t h^{-1}]	1,60	3,37	0,81 (MeOH)	k. A.
Bilanz SynFuel [t h^{-1}]	0,70	1,12	0,81 (MeOH)	0

Zusätzlich zum Brennstoff wird bei der Elektrolyse Sauerstoff erzeugt, welcher in der Brennkammer als Oxidator verwendet wird. Da die Umsetzung von Methan oder Methanol zu CO_2 weniger Sauerstoff erfordert als die Umsetzung der für die Synthese erforderliche Menge an Wasserstoff, verbleibt ein Überschuss an Sauerstoff. Weiterhin wird durch das Einbringen von Falschluft in die Brennkammer Sauerstoff aus der Luft zur Verbrennung zugegeben, wodurch der Anteil an Oxidator für die Verbrennung leicht sinkt. Dadurch wird im Referenzfall (V) ebenfalls weniger Sauerstoff verbraucht als produziert.

3.3.3 Rohstoffbilanz

Während das Schmelzaggregat (1), die Brennstoffsynthese (4) und die Elektrolyse (5) durch die Wasser-, Brennstoff- und Elektrizitätsbilanzen vollständig erfasst werden, sind für die Abgasreinigung (2) und die Aufbereitung des Synthesegases (3) weitere Rohstoffe erforderlich. Zeitgleich fallen für die jeweiligen Prozesse auch Abfälle an, die gegebenenfalls entsorgt werden müssen. In Tabelle 30 sind die Rohstoffein- und ausgänge der jeweiligen detailliert angegeben. Da alle Schadgase aus der Glasschmelze stammen, ist eine Aufschlüsselung nach Prozesskette nicht erforderlich. Für die Abgasreinigung (2) ist zur Erstreinigung des Abgases im Nasswäscher eine $CaCO_3$-Lösung erforderlich, die mit einem Überschussfaktor von 1,05 im Vergleich zum Stoffmengenanteil der schwefel- und halogenidhaltigen Schadgase zu dosieren ist. Im Schlamm des Nasswäschers werden daher die jeweiligen Calciumverbindungen zusammen mit

Gemengestaub und Calciumcarbonat ausgetragen. Während für die stickstoffsensitive Membran der NRU keine Rohstoffe erforderlich sind, werden hier neben Stickstoff auch geringe Mengen CO_2 aus dem Abgasstrom entnommen. Die Menge an Stickstoff, welcher hier dem Abgas entzogen wird, ist abhängig vom Gesamtvolumen des Abgases, und somit am größten für den Fall III (MeOH). Simulationen ohne den Einsatz der NRU zeigten, dass der Anteil an Stickstoff im synthetischen Methan (Fall I + II) auf über 20%$_{vol}$ anstieg, da zwar durch den synthetischen Brennstoff ein Teil ausgetragen werden konnte, aber der Großteil durch die Verbrennung in dem System verblieb. Im Fall der Methanolsynthese konnte sogar gar kein Stickstoff ausgetragen werden, sodass die NRU einen wichtigen Bestandteil der Prozesskette darstellt.

Analog zur Abgasreinigung erfordern die Schutzbetten der Synthesegas-Aufbereitung (3) ebenfalls Rohstoffe zur Reinigung, nämlich aktiviertes Aluminiumoxid (Al_2O_3) und Zinkoxid (ZnO). Im Al_2O_3-Schutzbett lagern sich die Halogenide HCl und HF an das aktivierte Aluminiumoxid an, im ZnO-Schutzbett wird das ZnO teilweise in Zinksulfid (ZnS) umgewandelt. Da hier die Mengen an Schadstoffen sehr gering sind, ist ein Austausch der Bettmaterialien nur selten erforderlich, üblicherweise jedes halbe Jahr. Im Fall von aktiviertem Aluminiumoxid erwarten wir hierbei bei den angegebenen Bedingungen einen Umsatz von 15% des Bettmaterials, im Fall von ZnO bis zu 25%.

Tabelle 30: Rohstoffbilanz des Kreislaufprozesses.

Prozess	Rohstoffe [kg h^{-1}]
$CaCO_3$ (2, Nasswäscher)	97
Al_2O_3 (3, Schutzbett)	2,3
ZnO (3, Schutzbett)	2,1
	Abfallprodukte [kg h^{-1}]
Schlamm (2, Nasswäscher)	116
Abgas (2, NRU)	360 – 660 (je nach Fall)
davon CO_2	<1
Al_2O_3 • 0.15 Halogenwasserstoff (3, Schutzbett)	2,6
ZnO • 0.25 ZnS (3, Schutzbett)	0,5

4 Auswertung

4.1 Carbon Capture and Utilization im Kreislaufprozess

Mit unserer Simulation zeigen wir, dass CO_2 in einem Kreislauf gefangen werden kann, indem wir das Abgas der Verbrennung in den dafür benötigten Brennstoff umwandeln. Die CO_2-Verluste innerhalb dieses Kreislaufs sind vernachlässigbar (unter einem kg CO_2 je Stunde bei einer Tagesproduktion von 300 t Glas) – aber durch die Verwendung von carbonatischen Bestandteilen im Glasgemenge fügen wir kontinuierlich CO_2 zu unserem Kreislauf dazu. Dadurch ist das Ausschleusen von Kohlenstoff in Form synthetischen Brennstoffs als Überschuss erforderlich. Da diese carbonatischen Gemengebestandteile nicht als CO_2-neutral eingeordnet werden, ordnen wir diesen Überschuss als fossil ein. Eine weitere Nutzung dieses Brennstoffs ist, im Gegensatz zu dem Abgeben von CO_2 in die Atmosphäre, jedoch möglich, solange das Abfangen des Kohlenstoffs gewährleistet wird. Durch dieses Vorgehen können etwa 30 kt CO_2 pro Jahr für ein Schmelzaggregat mit einer Tagesproduktionsrate von 300 t geschmolzenem Glas, bei einer OxyFuel-Verbrennung mit Methanol und dem Einsatz von 55% Scherben im Gemenge, eingespart werden. Von diesen vermiedenen Emissionen sind in unserer Simulation 9 kt CO_2 auf die Emissionen der Glasschmelze zurückzuführen, während 21 kt CO_2 auch durch den Einsatz eines CO_2-neutralen Brennstoffs eingespart werden können. Wir sind in unserer Berechnung bewusst von einer geringeren Scherbenrate (und damit höheren CO_2-emissionen) ausgegangen, weil das für unseren Prozess Vorteile bietet: Die Verfügbarkeit von Scherben im Handel ist begrenzt, da die Rückführungsraten von Altglas nicht 100% erreichen – die nicht genutzten Scherben können also in anderen Produktionsstätten verwendet werden. Eine CO_2-arme Glasproduktion wird so möglich, indem die Scherbeneinsatzrate auf fast 100% gesetzt wird, während die Verbrennung von Wasserstoff die nötige Prozesswärme liefert. Der Einsatz von CCU-Technologien ermöglicht im Gegenzug die Produktion hochwertigerer Gläser, für welche eine niedrige Scherbenrate erforderlich ist. Dies trifft auch auf Glassorten zu, welche nicht systematisch recycelt werden (wie z.B. Borosilicatglas) Weiterhin profitiert die Prozesskette von größeren CO_2-Volumina, und damit von effizienteren Prozessen.

4.2 Anreicherungen im Kreislaufprozess

Kreislaufprozesse sind besonders anfällig für Anreicherungseffekte. Durch die Simulation mussten wir feststellen, dass sich vor allem Stickstoff aus der Luft, eingetragen in Leckagen und Öffnungen in der Glasproduktion, in dem Kreislauf ansammelt. Diese Anreicherung konnten wir durch den Einbau einer Entstickungseinheit (NRU) innerhalb der Abgasreinigung kompensieren

und die Qualität unseres synthetischen Brennstoffs deutlich erhöhen. Zwar wird durch den Überschuss synthetischen Brennstoffs immer wieder Stickstoff ausgetragen, aber auch durch die Verbrennung in das System eingebracht. Erste Untersuchungen ohne Entstickung deuteten auf einen Anteil von über 20% Stickstoff im synthetischen Methanol hin, wodurch das Nebenprodukt keine marktfähige Qualität erreichen würde. Weitere Bestandteile der Luft wie Argon wurden nicht untersucht. Die Anreicherungseffekte schätzen wir aufgrund der geringen Anteile als gering ein.

