

**ZE:**

Nobian GmbH

**Förderkennzeichen:**

03EW0006A

**Vorhabensbezeichnung:**

Verbundvorhaben Carbon2Chem-2 - L2: Dynamische Methanol-Produktion aus Hüttengasen

**Laufzeit des Vorhabens:**

01.06.2020 – 31.05.2024

**Gefördert vom Bundesministerium für Bildung und Forschung aufgrund eines Beschlusses des deutschen Bundestages****Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Autor****Autor:** Peter Kalteier

## 1.1 Projekt-Überblick und -Struktur

In der Phase II des C2C Projekts war der Fokus in einer breiteren Simulation des dynamischen Verhaltens der einzelnen Prozessströme in Bezug auf verschiedene Produktportfolios (über Methanol hinaus), um deren Machbarkeit und Wirtschaftlichkeit zu untersuchen. Nobian selbst war aber, wie in der Phase I, nur im Bereich der Methanolerzeugung involviert.

Eine weitere Herausforderung im Carbon2Chem®-Projekt ist die Integration der Methanolanlage in einen komplexen Anlagenverbund aus dynamisch agierendem Hüttenwerk, Kraftwerk sowie einer Versorgung mit Wasserstoff aus fluktuierenden erneuerbaren Energien, welcher in Teilprojekt L0 betrachtet wird.

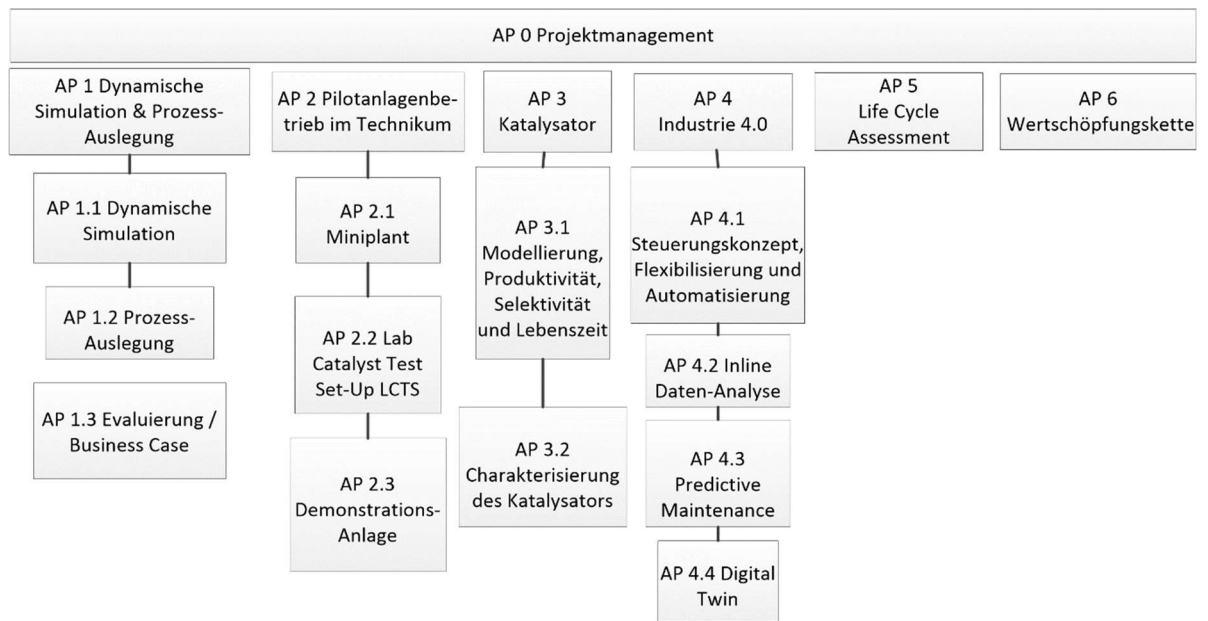
Zur Bearbeitung der Aufgaben besteht das Teilprojekt L2 (manchmal auch L-II genannt) aus verschiedenen Arbeitspaketen, die sich jeweils mit unterschiedlichen technischen und wissenschaftlichen Fragestellungen befassen.

### Übersicht der Ergebnisse

Nobian hat alle APx (Arbeitspakete) konsolidiert und das L2-Konsortium koordiniert, ihre zugesagten Ergebnisse zu den entsprechenden Meilensteinen ("Milestones") zu liefern. Das Konsortium (Verbundvorhaben Carbon2Chem-2 - L2) bestand aus:

- Nobian (vormals Nouryon),
- Clariant,
- Fraunhofer Umsicht,
- Fraunhofer ISE,
- tkIS (thyssenkrupp) und
- Ruhr-Universität Bochum (RUB).