4.3 Technische Reife des Gesamtprozesses

In der hier beschriebenen Simulation haben wir uns auf Technologien beschränkt, deren technischer Reifegrad (TRL) im Bereich 8-9 liegt, also im Rahmen der industriellen Umsetzbarkeit. In der Glasindustrie sind allerdings diese Technologien bisher nicht etabliert: Typische Technologien der Glasproduktion beschränken sich auf Entschwefelungs- und Entstickungsanlagen, um die Anforderungen der TA Luft [83] zu erfüllen, während CO_2 in die Atmosphäre emittiert wird. Durch die hohe Schadstoffbelastung des Abgases haben wir in unserer Betrachtung festgestellt, dass die Abgasaufbereitung jedoch das Kernproblem für eine erfolgreiche Umsetzung darstellt, da diese Schadgase für eine Umsetzung des CO_2 in einen Brennstoff kritisch sind. Es sind somit alle Bausteine für die Umsetzung vorhanden, aber die Kombination der Technologien bedarf einer dringenden Untersuchung. Dadurch liegt unsere Einschätzung des Gesamtreifegrads für den Kreislaufprozess bei einem TRL von 5.

4.4 Einordnung der Prozesswirkungsgrade und Wärmebilanz

Die in Abschnitt 3.1.4 ermittelten PtF-Wirkungsgrade zeigen, dass mit der Konversion von elektrischer Energie in Wasserstoff ein beträchtlicher Energieverlust einher geht. Nur etwas mehr als 50% der Energie kann tatsächlich in ein chemisches Trägermaterial umgewandelt werden, die weitere Umwandlung in die Wasserstoffderivate Methan und Methanol verringert den Wirkungsgrad sogar noch weiter auf bis zu 44%. Aus rein energetischer Perspektive ist also das Einbringen von elektrischer Energie in die Glasschmelze deutlich vorteilhafter als die Verbrennung eines chemischen Energieträgers und sollte, wo immer es möglich ist, so viel wie möglich erfolgen. In allen anderen Fällen sind die Energieverluste bei direkter Verbrennung von Wasserstoff geringer im Vergleich zur Verbrennung der entsprechenden Derivate. Durch die besseren Wärme-zu-Brennstoff-Wirkungsgrade ist die Verwendung von Methanol energetisch vorteilhafter, geht aber mit höheren Investitionskosten einher. Dieser Vorteil macht sich in der Synthese durch eine verringerte Abwärme bzw. einen Heizbedarf (und damit der effizienteren Wärmenutzung) innerhalb der Reaktionskette bemerkbar. Kompensiert wird der Energiegewinn durch die höhere

Abgasmenge, sodass eine effektive Abwärmenutzung essenziell ist für die Nutzung von Methanol. Demgegenüber bietet auch die Lagerfähigkeit von Methanol als Flüssigkeit Vorteile gegenüber Methan.

4.5 Einordnung der ökonomischen Analyse

CO_2-Emissionen aus industriellen Produktionsanlagen müssen über CO_2-Zertifikate freigegeben werden. Die entsprechenden CO_2-Zertifikate für die Glasindustrie werden derzeit noch zum größten Teil kostenfrei durch die Bundesrepublik ausgegeben, müssen jedoch in Zukunft vom Europäischen Markt erworben werden. Da die Zertifikate in immer geringerer Menge durch die jeweiligen Staaten der EU ausgegeben werden, müssen sie in Folge von Maßnahmen wie DACCS freigegeben werden. Daher ist die Ermittlung von CO_2-Vermeidungskosten besonders wichtig. Im Vergleich zu den heute marktüblichen Preisen fossiler Brennstoffe ohne nennenswerte Zertifikatskosten ist keiner der untersuchten synthetischen Brennstoffe konkurrenzfähig: Während fossiles Methan sowie Methanol in den vergangenen Jahren für unter 100 € MWh^{-1} erhältlich war [81, 82], liegen die hier errechneten Werte für synthetische Brennstoffe aus grünem Wasserstoff aus elektrischem Strom für 60 € MWh^{-1}_{el} bei 433 bis 503 € t^{-1}_{Glas}. Im Fall von CO_2-neutraler Befeuerung mit Wasserstoff, aber ohne Verwertung von CO_2 aus dem Glasgemenge, liegen die Kosten mit 301 € t^{-1}_{Glas} niedriger, aber deutlich über den Kosten fossiler Brennstoffe. Aus der Berechnung ist ersichtlich, dass die Vermeidung der brennstoffbedingten Emissionen deutlich kostengünstiger ist als die Vermeidung der Rohstoffbedingten Emissionen: Wenn wir Methan als Brennstoff durch Wasserstoff ersetzt wird, können wir dadurch 2,4 t CO_2 h^{-1}einsparen, bzw. 0,19 t CO_2 t^{-1}_{Glas}. Wir benötigen hierfür aufgrund der veränderten Exergie, also der nutzbaren Wärme, anstelle von 12,2 MWh (0,91 t h^{-1}) Methan eine Brennerleistung für Wasserstoff mit 13,0 MWh (0,41 t h^{-1}), da mehr heißes Abgas den Prozess verlässt und somit nicht zur Erwärmung der Glasschmelze beiträgt. Die Differenz der entstandenen Kosten für 13,0 MWh_{H_2} (etwa 3760 € h^{-1}; vgl. Absatz 3.2.2 für Fall V) zu den Rohstoffkosten für 12,2 MW_{Methan} (etwa 1610 € h^{-1}) ergeben somit Kosten zur Vermeidung von CO_2 über 2150 € h^{-1}, bzw. 896 € $t^{-1}_{CO_2}$ oder 183 € t^{-1}_{Glas}.

Demgegenüber ist die Vermeidung von Gemenge-CO_2 (siehe Sensitivitätsanalyse in Abschnitt 3.2.3) deutlich kostenintensiver: Um eine Tonne Gemenge-CO_2, also in dieser Simulation den Gemenge-Emissionen einer Stunde, mit Hilfe des hier beschriebenen Modells einzusparen, müssen bei einem Strompreis von 60 € MWh^{-1}_{el} mindestens 1069 € t^{-1}_{Glas} (Fall IV) und maximal 1849 € t^{-1}_{Glas} aufgebracht werden.

Diese Kosten sind im Vergleich zu den prognostizierten Kosten von DACCS (bis zu 800 € $t^{-1}_{CO_2}$) deutlich höher als die Extraktion von CO_2 aus der Atmosphäre. Der Vergleich der direkten Vermeidungskosten ist allerdings mit Unsicherheiten verbunden: Zum einen sind die tatsächlichen Kosten der DACCS in Zukunft noch nicht bekannt und unterliegen Annahmen, wie z.B. einem

günstigen Strompreis, etablierten Verfahren und einem Scale-Up der erforderlichen Technologien. Heute anfallende Kosten für DACC werden eher auf bis zu 2000 € $t^{-1}_{CO_2}$ geschätzt, während die Verfügbarkeit von Lagerstätten für CO_2 zumindest mittelfristig noch nicht absehbar sind. Demgegenüber sind zwar die hier analysierten Technologien zwar bereits auf dem Markt erhältlich, aber auch hier ist die Reduktion der erforderlichen Investitionen erwartbar. Weiterhin ist gerade bei den Elektrolyseuren eine Erhöhung des Wirkungsgrads mit der Zeit wahrscheinlich, sodass auch die operativen Kosten in Zukunft geringer ausfallen können. Weiterhin entstehen in den untersuchten Fällen I bis IV fossile, aber auch marktfähige Nebenprodukte aus den CO_2-Emissionen des Gemenges: Etwa 0.8t h^{-1} synthetisches Methan bzw. bis zu 1 t h^{-1} synthetisches Methanol entstehen als marktfähiges Nebenprodukt.

Der dynamische Betrieb eines Elektrolyseurs ist für unsere Gesellschaft vorteilhaft: Durch strategisches An- und Abschalten können Spitzenlasten der Stromversorgung abgemildert und Überkapazitäten abgefangen werden. Durch die erhöhten Kosten der Infrastruktur ist dieses Vorgehen in unserem Fall aber nicht sinnvoll: Bereits die annualisierten Kosten des Elektrolyseurs bei höherer Dimensionierung übersteigen die Potenziale der Stromeinsparungen um das Vielfache. Die benötigte FCI für Wasserstoffspeicher und die Mehrausgaben eines PEM gegenüber der AEL kämen in solch einem Szenario ebenfalls dazu. Aus diesem Grund erachten wir die Einsparungspotenziale für einen kontinuierlichen Verbraucher in der Nachkette nicht als lohnend ein.

4.6 Einordnung der ökologischen Analyse

CO_2-Emissionen der Glasproduktion können durch die Umwandlung in einen synthetischen Brennstoff vermieden werden, erfordern aber den Einsatz vieler Rohstoffe. Im Vergleich aller simulierten Fälle erfordert die Methansynthese den höchsten Einsatz elektrischer Energie: Im Fall II betrug die erforderliche elektrische Gesamtleistung 43,72 MW_{el}, während der Einsatz der PEM als Elektrolyseur sogar eine Gesamtleistung von 45,80 MW_{el} erfordert. Vergleichen mit dem Referenzfall (27,75 MW_{el}) ist also 58% mehr Leistung für die Vermeidung von CO_2 durch die Umwandlung in Methan als Brennstoff (also im Vergleich von Fall V zu Fall II) erforderlich. Bei Befeuerung mit Methanol (41,29 MW_{el}, entsprechend 49% mehr Leistung) liegt dieser Wert etwas geringer. Die geringste elektrische Leistung zur Vermeidung der Emissionen ist im Fall IV gegeben (35,17 MW_{el}, entsprechend 27% mehr Leistung), indem nur die Gemengegase in einen synthetischen Brennstoff umgewandelt werden.

Eine andere Einordnung bietet die Analyse des Wasserbedarfs: Etwa 13,53 t h^{-1} Brauchwasser sind erforderlich (1,1 t_{Wasser} t^{-1}_{Glas}), um den Kreislaufprozess mit Methan zu betreiben, für den Fall (III) dagegen 19,24 t h^{-1} (1,5 t_{Wasser} t^{-1}_{Glas}). Gleichzeitig wird im Fall (I) und (II) mit 8,29 t h^{-1}, also 0,7 t_{Wasser} t^{-1}_{Glas}),) der größte Anteil an Abwasser erzeugt. Teile des Abwassers können jedoch auch wieder verwertet werden: Während für die Elektrolyse als größten Wasserverbraucher möglichst

reines Wasser erforderlich ist, sind für die halboffene Kühlung und das Quenching weniger strenge Anforderungen gegeben. Dadurch kann der Verbrauch des Kreislaufs auf 9,95 t h^{-1} (0,8 t_{Wasser} t^{-1}_{Glas}) gesenkt werden (also den Wasserbedarf des Elektrolyseurs), während die übrigen 3,58 t h^{-1} (0,3 t_{Wasser} t^{-1}_{Glas}) aus dem Abwasser des Kreislaufs genommen werden können. Der Abwasseranteil reduziert sich somit ebenfalls auf 4,71 t h^{-1} (0,4 t_{Wasser} t^{-1}_{Glas}). Im Fall (III) kann mit wenig Aufbereitung das gesamte Abwasser für den Kühlkreislauf verwendet werden, sodass hier der Wasserverbrauch auf 11,51 t h^{-1} (0,9 t_{Wasser} t^{-1}_{Glas}) absinkt. Die zugehörigen berechneten Werte sind in Tabelle 31 zusammengefasst. Dadurch wird ersichtlich, dass die Prozesskette mit Methan als SynFuel auch nach der Optimierung zwar den geringeren Wasserbedarf hat, aber mehr Abwasser produziert. Der Einsatz von Wasserstoff erfordert dagegen den geringsten Anteil an Brauchwasser. Die hier berechneten Werte sind etwas höher als der typische Verbrauch an Kühlwasser, den ein typisches Schmelzaggregat selbst erfordert: Üblicherweise liegen diese bei unter 0,3 t_{Wasser} t^{-1}_{Glas} [84].

Tabelle 31: Optimierter Wasserbedarf und anfallendes Abwasser in t_{Wasser} t^{-1}_{Glas}.

	Wasserbedarf	Abwasser
Fall I + II (Me-PEM / AEL)	0,8	0,4
Fall III (MeOH)	0,9	0
Fall IV (H_2 + MeOH)	0,7	0,2
Fall V (Referenz: H_2)	0,4	0,1

Demgegenüber schätzen wir den Rohstoffbedarf für die Fälle I bis IV als gering ein: Auch für üblicherweise eingesetzte Technologien der Abgasreinigung, wie Elektro- oder Kerzenfilter, ist zur Entschwefelung der Einsatz von $CaCO_3$ erforderlich. Da dieser Rohstoff auch einen der zentralen Gemengebestandteile der Glasproduktion darstellt, ist ein Einsatz unterhalb einer Tonne je Stunde unproblematisch. Keiner der hier betrachteten Rohstoffe für die Abgasreinigung gehört zu den kritischen Rohstoffen, welche nur begrenzt verfügbar sind. Auch die Katalysatormaterialien (Nickel, Kupfer) sind in ausreichender Menge verfügbar.

4.7 Einordnung der Marktreife

Aufgrund der hohen Kosten für das hier beschriebene Modell ist die Marktreife von CCU-Kreislaufprozessen so wie wir sie vorgestellt haben bisher noch nicht gegeben. Allerdings gibt es auch Chancen und weitere Herausforderungen, welche für die Umsetzung ungelöst sind.

4.7.1 Chancen

Durch den modularen Aufbau der Prozesskette ist die Ausgliederung verschiedener Prozessschritte wir z.B. Brennstoffsynthese, Elektrolyse oder sogar Abgasreinigung möglich. Bei Kopplung mit anderen Industrien können durch Scale-Up-Effekte noch deutliche ökonomische Vorteile erzielt werden. Durch die Konversion der Wärme in Fernwärme, Niederdruckdampf oder Hochdruckdampf können auch andere industrielle Prozesse mit Wärmebedarf versorgt werden, sodass an dieser Stelle mit Wärme verbundene Emissionen eingespart werden können. Derartige Synergie-effekte können idealerweise in Industrie-Clustern erzielt werden und bieten enorme Optimierungspotenziale.

Auch die Verortung von Glasproduktion in Siedlungsnähe kann Vorteile bringen: Durch die hohe Prozessabwärme können Haushalte in Form von Fernwärme versorgt werden und sparen somit Emissionen ein, die anderswo für die Wärmegewinnung erforderlich wären. Durch die Umwandlung von CO_2 in einen Rohstoff verringert sich auch die Abgasmenge enorm: Lediglich geringe Mengen Stickstoff werden in unserem Prozess als Abgas abgegeben, sodass die entsprechende Umweltbelastung verringert werden kann.

4.7.2 Herausforderungen

Damit wir einen Standort der Glasproduktion um CCU-Kreislaufprozesse so wie oben beschrieben erweitern zu können, ist entsprechender Raum vor Ort erforderlich. So verbrauchen Nasswäscher zwar nur wenig Fläche, sind aber mit mehreren Metern relativ hoch. Auch Komponenten wie Wärmeübertrager sind üblicherweise sehr hoch, sodass entsprechende Komponenten mit in der Anlagenkonstruktion zu berücksichtigen sind. Demgegenüber sind Elektrolyseure und die Synthesetechnologie oftmals modular aufgebaut; auch hier besteht aber in jedem Fall ein zusätzlicher Raumbedarf. Da viele Produktionsstandorte aber schon sehr lange existieren, kann nicht in allen Fällen der Raumbedarf erfüllt werden.

Die für den Kreislaufprozess erforderliche Stromversorgung übersteigt die Anschlussleistung von heutigen Glasproduktionsstandorten deutlich, in der Regel mindestens um einen Faktor 10. Für vollständig erneuerbaren Strom ist zusätzlich die Richtlinie RED III der Europäischen Union [85] zu berücksichtigen. Die erneuerbare elektrische Energie muss auch entsprechend verfügbar sein.

Da die Produktionskette zur Synthese von Kohlenwasserstoffen aus CO_2 Wasserstoff erfordert, ist eine entsprechende Anlagensicherheit zu gewährleisten. Mit der hohen Brennbarkeit und Flüchtigkeit des Wasserstoffs ist hier eine Erhöhung der Sicherheitsstandards im Vergleich zu Erdgas erwartbar.

4.7.3 Hemmnisse und Potenziale

In Gesprächen mit Industrievertretern konnten wir die Kosten für eine CO_2-neutrale Prozesskette als größtes Hemmnis identifizieren. Durch die derzeitig noch sehr geringen Kosten für CO_2-Zertifikate sei eine entsprechende Umsetzung nicht vermittelbar. Der Druck durch die Kunden für CO_2-neutrale Produkte sei zwar hoch, aber die Kosten wolle niemand in entsprechender Höhe tragen. Da die Einsparungen durch den Einsatz von Wasserstoffdirektverbrennung oder direkter Heizung durch elektrische Energie in der Glasschmelze hoch, aber die rohstoffbedingten Emissionen dagegen niedrig sind, bewerten viele Hersteller die aktuelle Marktreife noch als niedrig ein. Eine Planung über das Jahr 2030 hinaus, wenn die Umstellung zu CO_2-neutraler Beheizung abgeschlossen sein soll, wird nur selten durchgeführt.