Die folgende Abbildung 1 zeigt die Arbeitspakete für das Teilprojekt L2:



Fast alle Meilensteine wurden erfolgreich erreicht.

Abb. 1

Die dazugehörigen Meilensteine sind in der nachfolgenden Tabelle aufgelistet:

<b>Nr.</b>	<b>Ziel</b>	<b>Verantwortlich</b>	<b>Termin</b>	<b>Status</b>
1.1	<i>Blockfließbilder und Massenbilanzen wurden für alle Prozesskonzepte erstellt.</i>	<i>ISE/thyssenkrupp</i>	<i>06/2021</i>	<i>Erledigt</i>
1.2	<i>Pre-Design-Pakete wurden für ausgewählte Prozesskonzepte erstellt.</i>	<i>ISE/thyssenkrupp</i>	<i>03/2023</i>	<i>Erledigt</i>
1.3	<i>Zusammenstellung des Business Case für ausgewählte Prozesskonzepte liegt vor.</i>	<i>thyssenkrupp</i>	<i>01/2024</i>	<i>Erledigt</i>
2.1	<i>Prädiktives Steuerungsmodell der Reaktortemperatur für adiabaten Reaktor in Miniplant entwickelt</i>	<i>ISE</i>	<i>06/2022</i>	<i>Erledigt</i>
2.2	<i>Demonstrationsanlage umgesetzt von Oberhausen an das Carbon2Chem®-Technikum in Duisburg, Einbindung der Anlage erfolgt und Inbetriebnahmeprüfung durchgeführt</i>	<i>UMSICHT</i>	<i>12/2021</i>	<i>Erledigt</i>
2.3	<i>Bestimmung des Aktivitätsverlusts des industriellen Katalysators von Clariant unter CO<sub>2</sub>-reichen Bedingungen an Demonstrationsanlage im Langzeittest</i>	<i>UMSICHT</i>	<i>12/2023</i>	<i>Erledigt</i>
2.4	<i>Entscheidung über den Fortgang der Arbeiten mit der Demonstrationsanlage bis zum Projektende mit den Teilprojektpartnern abgestimmt</i>	<i>UMSICHT/ thyssenkrupp/ Nobian</i>	<i>06/2023</i>	<i>Erledigt</i>

<b>Nr.</b>	<b>Ziel</b>	<b>Verantwortlich</b>	<b>Termin</b>	<b>Status</b>
3.1	An die Anforderungen von Carbon2Chem® angepasstes Kinetikmodell auf Basis der Kinetikmessungen des MPI-CEC entwickelt	ISE	06/2022	Erledigt
3.2	Belastbarer Vergleich zwischen dem industriellen Katalysator von Clariant und dem neuen Lead für CO-reiches sowie für CO <sub>2</sub> -reiches Synthesegas liegt vor	Umsicht/ISE/Clariant	06/2022	Erledigt
3.3	Detaillierte Aufstellung von Vergiftungsmechanismen und Identifizierung von neuen Katalysatorphasen und -gifte	RUB	12/2023	Erledigt
3.4	Aufstellung kinetischer Modelle für die reversible sowie irreversible Vergiftung und Identifizierung der Zentren für die CO-Dampfkonzentrationsreaktion und die Alkenhydrierung	RUB	4/2024	Erledigt
4.1	Automatisierte Datenerfassung, -speicherung und -bearbeitung auf dem Carbon2Chem® DataSpace umgesetzt	UMSICHT	12/2021	Erledigt
4.2	Prädiktive Regelung für isothermen Reaktor anhand von Gaszusammensetzung und Temperaturprofilen erstellt und realisiert	UMSICHT	06/2023	Erledigt

<b>Nr.</b>	<b>Ziel</b>	<b>Verantwortlich</b>	<b>Termin</b>	<b>Status</b>
4.3	Anhand von Prozessdaten aus Langzeitversuchen und Prozesssimulationen ist eine Vorhersage für Katalysatortausch (Predictive Maintenance) möglich und ein erstes Konzept für einen digitalen Zwilling erstellt	UMSICHT	12/2023	Erledigt
5.1	Die Systemgrenzen der LCA sind mit L-0 abgestimmt.	ISE	02/2021	Erledigt
5.2	Das Lebenszyklusinventar ist mit Primär- bzw., wo nicht verfügbar, möglichst repräsentativen Sekundärdaten befüllt.	ISE	05/2022	Erledigt
5.3	Für die abgestimmten Szenarien sind die Umweltwirkungen quantifiziert.	ISE	12/2023	Erledigt
6.1	Marktrecherche für Carbon2Chem® -Methanol liegt vor	Nobian	12/2023	Erledigt
6.2	Schnittstellen zur Verwendung des Methanols im Kraftstoffbereich sind definiert und verschiedene Geschäftsmodelle für die Verwertung von Methanol eruiert	UMSICHT	06/2023	Erledigt