Demgegenüber bietet die Robustheit und Adaptivität der Prozesskette Potenziale: In Standorten, die aller Voraussicht nach auch in Zukunft nicht über Zugänge von Wasserstoffpipelines verfügen werden, müssen Alternativen zur Beheizung eingeplant werden. Gerade die Standorte, welche gerade erneuert wurden oder deren Planung abgeschlossen ist, werden in Zukunft eine Möglichkeit zur Veränderung des Produktionsprozesses benötigen. Durch das Hinzufügen der entsprechenden Module kann so eine CO_2-Neutralität erreicht werden, ohne dass in den Schmelzprozess eingegriffen werden muss.

Weiterhin ist die Anpassung der Prozesskette an andere industrielle Thermoprozesse möglich. Da mit hoher Staub- und Schwefelbelastung das Abgas der Glasindustrie durchaus herausfordernd ist, sollte eine Anpassung an andere anorganische Hochtemperaturprozesse unproblematisch sein. Die Abgasreinigung kann aber auch bei anderer Gaszusammensetzung verändert, gegebenenfalls sogar simplifiziert werden.

5 Zusammenfassung

In dieser Studie untersuchen wir die Möglichkeit zur Vermeidung von CO_2 -Emissionen bei der Glasherstellung durch die Implementierung von CCU-Methoden. Wir können zeigen, dass die Glasproduktion unter Vermeidung von CO_2-Emissionen technisch möglich ist, indem wir das Abgas hinter der Schmelzwanne sammeln, Schadgase abtrennen und mit Hilfe von elektrisch generiertem Wasserstoff vor Ort in einen synthetischen Brennstoff umwandeln. Durch unsere Prozesskette können wir CO_2 in einen Kohlenstoffkreislauf halten und Überschüsse von CO_2 mit Ursprung aus dem Glasgemenge in einen Brennstoffüberschuss überführen. Während die Technologien für die einzelnen Prozessschritte verfügbar sind, ist die gesamte Prozesskette bisher jedoch nicht industriell erprobt und erfordert weitere Untersuchungen in einem Pilotprojekt.

Die Kosten (NPC) für die Vermeidung von CO_2 durch Integration eines Kohlenstoffkreislaufs in den Herstellungsprozess liegen in dieser Studie mit bis zu 1849 € $t^{-1}_{CO_2}$ deutlich über den erwarteten Kosten von DACCS, also der wichtigsten Kompensationsstrategie von THG-Emissionen. Sie sind aber durchaus vergleichbar mit den geschätzten Kosten heutiger DACCS-Prototypen. Hierbei ist die Umwandlung von rohstoffbedingten Emissionen bei Verwendung von Wasserstoff als Heizmittel mit Kosten von 1069 € $t^{-1}_{CO_2}$ das kostengünstigste Verfahren, welches wir in unserem Projekt betrachtet haben. Durch die hohe Verfügbarkeit der benötigten Technologien sowie der Unabhängigkeit von sowohl chemischen Energieträgern als auch Lagerstätten für CO_2 kann der hier untersuchte Kreislauf einen geeigneten Weg für eine CO_2-neutrale Glasproduktion darstellen. Hierfür ist aber die Verfügbarkeit von elektrischer Energie in ausreichender Höhe mit möglichst niedrigen Kosten wichtig. Vorteilig für die Prozesskette ist dabei die Unabhängigkeit von weiteren Energieträgern. Durch die Verknüpfung der Glasproduktion mit anderen energie-intensiven Industrien sind weiterhin noch nicht ausgeschöpfte Synergiepotenziale vorhanden.

Aus ökologischer Perspektive ist zwar der Einsatz von Bestandteilen wie $CaCO_3$ oder die Entstehung von Abfallprodukten nicht kritisch. Mit einem Wasserbedarf von bis zu 0,9 t_{Wasser} t^{-1}_{Glas} ist dieser zwar hoch, aber vermutlich ebenfalls nicht als kritisch anzusehen. Dagegen ist der Bedarf an elektrischer Energie aufgrund der hohen Konversionsraten sowohl ein Kostentreiber als auch kritisch in Hinblick auf eine erwartbare Energieknappheit in der Zukunft. Durch den Bedarf von mindestens 2,8 MWh_{el} t^{-1}_{Glas} und bis zu 3,6 MWh_{el} t^{-1}_{Glas} ist der Energiebedarf ein Vielfaches höher als der aktuelle Energiebedarf von etwa 1,0 MWh_{Erdgas} t^{-1}_{Glas}, wobei die eventuell vorhandene elektrische Zusatzheizung des Schmelzprozesses noch zu diesen Beträgen hinzuzurechnen ist.

Mit der Entwicklung optimierter Elektrolysetechnologien und günstigerer Fertigung durch Scale-Up-Effekte ist zwar eine Verbesserung der Ökonomie und Ökologie in Zukunft zu erwarten; ein direkter Einsatz von elektrischer Energie in die Schmelze ist jedoch, wenn technologisch möglich, zu bevorzugen. Ein Vorteil besteht hier durch die Unabhängigkeit von weiteren

Energieträgern, sodass auch eine Lösung für Anlagen, die nicht von geplanten Wasserstoffpipelines abgedeckt werden, möglich ist.

Im Vergleich zu derzeitig verwendeten Herstellungsverfahren wird durch die Anwendung des CO_2-Kreislaufs das Volumen der tatsächlichen Emissionen enorm verringert und besteht nahezu nur noch aus dem Stickstoffanteil aus der Falschluft. Alle weiteren Bestandteile liegen im Prozess als Feststoffe (Sulfate, Sulfide und Halogenide) oder Flüssigkeiten (Brennstoff, Wasser) vor. Damit bietet der Prozess auch Vorteile, die den Einsatz im urbanen Bereich weniger kritisch gestalten. Im Gegenteil bietet die Versorgung der angrenzenden Infrastruktur mit Fernwärme Potenziale zur Einsparung von CO_2-Emissionen außerhalb der eigentlichen Glasproduktion. Bei geschickter Kopplung verschiedener energieintensiver Industrien kann durch ein Scale-Up und Auslagern von Teilen der Prozesskette an Dienstleister ein weiterer ökonomischer und ökologischer Vorteil erzielt werden. Letztendlich ist das hier vorgestellte Verfahren insbesondere an Standorten geeignet, an denen aufgrund hoher Qualitätsanforderungen an das produzierte Glas oder der geringen Verfügbarkeit von Scherben keine hohen Scherbenraten, d.h. > 95%, möglich sind. Ob zur Kompensation der rohstoffbedingten Emissionen der Glasproduktion eine Auslagerung der CO_2-Emissionen in die Vorkette mit entsprechenden Carbon Capture Technologien der Glasproduktion technologisch möglich sowie ökonomisch und ökologisch sinnvoll ist, bleibt zu untersuchen.

Danksagung

Diese Studie wurde durch das Bundesministerium für Bildung und Forschung und der Europäischen Union im Rahmen von KlimPro Industrie und EU Next Generation mit der Projektnummer 01LJ2005 (A+B) gefördert. Wir danken für die freigegebenen Mittel zur Durchführung des Projekts. Weiterhin danken wir den assoziierten Partnern Ardagh Glass Germany GmbH, Schott AG und Linde GmbH für die Unterstützung im Projekt.

Literaturverzeichnis

[1] I. Agache, V. Sampath, J. Aguilera, C. A. Akdis, M. Akdis, M. Barry, A. Bouagnon, S. Chinthrajah, W. Collins, C. Dulitzki, B. Erny, J. Gomez, A. Goshua, M. Jutel, K. W. Kizer, O. Kline, A. D. LaBeaud, I. Pali-Schöll, K. P. Perrett, R. L. Peters, M. Pilar Plaza, M. Prunicki, T. Sack, R. N. Salas, S. B. Sindher, S. H. Sokolow, C. Thiel, E. Veidis, B. Delmoro Wray, C. Traidl-Hoffmann, C. Witt und K. C. Nadeau, „Climate change and global health: A call to more research and more action," *Allergy,* Bd. 77, Nr. 5, pp. 1289-1407, 2022.

[2] C. D. Kolstad und F. C. Moore, „Estimating the economic impacts of climate change using weather observations," *Energy Policy,* Bd. 185, p. 113922, 2024.

[3] M. Kotz, A. Levermann und L. Wenz, „The economic commitment of climate change," *Nature,* Bd. 628, pp. 551-557, 2024.

[4] NASA's Goddard Institute for Space Studies (GISS), „Global Temperature. Latest Annual Average Anomaly: 2023," 2023. [Online]. Available: https://climate.nasa.gov/vital-signs/global-temperature/?intent=121. [Zugriff am 08 08 2024].

[5] National Centers for Environmental Information, „Global Climate Report 2023," 2023. [Online]. Available: https://www.ncei.noaa.gov/. [Zugriff am 09 08 2024].

[6] G. Hansen und D. Stone, „Assessing the observed impact of anthropogenic climate change," *Nature Climate Change,* Bd. 6, pp. 532-537, 2016.