Tabelle 1: Meilensteinplanung im Teilprojekt L2

Nachfolgend finden Sie eine detailliertere Erläuterung der in diesem Zeitraum durchgeführten Aktivitäten. Einige Konsortialpartner setzen ihre Aktivitäten bis Dezember 2024 fort.

## 1.1 AP 0 - Projektmanagement (Leitung: Nobian)

Die Leitung dieses Teilprojekts beinhaltet neben der internen Koordination der teilnehmenden Partner auch besonders die Kommunikation und Absprache mit dem übergeordneten und das Gesamtvorhaben steuernden Teilprojekt L-0. Kernthemen dieses Arbeitspakets sind Projektleitung, Kommunikations- und Dokumentationsmanagement, Berichterstattung an die Geber öffentlicher Zuwendungen, und Allgemeine Berichterstattung.

Die Abstimmung der Projektpartner erfolgte in zahlreichen Telefonkonferenzen und Treffen. Die nachfolgenden waren die wichtigsten Treffen und Besprechungen (übergeordnet):

- 02.06.2020: Fachtreffen L-II und Koordinatorenkreis (L-KK), Besprechung der Strategie für die zweite Phase (virtuell)
- 27.10.2020: Carbon2Chem-Konferenz (virtuell)
- 03.12.2020: L-II-Teilprojekttreffen (virtuell)
- 05.02.2021: Fachtreffen L-II und L-KK, Besprechung der Versuchsergebnisse am Technikum Duisburg und Festlegung der weiteren Vorgehensweise.
- 23.04.2021: Vollversammlung
- 07.06.2021: Koordinationstreffen: Konzeptvergleich
- 18.06.2021: L-II-Teilprojekttreffen
- 10.09.2021: Großes Performance Review im Rahmen der Koordinatorenrunde
- 23.-24.11.2021: Carbon2Chem-Konferenz und Projekttreffen (virtuell)
- 13.09.2022: Teil 2 des Online-Workshops „Every day for future – Transformation im Zuge der Energiewende – Ansprache und Vermittlung“ Online-Workshop-Every-day-for-future
- 15.09.2022: Carbon2Chem/ L2 Methanol Projekttreffen (Frankfurt)
- 03. – 04.11.2022: 5. Konferenz zur nachhaltigen chemischen Konversion in der Industrie Carbon2Chem-Konferenz (Düsseldorf)
- 03.11.2022: Konferenz mit externen Teilnehmenden im hybriden Format
- 04.11.2022: Vollversammlung des Projektkonsortiums (die Anmeldung hierfür konnte über das Anmeldeportal zur Konferenz am 03.11.2022 vorgenommen werden), ebenfalls im hybriden Format
- 14-tägige Besprechungen der LII Partner (Jour Fixe, online) geleitet vom LII Koordinator (Katharina Menzel - Nobian; Fernanda Neira D'Angelo - Nobian)
- 31.01.2023 Gemeinsamer Besuch des „Carbon2Chem“- Technikums (Nobian und TKIS)
- 14.03.2023 Carbon2Chem Community: Besprechung über regulatorische Rahmenbedingungen
- 26.04.2023 Teilnahme am L-Leiter-Treffen
- 28.04.2023 Besuch der Koordinatoren im „Carbon2Chem“ Technikum: Feststellung „Status Demoplant Aufbau“

- 05. – 07.06.2023 Carbon2Chem Präsentationen während der „Bunsen-Tagung“, Berlin
  - 19. – 20.06.2023 Carbon2Chem/L2 Methanol Projekttreffen (Duisburg/Oberhausen)
  - 27.06.2023 Koordinationskreistreffen - Schwerpunkt Performance Review
  - 09.10.23 Carbon2Chem: Regulatorische Rahmenbedingungen
  - 16.10.23 Carbon2Chem/L2 Methanol Projekttreffen (Duisburg)
  - 17. – 18.10.2023: Konferenz zur nachhaltigen chemischen Konversion in der Industrie, Carbon2Chem-Konferenz (Düsseldorf)
  - 17.10.2023: Konferenz mit externen Teilnehmenden im hybriden Format
  - 18.10.2023: Vollversammlung des Projektkonsortiums (die Anmeldung hierfür konnte über das Anmeldeportal zur Konferenz am 17.10. vorgenommen werden), ebenfalls im hybriden Format
  - 15.11.2023 Teilnahme am L-Leiter-Treffen
  - 29.11.2023 Carbon2Chem - Abstimmung Antragstellung „Phase 3“, d.h. 14-tägige Abstimmungsbesprechungen mit den LII-Partnern dazu
- Zusätzlich zu den obigen Treffen gab es weitere Teams-Meetings zur Abstimmung