[7] G. R. North, „More evidence for anthropogenic influence on climate change," *PNAS,* Bd. 110, Nr. 43, pp. 17169-17170, 2013.

[8] C. Rosenzweig und P. Neofotis, „Detection and attribution of anthropogenic climate change," *Wiley Interdisciplinaric Reviews,* Bd. 4, Nr. 2, pp. 121-150, 2013.

[9] EPA, „Inventory of U.S. Greenhouse Gas Emissions and Sinks: 1990-2022," U.S. Environmental Protection Agency, EPA, 2024.

[10] L. Kemp, C. Xu, J. Depledge, K. L. Ebi, G. Gibbins, T. A. Kohler, J. Rockström, M. Scheffer, H. J. Schellnhuber, W. Steffen und T. M. Lenton, „Climate Endgame: Exploring catastrophic climate change scenarios," *PNAS,* Bd. 119, Nr. 34, p. e2108146119, 2922.

[11] „Paris Agreement," United Nations Framework Convention on Climate Change, Paris, France, Dec. 12, 2015.

[12] Deutscher Wetterdienst, „Wetter. und Klimalexikon: Globale Durchschnittstemperatur," [Online]. Available: https://www.dwd.de. [Zugriff am 24 09 2024].

[13] A. D. Ellermann und B. K. Buchner, „The European Union Emissions Trading Scheme: Origins, Allocation, and Early Results," *Review of Environmental Economics and Policy,* Bd. 1, Nr. 1, 2007.

[14] P. Bayer und M. Aklin, „The European Union Emissions Trading System reduced CO_2 emissions despite low prices," *PNAS,* Bd. 117, Nr. 2, pp. 8804-8812, 2020.

[15] K. Sievert, T. S. Schmidt und B. Steffen, „Considering technology characteristics to project future costs of direct air capture," *Joule,* Bd. 8, pp. 979-999, 2024.

[16] J. Young, N. C. C. McQueen, S. Foteinis, O. Hawrot, M. Ojeda, H. Pilorgé, J. Andresen, P. Psarras, P. Renforth, S. Garcia und M. van der Spek, „The cost of direct air capture and storage can be reduced via strategic deployment but is unlikely to fall below stated cost targets," *One Earth,* Bd. 6, pp. 899-917, 2023.

[17] F. Ausfelder, A. Bărăscu-Wilde, A. Bazzanella, S. Dolique, H. Dura, O. Hurtig und D. Krämer, „Umweltauswirkungen der stofflichen Nutzung von CO_2," Umweltbundesamt, Dessau-Roßlau, 2024.

[18] Global Energy Solutions e.V., „Carbon Capture and Storage / Usage (CCS / CCU) Factsheet," 06 05 2022. [Online]. Available: https://global-energy-solutions.org. [Zugriff am 30 09 2024].

[19] M. Crippa, D. Guizzardi, F. Pagani, M. Banja, M. Muntean, S. E., W. Becker, F. Monforti-Ferrario, R. Quadrelli, A. Risquez Martin, P. Taghavi-Moharamli, J. Köykkä, G. Grassi, S. Rossi, J. Brandao De Melo, D. Oom, A. Branco, J. San-Miguel und E. Vignati, „GHG emissions of all world countries," Publications Office of the European Union, Luxembourg, 2023.

[20] J. Egerer, N. Farhang-Damghani, V. Grimm und P. Runge, „The industry transformation from fossil fuels to hydrogen will reorganize value chains: Big picture and case studies for Germany," SSRN, 16 03 2023. [Online].

[21] L. Holappa, „A General Vision for Reduction of Energy Consumption and CO_2 Emissions from the Steel Industry," *Metals,* Bd. 10, Nr. 9, p. 1117, 2020.

[22] E. Benhelal, E. Shamsaei und M. I. Rashid, „Challenges against CO_2 abatement strategies in cement industry: A review," *Journal of Environmental Sciences,* Bd. 104, pp. 84-101, 2021.

[23] D. D. Rio, F. Del, B. K. Sovacool, A. M. Foley, S. Griffiths, M. Bazilian, J. Kim und D. Rooney, „Decarbonizing the glass industry: A critical and systematic review of developments, sociotechnical systems and policy options," *Renewable and Sustainable Energy Reviews,* Bd. 155, p. 111885, 2022.

[24] W. Dienemann, „Heidelberg Materials' CO_2 roadmap On the way to carbon neutrality," *ce/papers,* Bd. 6, Nr. 6, pp. 110-113, 2023.

[25] T. A. Branca, V. Colla, M. M. Murri und A. J. Schröder, „The impact of the new technologies and the EU climate objectives on the steel industry," in *Industry 4.0 and the road to sustainable steelmaking in Europe*, D. Stroud, A. J. Schröder, L. Antonazzo, C. Behrend, V. Colla, A. Goti und M. Weinel, Hrsg., Cham, Springer International Publishing, 2024, pp. 53-75.

[26] Stiftung Allianz für Entwicklung und Klima, „Scopes bei der Berechnung der THG-Emissionen," 06 2023. [Online]. Available: https://allianz-entwicklung-klima.de/wp-content/uploads/2023/07/Factsheet_Scopes.pdf. [Zugriff am 16 08 2024].

[27] European Environment Agency, „EU Emissions Trading System (ETS) data viewer," 27 07 2023. [Online]. Available: https://www.eea.europa.eu/data-and-maps/dashboards/emissions-trading-viewer-1. [Zugriff am 26 04 2024].

[28] Pilkington Unitet Kingdom Limited, „Architectural glass production powered by hydrogen in world first," Pilkington Unitet Kingdom Limited, 30 08 2021. [Online]. Available: https://www.pilkington.com/en-gb/uk/news-insights/latest/architectural-glass-production-powered-by-hydrogen-in-world-first#. [Zugriff am 06 06 2024].

[29] L. Biennek, „All-electric melting prospects for glass container production," *Glass Worldwide,* Nr. 88, pp. 76-80, 2020.

[30] Ardagh Glass Packaging, „Ardagh Glass Packaging welcomes glass industry partners to NextGen Furnace launch," *Glass Technology: European Journal of Glass Science and Technology Part A,* Bd. 64, Nr. 6, pp. 202-203, 2023.

[31] C. W. Sinton, „Deep decarbonization of glassmaking," *American Ceramic Society Bulletin ,* Bd. 102, Nr. 4, pp. 24-29, 2023.

[32] M. Zier, N. Pflugradt, P. Stenzel, L. Kotzur und D. Stolten, „Industrial decarbonization pathways: The example of the German glass industry," *Energy Conversion and Management: X,* Bd. 17, p. 100336, 2023.

[33] F. G. Albrecht, D. H. König, N. Baucks und R.-U. Dietrich, „A standardized methodology for the techno-economic evaluation of alternative fuels - a case study," *Fuel,* Bd. 194, pp. 511-526, 2016.

[34] S. Maier, S. Tuomi, J. Kihlman, E. Kurkela und R.-U. Dietrich, „Techno-economically driven identification of the ideal plant configurations for a new biomass-to-liquid process - A case study for Central Europe," *Energy Conversion and Management,* Bd. 247, p. 11465, 2021.

[35] Y. Rahmat, S. Maier, F. Moser, M. Raab, C. Hoffmann und J. U. D. R.-U. Repke, „Techno-economic and exergy analysis of e-methanol production under fixed operating conditions in Germany," *Applied Energy,* Bd. 351, p. 121738, 2023.

[36] D. R. Woods, Rules of thumb in engineering practice, Weinheim: Wiley-VCH, 2007.

[37] B. M. Scalet, M. Garcia Muñoz, A. Q. Sissa, S. Roudier und L. Delgado Sancho, „Best available techniques (BAT) reference document for the manufacture of glass," European Commission, Luxembourg, 2013.

[38] S. Rezaei, A. Liu und P. Hovington, „Emerging technologies in post-combustion carbon dioxide capture & removal," *Catalysis Today,* Bd. 423, p. 114286, 2023.

[39] E. Mostafavi, O. Ashrafi und P. Navarri, „Assessment of process modifications for amine-based post-combustion carbon capture processes," *Cleaner Engineering and Technology,* Bd. 4, p. 100249, 2021.

[40] J. Tian, Y. Shen, D. Zhang und Z. Tang, „CO_2 capture by vacuum pressure swing adsorption from dry flue gas with a structured composite adsorptium medium," *Journal of Environmental Chemical Engineering,* Bd. 9, p. 106037, 2021.

[41] M. T. Ho, G. W. Allinson und D. Wiley, „Reducing the cost of CO_2 capture from flue gases using pressure swing adsorption," *Industrial & Engineering Chemistry Research,* Bd. 47, Nr. 14, pp. 4883-4890, 2008.