Die Koordination seitens Nobian wechselte (von Kontaktperson Katharina Menzel zur neuen Kontaktperson Fernanda Neira D'Angelo) und zwar erfolgte dies am Ende des letzten Berichtszeitraums (31.12.2022). Im Arbeitspaket AP3 wurden einige Aktivitäten in Bezug auf die kinetische Modellierung der Methanolsynthese (neuer verbesserter Katalysator von Clariant) vom MPI zu FH-ISE verschoben. Außerdem haben einige Partner (FH-Umsicht und FH-ISE) eine Projektverlängerung bis Ende 2024 beantragt (eigentliches Projektende: 31.05.2024).

### 1.3 AP 1 - Dynamische Simulation & Prozess-Auslegung (Leitung: Fraunhofer ISE)

Die wichtigsten Ergebnisse des AP1-Teams sind:

- 14-tägige Besprechung mit den Partnern (thyssenkrupp Industrial Solutions, Fraunhofer UMSICHT, Nobian)
  - Diskussion der Schnittstellen zu L-0 (dort: AP6) und L-III, zur Process Design Community (Vertreter für L-II ist Matthias Krüger, tkIS)
  - Erstellung der Design Basis
  - Erstellung von austauschbaren (anpassbaren) Bausteinen (z.B. verschiedene Methanolsorten)
  - Definition von Prozesskonzepten, Entwicklung von Blockflussdiagrammen und Massenbilanzberechnungen für alle Prozesskonzepte
  - Erstellung eines Business Case für ausgewählte Verfahrenskonzepte
  - Definition von Schnittstellen für den Einsatz von Methanol im Kraftstoffsektor und Ermittlung verschiedener Geschäftsmodelle für den Einsatz von Methanol
  - Detaillierte Simulation und technisch-wirtschaftliche Analyse für die Haupt- und Alternativprozesskonzepte
  - Validierung der Prozesssimulation mit Daten aus der realen Anlage
  - Entwicklung von Korrelationen zwischen Prozessbedingungen und Produktion von Verunreinigungen, als Grundlage für die Verbesserung der nachgeschalteten Trennstrecke
- 
- ISE Durchführung eines Fachaustauschs zum Thema Kostenschätzung mit UMSICHT, Siemens, tkIS, Austausch einer Tabellenkalkulation durch Sebastian Stießel (UMSICHT) (virtuell)
    - Kostenrechnung: Keine einfache Gemengelage aufgrund des Kartellrechts (Die Anlagenbauer Linde und tkIS müssen sich bei der Kostenrechnung stark zurückhalten, da ihnen sonst Preisabsprache vorgeworfen werden könnte). Es sollen im Projekt Literaturwerte und gängige Schätzmethode verwendet werden, was allerdings zu einer weniger präzisen Kostenschätzung führen dürfte. Schnittstellenabsprache nötig zu L-0-AP „Technoökonomische Bewertung“
  - Diskussion und Erweiterung der Konzeptmatrix, die schließlich am 13.01.2021 vor L-KK vorgestellt wurde, daraus abgeleitet zwei Konzepte (Ammoniak/Urea und Methanol (BFG oder CO<sub>2</sub>))
  - ISE Planung eines Mini-Engineerings im Sommer 2021, Durchführung durch mehrere Mitarbeitende der involvierten Partner, idealerweise in Form eines zweiwöchigen Blockseminars im Technikum Duisburg. Erstellung von Fließbildern, Kostenrechnungen, Apparateauslegungen für die Konzepte. Zeitpunkt und tatsächliche Ausgestaltung abhängig von der weiteren Entwicklung der Pandemie

### **Meilenstein im Berichtszeitraum: MS 1.1 „Blockfließbilder und Massenbilanzen wurden für alle Prozesskonzepte erstellt.“**