[42] J. Gao, S. Wang, J. Wang, L. Cao, S. Tang und Y. Xia, „Effect of SO_2 on the amine-based CO_2 capture solvent and improvement using ion exchange resins," *International Journal of Greenhouse Gas Control,* Bd. 37, pp. 38-45, 2015.

[43] S. Talei, D. Fozer, P. S. Varbanov, A. Szanyi und P. Mizsey, „Oxyfuel combustion makes carbon capture more efficient," *ACS Omega,* Bd. 9, pp. 3250-3261, 2024.

[44] R. Doctor, A. Palmer, D. Coleman, J. Davison, C. Hendriks, O. Kaarstad, M. Ozaki und M. Austell, „Transport of CO_2," in *IPCC Special Report on Carbon Dioxide Capture and Storage*, Cambridge, Cambridge University Press, 2005, pp. 179-194.

[45] J. M. Race, B. Wetenhall, P. N. Seevam und M. J. Downie, „Towards a CO_2 pipeline specification: Defining tolerance limits for impurities," *The Journal of Pipeline Engineering,* Bd. 11, Nr. 3, pp. 173-190, 2012.

[46] J. L. Sorrels, A. Baynham, D. D. Randall und R. Laxton, „Cost reports and guidance for air pollution regulations, 7th edition. Section 5: Wet and dry scrubbers for acid gas control," United States Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, NC, 2021.

[47] T. Brinkmann, G. G. Santonja, H. Yükseler, S. Roudier und L. Delgado Sancho, „Best available techniques (BAT) reference document for common waster water and waste gas treatment / management systems in the chemical sector," Publications Office of the European Union, Luxembourg, 2016.

[48] Aurora Energy, LLC, „Best Available Control Technology Analysis, Chena Power Plant, Fairbanks, Alaska," Environmental Resources Management, Cincinnati, OH, 2019.

[49] M. Z. Zuwairi und S. A. Rahman, „Study on CO_2/N_2 separation: the effect of rubbery polymer coating on PVDF membrane," *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering,* Bd. 206, p. 012047, 2016.

[50] I. A. Hashim, H. Shehu, W. I. Ramalan, M. Hossain, A. Giwa und A. Karnik, „Separation of CO_2 from nitrogen and oxygen using hydrophobic ceramic membrane," *Journal of Applied Material Science & Engineering Research,* Bd. 7, Nr. 2, pp. 172-181, 2023.

[51] J. C. Kuo, K. H. Wang und C. Chen, „Pros and cons of different Nitrogen Removal Unit (NRU) technology," *Journal of Natural Gas Science and Engineering,* Bd. 7, pp. 52-59, 2012.

[52] M. Samei und A. Raisi, „Separation of nitrogen from methane by multi-stage membrane processes: Modeling, simulation, and cost estimation," *Journal of Natural Gas Science and Engineering,* Bd. 98, p. 104380, 2022.

[53] M. C. Flores und K. C. d. S. Figueiredo, „Carbon dioxide/nitrogen separation through oxygenated carbon nanotubes-containing polysulfone membranes," *Macromolecular Symposia,* Bd. 394, Nr. 1, p. 2000058, 2020.

[54] K. Stangeland, D. Kalai, H. Li und Z. Yu, „CO_2 methanation: the effect of catalysts and reaction conditions," *Energy Procedia,* Bd. 105, pp. 2022-2027, 2017.

[55] K. C. Waugh, „Methanol synthesis," *Catalysis Today,* Bd. 15, Nr. 1, pp. 51-75, 1992.

[56] C. H. Bartholomew, „Mechanisms of nickel catalyst poisoning," *Studies in Surface Science and Catalysis,* Bd. 34, pp. 81-104, 1987.

[57] K.-T. Li und Y.-C. Hung, „Hydrogenation of sulfur dioxide to hydrogen sulfide over Fe/γ-Al_2O_3 catalysts," *Applied Catalysis B: Environmental,* Bd. 40, pp. 13-20, 2003.

[58] D. Chiche, C. Diverchy, A.-C. Lucquin, F. Porcheron und F. Defoort, „Synthesis gas purification," *Oil & Gas Science and Technology - Revue d'IFP Energies nouvelles,* Bd. 68, Nr. 4, pp. 707-723, 2013.

[59] R. T. J. Porter, P. D. Cobden und H. Mahgerefteh, „Novel process design and techno-economic simulation of methanol synthesis from blast furnace gas in an integrated steelworks CCUS system," *Journal of CO2 Utilization,* Bd. 66, p. 102278, 2022.

[60] D. Chiche, C. Diverchy, A.-C. Lucquin, F. Porcheron und F. Defoort, „Synthesis gas purification," *Oil & Gas Science and Technology – Rev. IFP Energies nouvelles,* Bd. 68, Nr. 4, pp. 707-723, 2013.

[61] K.-T. Li und Y.-C. Hung, „Hydrogenation of sulfur dioxide to hydrogen sulfide over Fe/γ-Al_2O_3 catalysts," *Applied Catalysis B: Environmental,* Bd. 40, pp. 13-20, 2003.

[62] S. Rönsch, J. Schneider, S. Matthischke, M. Schlüter, M. Götz, J. Lefebvre, P. Prabhakaran und S. Bajohr, „Review on methanation - from fundamentals to current projects," *Fuel,* Bd. 166, pp. 276-296, 2016.

[63] H. Harms, B. Höhlein und A. Skov, „Methanisierung kohlenmonoxidreicher Gase beim Energietransport," *Chemie Ingenieur Technik,* Bd. 52, Nr. 6, pp. 504-515, 1980.

[64] É. S. Van-Dal und C. Bouallou, „Design and simulation of a methanol production plant from CO_2 hydrogenation," *Journal of Cleaner Production,* Bd. 57, pp. 38-45, 2013.

[65] A. Coy und T. C. (Clariant), Interviewees, *Persönliches Gespräch zu Anforderungen für den Gebrauch von Katalysatoren bei Clariant.* [Interview]. 09 09 2021.

[66] B. L. de Oliveira Campos, „Multiscale modeling of the methanol synthesis: From surface reaction kinetics to techno-economic analysis (Thesis)," Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe, 2023.

[67] S. Griffiths, B. K. Sovacool, J. Kim, M. Bazilian und J. M. Uratani, „Industrial decarbonization via hydrogen: A critical and systematic review of developments, socio-technical systems and policy options," *Energy Research & Social Science,* Bd. 80, p. 102208, 2021.

[68] O. Schmidt, A. Gambhir, I. Staffell, A. Hawkes, J. Nelson und S. Few, „Future cost and performance of water electrolysis: An expert elicitation study," *International Journal of Hydrogen Energy,* Bd. 42, pp. 30470-30492, 2017.

[69] A. Buttler und H. Spliethoff, „Current status of water electrolysis for energy storage, grid balancing and sector coupling via power-to-gas and power-to-liquids: A review," *Renewable and Sustainable Energy Reviews,* Bd. 82, Nr. 3, pp. 2440-2454, 2018.

[70] C. Schnuelle, T. Wassermann, D. Fuhrlaender und E. Zondervan, „Dynamic hydrogen production from PV & wind direct electricity supply – Modeling and techno-economic assessment," *International Journal of Hydrogen Energy,* Bd. 45, pp. 29938-29952, 2020.

[71] R. Bhandari und R. R. Shah, „Hydrogen as energy carrier: Techno-economic assessment of decentralized hydrogen production in Germany," *Renewable Energy,* Bd. 177, pp. 915-931, 2021.

[72] M. Kopp, D. Coleman, C.Stiller, K. Scheffer, J. Aichinger und B. Scheppat, „Energiepark Mainz: Technical and economic analysis of the worldwide largest Power-to-Gas plant with PEM electrolysis," *International Journal of Hydrogen Energy,* Bd. 42, Nr. 19, pp. 13311-13320, 2017.

[73] M. Sánchez, E. Amores, D. Abad, L. Rodríguez und C. Clemente-Jul, „Aspen Plus model of an alkaline electrolysis system for hydrogen production," *International Journal of Hydrogen Energy,* Bd. 45, Nr. 7, pp. 3916-3929, 2020.

[74] C. Varela, M. Mostafa und E. Zondervan, „Modeling alkaline water electrolysis for power-to-x applications: A scheduling approach," *International Journal of Hydrogen Energy,* Bd. 46, Nr. 14, pp. 9303-9313, 2021.

[75] Fraunhofer Institute for Solar Energy Systems ISE, „Cost forecast for low-temperature electrolysis - technology driven bottom-up prognosis for PEM and alkaline water electrolysis systems," Clean Air Task Force, Boston, MA, 2021.