- Die Blockfließbilder und Massenbilanzen wurden teilprojektübergreifend abgestimmt und von den jeweiligen Spezialisten simuliert
- Um eine konsistente Simulation zu gewährleisten und das Know-How der Projektpartner einzubinden, wurden die Simulationsergebnisse einzelner Anlagenteile zwischen den Partnern verglichen
- ISE hat die Simulation der Methanolsynthese-Loop für den BFG<sup>1</sup>-Fall angepasst
- Erarbeitet wurde hier eine Kennziffer für das Mischungsverhältnis von H<sub>2</sub>/BFG (R<sub>H2</sub>)
- Zusätzlich wurde ein Flash-Modell für die Bedingungen in der Methanolsynthese-Loop auf der Basis von Literaturdaten angepasst
- Ein Modell der Dampftrommel würde im Simulationsmodell ergänzt, um eine möglichst exakte Wärmeintegration zu ermöglichen
- Die Simulationsergebnisse wurden in die hierfür vorgesehene Austauschdatei geschrieben
- Die Daten wurden an die Partner weitergegeben (Koordination Matthias Krüger, tkIS), damit weiterführende Arbeiten wie Auslegung des Dampfkreislaufs und die Kostenschätzung durchgeführt werden können (siehe Auszug aus der HMB)

Damit ist der Meilenstein MS 1.1 erfüllt.

#### Kostenmodell für den Vergleich alternativer Prozesskonzepte

- Im Rahmen einer Abschlussarbeit wurde ein Kostenmodell für die CO<sub>2</sub>-basierte Methanolsynthese erarbeitet, welches sich mit geringem Aufwand auch auf die BFG-basierte Synthese übertragen lässt
- Das erarbeitete Tool kann zukünftig zur techno-ökonomischen Optimierung der Prozessbedingungen herangezogen werden, falls hierfür im Projekt Bedarf besteht

#### Validierung der Miniplant-Experimente (Vorbereitung fürs Model Predictive Control)

- Zur Validierung der Experimente an der ISE-Miniplant wurde diese in MATLAB Simulink in einem Modell nachgebildet
- Das zuvor veröffentlichte Kinetikmodell<sup>2</sup> wurde hierfür im adiabaten Reaktormodell angewandt
- Eine Schnittstelle zwischen den experimentellen Daten aus AP2 und der Simulation wurde aufgebaut
- Die Modellvalidierung wurde über 1300 Betriebsstunden mit etwa 2000 stationären Arbeitspunkten durchgeführt
- Die Simulation der Arbeitspunkte zeigte, dass der Abscheider der Miniplant nicht optimal abgebildet werden konnte, da sich dieser in der Realität nicht ideal verhält

---

<sup>1</sup> Blast Furnace Gas (BFG) = Hochofengas

<sup>2</sup> Nestler, F.; Müller, V. P.; Ouda, M.; Hadrich, M. J.; Schaadt, A.; Bajohr, S.; Kolb, T. (2021): A novel approach for kinetic measurements in exothermic fixed bed reactors: advancements in non-isothermal bed conditions demonstrated for methanol synthesis. In *React. Chem. Eng.* 6 (6), pp. 1092–1107. DOI: 10.1039/D1RE00071C.

- Durch Einfügen eines Abscheidewirkungsgrades von 91,4% konnte eine hohe Übereinstimmung von >90% zwischen den simulierten und gemessenen Werten für WTY, Loop-Zusammensetzung und Reaktoraustrittstemperaturen erzielt werden
- Die Optimierung der Arbeitspunkte der Miniplant wurde durchgeführt und ergab eine vielversprechende Perspektive für das adiabate Anlagenkonzept und die modellgestützte Optimierung des Anlagenbetriebs

**Meilenstein: MS 1.2 „Pre-Design-Pakete wurden für ausgewählte Prozesskonzepte erstellt.“  
(im Detail im Schlussbericht anderer Projektpartner behandelt)**

**Meilenstein: MS 1.3 „Zusammenstellung des Business Case für ausgewählte Prozesskonzepte liegt vor.“  
(im Detail im Schlussbericht anderer Projektpartner behandelt)**