[76] Bundesministerium für Wirtschaft und Klimaschutz, „Wettbewerbsfähige Strompreise für die energieintensiven Unternehmen in Deutschland und Europa sicherstellen," 05 05 2023. [Online]. Available: https://www.bmwk.de/Redaktion/DE/Downloads/W/wettbewerbsfaehige-strompreise-fuer-die-energieintensiven-unternehmen-in-deutschland-und-europa-sicherstellen.pdf?__blob=publicationFile&v=6. [Zugriff am 15 08 2024].

[77] Bundesnetzagentur, „SMARD - Strommarktdaten für Deutschland," 2024. [Online]. Available: https://www.smard.de/. [Zugriff am 29 07 2024].

[78] M. S. Peters, T. K. D. und R. E. West, Plant design and economics for chemical engineers, Singapore: McGraw-Hill, 2003 (5th ed.).

[79] Alibaba, „Pingxiang Thong Tai (Factory Direct Sale Methanation Catalyst SNG / COG)," [Online]. Available: www.alibaba.com. [Zugriff am 15 09 2020].

[80] Alfa Aesar, „Copper based methanol synthesis catalyst, bulk estimation," [Online]. Available: www.alfa.com. [Zugriff am 19 08 2020].

[81] Trading Economics, „EU Natural Gas TTF," 2022. [Online]. Available: https://tradingeconomics.com/commodity/eu-natural-gas. [Zugriff am 15 05 2024].

[82] Methanol Institute, „Methanol Price and Supply/Demand," 2022. [Online]. Available: https://www.methanol.org/methanol-price-supply-demand/. [Zugriff am 15 05 2024].

[83] *Neufassung der Ersten Allgemeinen Verwaltungsvorschrift zum Bundes-Immissionsschutzgesetz (Technische Anleitung zur Reinhaltung der Luft – TA Luft),* 2021.

[84] Wiegand-Glas, „Nachhaltigkeitsbericht 2021," Wiegand-Glas, Steinbach am Wald, 2021.

[85] Europäische Union, *Richtlinie (EU) 2023/2413 ("Erneuerbare-Energien-Richtlinie/RED III"),* Brüssel: Europäische Union, 2024.

[86] F. Habermeyer, V. Papantoni, U. Brand-Daniels und R.-U. Dietrich, „Sustainable aviation fuel from forestry residue and hydrogen - a techno-economic and environmental analysis for an immediate deployment of the PBtL process in Europe," *Sustainable Energy & Fuels,* Bd. 7, pp. 4229-4246, 2023.

[87] G. Towler und R. Sinnott, Chemical engineering design: Principles, practice and economics of plant and process design, Burlington, MA: Butterworth-Heinemann, 2008.

[88] C. Noack, F. Burggraf, S. Schwan Hosseiny, P. Lettenmeier, S. Kolb, S. Belz, J. Kallo, K. A. Friedrich, T. Pregger, K. Kiên Cao, D. Heide, T. Naegler, F. Borggrefe, U. Bünger, J. Michalski, T. Raksha, C. Voglstätter, T. Smolinka, F. Crotogino, S. Donadei, P.-L. Horvath und G.-S. Schneider, *Studie über die Planung einer Demonstrationsanlage zur Wasserstoff-Kraftstoffgewinnung durch Elektrolyse mit Zwischenspeicherung in Salzkavernen unter Druck,* Stuttgart: Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit, 2014.

[89] M. Samei und A. Raisi, „Separation of nitrogen from methane by multi-stage membrane processes: Modeling, simulation, and cost estimation," *Journal of Natural Gas Science and Engineering,* Bd. 98, p. 104380, 2022.

[90] G. Parks, R. Boyd, J. Cornish und R. Remick, „Hydrogen station compression, storage, and dispensing. Technical status and cost," U. S. Department of Energy, Oak Ridge, TN, 2014.

Anhang

A. Berechnungsgrundlage Nettoherstellungskosten (NPC)

Die Formel zur Berechnung der Nettoherstellungskosten (Net Production Costs, NPC) besteht aus den annualisierten Kapitalkosten (Annual Capital Cost, ACC), Betriebskosten (Operational Expenditure, OPEX), Lohnkosten (Operating Labor, OL) und Verkauf des Nebenprodukts (Byproduct, BP) (Gleichung 12). ACC ist definiert als die Annualisierung der fixen Kapitalinvestitionen (Fixed Capital Investment, FCI), die mit der Anlagenlebensdauer und dem Zinssatz korrelieren [33]. Im Allgemeinen wird FCI als Multiplikation der Equipments-Kosten (Equipment Costs, EC) und der Kostenfaktoren der Investitionsausgaben (Capital Expenditure, CAPEX) definiert [78]. Wenn EC bereits als "Turn key" definiert ist, ist FCI gleich EC und die CAPEX-Kostenfaktoren werden nicht angewendet. Für PEM werden nur die Kostenfaktoren für die Installation, den Grundstückausbau, den Rechtsschutz, den Auftragnehmer und die Unwägbarkeit angewandt. Für AEL und Nasswäscher haben Habermeyer et al. [86] andere Werte für die CAPEX-Kostenfaktoren vorgeschlagen.

$$NPC\left[\frac{€}{MWh_{LHV}}\right] = \frac{ACC\left[\frac{€}{a}\right] + \sum OPEX\left[\frac{€}{a}\right] + OL\left[\frac{€}{a}\right] - B \quad Verkauf\left[\frac{€}{a}\right]}{12{,}2\ MW_{LHV} \cdot FL \quad \left[\frac{h}{a}\right]} \tag{12}$$

$$EC_{i,ref} = EC_{ref} \times \left(\frac{sizing_i}{sizi \quad ref}\right)^n \times \left(\frac{CEPC\ _{2022}}{CEPC\ _{ref}}\right) \tag{13}$$

$$EC_{i,poly} = [\, e \cdot (sizing_i)^2 + f \cdot sizing_i + g] \times \left(\frac{CEPCI_{2022}}{CEPCI_{ref}}\right) \tag{14}$$

EC wird entweder mit einer Referenzfunktion ($EC_{i,ref}$, Gleichung 13) oder einer Polynomfunktion ($EC_{i,poly}$, Gleichung 14) berechnet. Grundsätzlich hängt EC von der Dimensionierung des Equipments ($sizing_i$) ab, z.B. vom Leistungsbedarf, der Wärmeübertragungsfläche, dem Volumen, dem molaren Durchfluss, usw. Die Referenzfunktion erfordert eine Kostenreferenz des Equipments (EC_{ref}) mit seiner Dimensionierung ($sizing_{ref}$). Aufgrund von Skaleneffekten hat der Skalierungsfaktor zwischen $sizing_i$ und $sizing_{ref}$ eine exponentielle Korrelation von n. Die Polynomfunktion erfordert Polynomkonstanten (e,f,g), um EC zu schätzen. Tabelle 32 und Tabelle 32 fassen die in dieser Studie implementierten EC-Funktionen zusammen.

Tabelle 32: EC mit Referenzfunktion (ECi,ref)

Referenzfunktion	EC_{ref}	€/$	si-zing$_{ref}$	Sizing-Einheit	n	$Jahr_{ref}$	Quelle
Kompressor	3.035	$	1	Leistungsbedarf [kW_{el}]	0.68	2002	[78]
Zentrifugalpumpe	16.809	$	1	Volumenfluss [m³/s]	0.36	2002	[78]
Destillationskolonne	286.343	$	100	Size-Faktor = $HxD^{1.5}$ [$m^{2.5}$]	0.53	2007	[36, 87]
PEM-Elektrolyseur	957	€	1	Leistungsbedarf [kW_{el}]	1	2016	[88]
AEL-Stack	800	T€	0,005	H_2 Produktion [kg/s]	1	2019	[86]
AEL-Balance-of-Plant	1	M€	0,025	H_2 Produktion [kg/s]	0.8	2019	[86]
Nasswäscher	13.061	T$	14	Glasofenhitze [MW_{th}]	0.72	2012	[86, 46]
Membrane PMP (Turn key)	9.760	T$	525,6	Molardurchfluss [kmol/h]	0.6	2020	[89]
TREMP™-Festbettreaktor	57.794	$	14.000	Volumenfluss [m³/h]	0.52	2007	[36]
H_2 Speicher ISO (Turn key)	832	T$	34,48	Volum [m³]	0.82	2007	[90]

Tabelle 33: EC mit Polynomfunktion (ECi,poly)

Polynomfunktion	e	f	g	Sizing unit	€/$	$Jahr_{ref}$	Quelle
Lurgi Rohrbündelreaktor	0	156.03	11.910	Rohranzahl [-]	$	2002	[78, 35]
Rohrbündelwärmeübertrager	0	201.29	3.853	WÜ-Fläche [m²]	$	2002	[78]
Flashtrommel/Kühlfalle	-2,21	369.75	805	Länge & Durchmesser [m]	$	2002	[78]
Speichertank	0	936.66	1.547	Volum [m³]	$	2002	[78]