## **1.4 AP 2 - Pilotanlagenbetrieb in Technikum (Leitung: thyssenkrupp Industrial Solutions)**

**sowie**

## **1.5 AP 3 - Katalysator (Leitung: Clariant)**

- Teilnahme an der 14-tägigen Besprechung mit den Partnern (tkIS, Nouryon, UMSICHT, Clariant, RUB)
- Teilnahme an der ca. 3-wöchigen Besprechung der Technikums-Versuchsplanung mit den Partnern (tk Steel, tkUES, tkUCE, tkIS, Nouryon, UMSICHT, MPI-CEC, Linde, Covestro). Durchsprache der Anlagen-Verfügbarkeiten, Revisionsplanung, Stillstandsplanung, sonstiger Austausch.
- Teilnahme an den regelmäßigen Besprechungen zu den Umbaumaßnahmen am Technikum (tk Steel, tkUES, tkUCE, tkIS, Nobian/Nouryon, UMSICHT, MPI-CEC). Koordination und technische Festlegung notwendiger Umbauten zwecks der Flexibilisierung des Technikums.
- Teilnahme am Performance Review (tk Steel, tkUES, tkUCE, tkIS, Nobian/Nouryon, UMSICHT, MPI-CEC). Regelmäßige Präsentation und gegenseitige Prüfung der Versuchsdaten, die im Technikum erreicht wurden.
- Verwaltung einer zentralen Datenbank zur Sammlung der Versuchsergebnisse
- Diskussion der zentralen und dezentralen Gasanalytik
- Input für ein zentrales Verfügbarkeits-Dashboard, das von UMSICHT geplant wird
- Lieferung notwendiger Arbeitssicherheitsdokumentation an tkSteel (in Phase 2 zuständig für das Technikumsgebäude)
- Abstimmung mit L4 Pilotanlagen Experiments
- Die wichtigsten Erfolge des AP2-Teams sind:
  - Demonstration der Methanolsynthese aus verschiedenen gereinigten und konditionierten Hüttengasen (z. B. BFG, BOFG, CO<sub>2</sub>) während monatelanger Betriebszeit und unter Verwendung verschiedener Reaktoren im Labor- und Miniplant-Maßstab
  - Durchführung der ersten stabilen experimentellen Kampagnen zur Synthese von Methanol aus gereinigten Stahlwerksgasen
  - Kinetische Modellierung und Verständnis für mögliche Katalysatorgifte und Vergiftungsmechanismen
  - Konzeption, Beschaffung und Anpassung einer Demonstrationsanlage FH-Umsicht Oberhausen
  - Die Demonstrationsanlage wurde von Oberhausen nach Duisburg verlegt und mit gereinigten Hüttengasen in Betrieb genommen

**Meilenstein: MS2.1 „Prädiktives Steuerungsmodell der Reaktortemperatur für adiabaten Reaktor in Miniplant entwickelt.“**

**(im Detail im Schlussbericht anderer Projektpartner behandelt)**

**Meilenstein: MS2.2 „Demonstrationsanlage umgesetzt von Oberhausen an das Carbon2Chem®-Technikum in Duisburg: Einbindung der Anlage erfolgt und Inbetriebnahmeprüfung durchgeführt.“**

**(im Detail im Schlussbericht anderer Projektpartner behandelt)**

**Meilenstein: MS2.3 „Bestimmung des Aktivitätsverlusts des industriellen Katalysators von Clariant unter CO<sub>2</sub>-reichen Bedingungen an Demonstrationsanlage im Langzeittest.“**

**(im Detail im Schlussbericht anderer Projektpartner behandelt)**

**Meilenstein: MS2.4 „Entscheidung über den Fortgang der Arbeiten mit der Demonstrationsanlage bis zum Projektende mit den Teilprojektpartnern abgestimmt.“**

**(im Detail im Schlussbericht anderer Projektpartner behandelt)**

**Meilenstein: MS3.1 „An die Anforderungen von Carbon2Chem® angepasstes Kinetikmodell auf Basis der Kinetikmessungen des MPI-CEC entwickelt.“**

**(im Detail im Schlussbericht anderer Projektpartner behandelt)**

**Meilenstein: MS3.2 „Belastbarer Vergleich zwischen dem industriellen Katalysator von Clariant und dem neuen Lead für CO-reiches sowie für CO<sub>2</sub>-reiches Synthesegas liegt vor.“**

**(im Detail im Schlussbericht anderer Projektpartner behandelt)**

**Meilenstein: MS3.3 „Detaillierte Aufstellung von Vergiftungsmechanismen und Identifizierung von neuen Katalysatorphasen und –gifte.“**

**(im Detail im Schlussbericht anderer Projektpartner behandelt)**

**Meilenstein: MS3.4 „Aufstellung kinetischer Modelle für die reversible sowie irreversible Vergiftung und Identifizierung der Zentren für die CO-Dampfkonvertierungsreaktion und die Alkenhydrierung.“**

**(im Detail im Schlussbericht anderer Projektpartner behandelt)**

## **1.6 AP 4 - Industrie 4.0 (Leitung: Umsicht)**

Das AP4-Team hat wichtige Schritte auf dem Weg zur Entwicklung eines digitalen Zwillings für die Prozesssteuerung und -optimierung gemacht.

- Realisierung des automatisierten Messwerteexports in den Carbon2Chem® DataSpace
- Nutzung der Daten für die Online-Überwachung der Demoanlage
- Bereitstellung von Daten für die Verifizierung von Simulationen
- Installation eines Vorhersagemodells zur Steuerung und Initiierung von Tests

**Meilenstein: MS4.1 „Automatisierte Datenerfassung, -speicherung und -bearbeitung auf dem Carbon2Chem® DataSpace umgesetzt.“**

**(im Detail im Schlussbericht anderer Projektpartner behandelt)**

**Meilenstein: MS4.2 „Prädiktive Regelung für isothermen Reaktor anhand von Gaszusammensetzung und Temperaturprofilen erstellt und realisiert.“**

**(im Detail im Schlussbericht anderer Projektpartner behandelt)**

**Meilenstein: MS4.3 „Anhand von Prozessdaten aus Langzeitversuchen und Prozesssimulationen ist eine Vorhersage für Katalysatortausch (Predictive Maintenance) möglich und ein erstes Konzept für einen digitalen Zwillig erstellt.“**

**(im Detail im Schlussbericht anderer Projektpartner behandelt)**

## 1.7 AP5 - Life Cycle Assessment (Leitung: Fraunhofer ISE)

Im Rahmen der ökologischen Betrachtung des Methanol-Prozesses in AP5 wurde ein Lebenszyklusinventar entworfen.

Für eine erste Abschätzung des Impacts der Methanolsynthese-Hardware (Produktion und Bereitstellung der notwendigen Infrastruktur, Katalysator) am Gesamt-Impact der Methanolsynthese (Infrastruktur + Betriebsphase) sind Werte für die Hüttengase (inkl. deren Impacts), Stromverbräuche, Abwasser usw. notwendig.

Selbst unter idealen Randbedingungen (sehr sauberer externer Wasserstoff, Hüttengase ohne Impact) besitzt die Methanolsynthese-Hardware einen vernachlässigbaren Impact (< 1%). Die Wasserstoff-Herstellung durch Elektrolyse verursacht die meisten Treibhausgasemissionen. Des Weiteren hat der Betrieb der Kompressoren einen signifikanten Einfluss.

- Regelmäßige Organisation von Terminen mit Nobian, Nobian und tkIS
- Teilnahme an den Terminen mit der LCA-Community
- Organisation eines Austauschtermins mit L-0, Schnittstellenbesprechung zu L-0 und L-III
- Das Hauptergebnis von AP5 ist die Fertigstellung der Ökobilanz für den fossilen Referenzfall und verschiedene Transformationsszenarien

### **Meilenstein: MS 5.1 „Die Systemgrenzen der LCA sind mit L-0 abgestimmt“**

- Abstimmen der Systemgrenzen und Szenarien für die LCA in LII sowohl mit der LCA-Community als auch gezielt mit Fachkollegen von Nobian und tkIS. Hierbei Einigung darauf, dass sich die LCA in L-II auf eine großskalige fossile Methanolsynthese konzentrieren soll. Dies ist eine Abweichung von der ursprünglichen Arbeitsplanung ab („Detailaspekte einer LCA für eine CO<sub>2</sub>-basierte Methanolsynthese“), liegt aber im übergeordneten Interesse der C2C-LCA-Community und steuert so den größeren komplementären Mehrwert zu den sonstigen LCA-Arbeiten im Rest des Projekts bei
- Aufstellen eines Dateninventars sowie Visualisierung der Systemgrenzen und Szenarien für eine großskalige fossile Methanolsynthese
- Abbildung des Dateninventars in der LCA-Software "Umberto LCA+"
- Erste Berechnungen der Umweltwirkungen, welche aus einer großskaligen fossilen Methanolsynthese resultieren können
- Präsentation dieser vorläufigen Ergebnisse vor der LCA-Community am 02.12.2021 (siehe Anhang %)
- Erste vorläufige Ergebnisse ergeben, dass eine Methanolerzeugung vor Ort bzw. in der Nähe zum Gasfeld mit einem sich anschließenden Transport innerhalb der analysierten Szenarien die geringsten Treibhausgasemissionen aufweisen kann (RUS: 0,65 t CO<sub>2</sub>eq/t MeOH; NOR: 0,56 t CO<sub>2</sub>eq/t MeOH), wohingegen das Referenzsystem (Methanol in DEU) rund 0,75 t CO<sub>2</sub>eq/t MeOH verursachen kann. Diese Ergebnisse sind als vorläufig zu betrachten, da sich die Voraussetzungen für die Szenarioarchitektur durch die gegenwärtigen geopolitischen Verwerfungen und den resultierenden Einfluss auf die Energie- und Rohstoffmärkte dynamisch ändern.