B. Definition von Key Performance Indikatoren (KPI)

Techno-ökonomische Studien erfordern KPIs, um die analysierten Prozesse zu bewerten. KPIs helfen dabei, eine Merit-Order der verschiedenen Fälle zu erstellen und den effizientesten Prozess zu ermitteln. In dieser Studie werden 2 KPIs definiert, nämlich Power-to-Fuel Wirkungsgrad (η_{PtF}) und H_2-to-Fuel Wirkungsgrad (η_{HtF}). Der erste KPI (Gleichung 15) vergleicht die Brennstoffproduktionsmenge ($\dot{m_{fuel}}$) und den Brennstoffheizwert (LHV_{fuel}) mit dem gesamten elektrischen Leistungsbedarf der Anlage (W_{el}).

$$\eta_{PtF} = \frac{\dot{m_{fuel}} \cdot LHV_{fuel}}{W_{el}} \quad (15)$$

$$\eta_{HtF} = \frac{\dot{m_{fuel}} \cdot LHV_{fuel}}{\dot{m_{H_2}} \cdot LHV_{H_2}} \quad (16)$$

Der andere KPI (Gleichung 16) gibt an, wie effizient der Syntheseprozess bei der Umwandlung des chemischen Energiegehalts von H_2 in den chemischen Energiegehalt der Syn-Fuels ist. Dieser KPI ermöglicht eine energetische Bewertung von PtG-Prozessen ohne Berücksichtigung des Elektrolyseur-Wirkungsgrads. Sollte sich der Elektrolyseur-Wirkungsgrad in Zukunft ändern, würde sich η_{PtF} ändern, aber η_{HtF} würde gleichbleiben.

C. Benennung/Beschreibung der TRL-Stufen

TRL-Stufe	Beschreibung [https://www.ptj.de/lw_resource/datapool/systemfiles/cbox/2373/live/lw_file/definition_des_technologischen_reifegrades.pdf am 28.09.2024]
9	Qualifiziertes System mit Nachweis des erfolgreichen Einsatzes
8	Qualifiziertes System mit Nachweis der Funktionstüchtigkeit im Einsatzbereich
7	Prototyp im Einsatz
6	Prototyp in Einsatzumgebung
5	Versuchsaufbau in Einsatzumgebung
4	Versuchsaufbau im Labor
3	Nachweis der Funktionstüchtigkeit einer Technologie, „Proof of Concept
2	Beschreibung des Technologiekonzepts und/oder der Anwendung einer Technologie
1	Beobachtung und Beschreibung des Funktionsprinzips

Ergänzungen

1 Positionen des Zahlenmäßigen Nachweises

Durch die HVG wurden Ausgaben in den Positionen 0812 (Beschäftigte E12-E15) und 0846 (Dienstreisen) abgerechnet. Auch durch das DLR wurden Ausgaben in den Positionen 0812 (Beschäftigte E12-E15) und 0846 (Dienstreisen) abgerechnet.

2 Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Projektarbeit

Durch die Entwicklung und Simulation der betrachteten Prozesskette haben wir die Evaluation von Carbon Capture Technologien und der Umwandlung von CO_2 aus dem Abgas einer Glasproduktion mit Power-to-Gas Technologien ermöglicht, ohne dass der Aufbau einer Pilotanlage notwendig war. Mit dieser Arbeit haben wir nicht nur erstmals ein vollständiges und detailliertes Konzept zur CO_2-neutralen Glasproduktion geschaffen, sondern bieten auch eine Entscheidungsgrundlage für zukünftige Entwicklungen in der Glasproduktion in Deutschland und Europa. Durch die kostenneutrale Verlängerung des Vorhabens konnten wir zusätzlich zeigen, welche Auswirkungen eine dynamische Wasserstoffproduktion auf die Prozesskette hat. Weiterhin konnten wir erkennen, dass Anreicherungen von Nebenbestandteilen in einem Kreislaufprozess problematisch sein können, wenn sie nicht mitberücksichtigt werden.
Für die erfolgreiche Durchführung des Vorhabens und den wissenschaftlichen Anspruch waren das beschäftigte Personal notwendig und der Zeitaufwand angemessen.

3 Voraussichtlicher Nutzen des Projekts

Das Projekt ermöglicht die Einordnung der evaluierten Prozessketten hinsichtlich ihrer ökonomischen Machbarkeit und ist daher für Glashersteller von großem Interesse. Bei Beiträgen zum Projekt auf Fachtagungen stieß daher das Projekt auf großes Interesse. Auch war das Interesse der Glashersteller für die Umsetzung im Rahmen einer Pilotanlage groß. Allerdings ist die Wirtschaftlichkeit der Prozesskette nach unseren ermittelten Erkenntnissen für eine vergleichbare Glasproduktion mit einer Tonnage von 300 t am Tag (noch) nicht gegeben: Für die Synthese von

Brennstoff ist die Menge an CO_2-Emissionen eher gering, sodass die Kosten für die Anlagen verhältnismäßig hoch ausfallen. Noch stärker wirkt sich der erwartete hohe Strompreis in Deutschland auf den ökonomischen Nutzen aus. Insofern bietet das Projekt einen wichtigen Beitrag zum Diskurs, wie eine CO_2-neutrale Glasproduktion zu realisieren ist, auch wenn bzw. gerade weil, die ermittelten Kosten zur Vermeidung von CO_2 sehr hoch liegen.

4 Fortschritte zum Projekt von Seiten Dritter

Uns sind keine Fortschritte seitens Dritter bekannt, die die Ergebnisse des Projekts beeinflussen. Alternative Verfahren zur Vermeidung von gemengebedingten CO_2-Emissionen werden derzeit in Kreisen der Glashersteller und der Forschung diskutiert, insbesondere durch Umwandlung von CO_2 aus Abgasen in Soda. Bisher sind uns diesbezüglich aber noch keine Projekte oder nennenswerte Forschungsleistungen bekannt.

5 Geplante und durchgeführte Veröffentlichungen zum Projekt

Zum Projekt sind nach aktuellem Stand drei Veröffentlichungen geplant bzw. abgeschlossen.

1. Der grundlegende Kreislaufprozess mit Methan als Brennstoff und einem PEM Elektrolyseur zur Synthese von Wasserstoff wurde in der HVG Mitteilung 2176 beschrieben. Die Publikation umfasst die technologische Beschreibung der Prozesskette. Die Veröffentlichung erfolgte über den HVG Newsletter 2024(2).
2. Der grundlegende Aufbau eines Kreislaufprozesses mit Carbon Capture and Utilization kombiniert mit Power-to-Gas Technologien soll in einer geplanten Veröffentlichung thematisiert werden. Technische Randbedingungen für diesen Kreislauf anhand des Beispiels von Methan als synthetischer Brennstoff stellen den zentralen Bestandteil der Veröffentlichung dar. Eine grundlegende ökonomische Beurteilung des Kreislaufs ist ebenfalls Teil der Betrachtung. Diese Veröffentlichung ist in der Zeitschrift Glass Europe geplant (2025).
3. Der Vergleich verschiedener Technologieketten hinsichtlich ihrer techno-ökonomischen Evaluation ist für eine weitere Veröffentlichung geplant. In dieser Veröffentlichung sollen die fünf im Projekt betrachteten Fälle miteinander verglichen werden. Die Veröffentlichung soll im Journal of Cleaner Production erfolgen (2025).

Weiterhin wurde das Projekt auf folgenden Veranstaltungen vorgestellt:

- ReInvent / KlimPro Workshop, Offenbach a. M. (29. März 2022)
- Fachausschuss 2/6 der DGG, Online-Meeting (18. April 2022)
- 26th International Congress on Glass, Berlin (03. – 08. Juli 2022)
- ProcessNet und Dechema Jahrestagung, Frankfurt (12. – 15. September 2022)
- ReInvent / KlimPro Statusmeeting, Berlin (2. November 2022)
- AK Energie des BVGlas, Düsseldorf (15. März 2023)
- Hannover-Messe, Hannover (17. April 2023)
- Fachausschuss 2/6 der DGG, Würzburg (18. April 2023)
- ReInvent / KlimPro 1. Statuskonferenz, Berlin, (26. – 27. April 2023)
- USTV-DGG Joint Meeting, Orléans (22. – 24. Mai 2023)
- GlassTrend: Smart Sustainable Glass Manufacturing, Grenoble (17. – 18. Oktober 2023)
- 1. DECHEMA Jahrestreffen, Frankfurt a. M. (11. – 12. März 2024)
- 97. Glastechnische Tagung der DGG, Aachen (27. – 29. Mai 2024)
- DECHEMA Forum, Frankfurt a. M. (11. – 13. September 2024)