**Meilenstein: MS 5.2 „Das Lebenszyklusinventar ist mit Primär- bzw., wo nicht verfügbar, möglichst repräsentativen Sekundärdaten befüllt.“**  
**(im Detail im Schlussbericht anderer Projektpartner behandelt)**

**Meilenstein: MS 5.3 „Für die abgestimmten Szenarien sind die Umweltwirkungen quantifiziert.“**  
**(im Detail im Schlussbericht anderer Projektpartner behandelt)**

## 1.8 AP 6 - Wertschöpfungskette

### **Meilenstein: MS 6.1 „Marktrecherche für Carbon2Chem® -Methanol liegt vor.“**

Die Umsetzungsaussichten sind möglich, falls das Carbon2Chem® -Methanol trotz Verwendung von teurem Elektrolysewasserstoff einigermaßen wirtschaftlich hergestellt werden kann - allerdings mit einem längeren Zeithorizont als ursprünglich angenommen. Die Stahlindustrie hat ihre „Dekarbonisierungsstrategie“ geändert und dementsprechend ist eine „Phase III“ erforderlich, um die dynamischen Aspekte dieser Transformation, vor allem die Anwendbarkeit anderer Industriegase und die Bereitstellung von „Kreislaufkohlenstoff“ für die chemische Industrie neu zu bewerten.

### **Meilenstein: MS 6.2 „Schnittstellen zur Verwendung des Methanols im Kraftstoffbereich sind definiert und verschiedene Geschäftsmodelle für die Verwertung von Methanol eruiert.“**

**ZE:**

Nobian GmbH

**Förderkennzeichen:**

03EW0006A

**Vorhabensbezeichnung:**

Verbundvorhaben Carbon2Chem-2 - L2: Dynamische Methanol-Produktion aus Hüttengasen

**Laufzeit des Vorhabens:**

01.06.2020 – 31.05.2024

**Gefördert vom Bundesministerium für Bildung und Forschung aufgrund eines Beschlusses des deutschen Bundestages****Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Autor****Autor:** Peter Kalteier**Kurzfassung**

In der Phase II des C2C Projekts war der Fokus in einer breiteren Simulation des dynamischen Verhaltens der einzelnen Prozessströme in Bezug auf verschiedene Produktportfolios (über Methanol hinaus), um deren Machbarkeit und Wirtschaftlichkeit zu untersuchen. Nobian selbst war aber, wie in der Phase I, nur im Bereich der Methanolerzeugung involviert.

Eine weitere Herausforderung im Carbon2Chem®-Projekt ist die Integration der Methanolanlage in einen komplexen Anlagenverbund aus dynamisch agierendem Hüttenwerk, Kraftwerk sowie einer Versorgung mit Wasserstoff aus fluktuierenden erneuerbaren Energien, welcher in Teilprojekt L0 betrachtet wurde.

Zur Bearbeitung der Aufgaben bestand das Teilprojekt L2 (manchmal auch L-II genannt) aus verschiedenen Arbeitspaketen, die sich jeweils mit unterschiedlichen technischen und wissenschaftlichen Fragestellungen befassen.

Nobian hat alle Arbeitspakete konsolidiert und das L2-Konsortium koordiniert, ihre zugesagten Ergebnisse zu den entsprechenden Meilensteinen ("Milestones") zu liefern. Das L2-Konsortium bestand aus: Nobian (vormals Nouryon), Clariant, Fraunhofer Umsicht, Fraunhofer ISE, tkIS (thyssenkrupp) und Ruhr-Universität Bochum (RUB).

Zusammenfassend hat das Teilprojekt L-2 „Dynamische Methanolproduktion aus Hüttengasen“ die notwendigen Nachweise erbracht, um die Methanol-Synthese aus Hüttengasen von der Laborebene auf die Ebene einer Demonstrationsanlage zu übertragen und erfolgreich getestet.

Die Umsetzungsaussichten sind möglich, falls das Carbon2Chem® -Methanol trotz Verwendung von teurem Elektrolysewasserstoff einigermaßen wirtschaftlich hergestellt werden kann - allerdings mit einem längeren Zeithorizont als ursprünglich angenommen.