

**Technische, ökonomische und ökologische Bewertung
der Einsetzbarkeit von biogenem n-Butanol
im Raumwärmemarkt**

vorgelegt von
Diplom-Wirtschaftsingenieur
Nicolas Dohn

Von der Fakultät III - Prozesswissenschaften
der Technischen Universität Berlin
zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor der Ingenieurwissenschaften
- Dr.-Ing. -

genehmigte Dissertation

Promotionsausschuss:

Vorsitzender: Prof. Dr. sc. techn. Bernhard Senge

Gutachter: Prof. Dr. Dipl.-Ing. Dietrich Knorr

Gutachter: Prof. Dr.-Ing. Stephan Reimelt

Tag der wissenschaftlichen Aussprache: 19. April 2013

Berlin 2013
D 83

Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand unter der Betreuung von Herrn Prof. Dietrich Knorr und Herrn Prof. Stephan Reimelt. Insbesondere als externer Doktorand danke ich Herrn Prof. Knorr herzlich für seine Betreuung, das Ermöglichen der Arbeit sowie das mir entgegengebrachte Vertrauen. Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Reimelt, der mich mit seiner Erfahrung und konstruktiven Anregungen auch über den akademischen Aspekt hinaus als Mentor unterstützte. Herrn Prof. Senge danke ich für die Übernahme des Vorsitzes und das Interesse an meinem Thema.

Mein Dank gilt ebenfalls Herrn Dr. Oliver van Rheinberg und Herrn Hajo Hoffmann von der Oel-Wärme-Institut GmbH für ihre Unterstützung in der experimentellen Überprüfung.

Weiterhin möchte ich Herrn Michael Gomoll für sein Engagement in der begleitenden Studienarbeit danken. Allen meinen Kollegen danke ich für die herzliche Aufnahme am Institut und ihre fachliche, freundschaftliche und administrative Unterstützung. Besonders erwähnen möchte ich dabei Irene Hemmerich, Dimitri Oberdörfer, Björn Surowski und Sophie Uhlig.

Verena und meiner Familie danke ich für ihre bedingungslose Unterstützung in allen Belangen. Ohne sie wäre diese Arbeit nicht entstanden.

Kurzfassung

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde die Einsetzbarkeit von n-Butanol im Raumwärmemarkt unter technischen, ökonomischen sowie ökologischen Kriterien überprüft und den Brennstoffen Heizöl extra leichtflüssig (EL) und Biodiesel (FAME) gegenübergestellt. Das gewählte Vorgehen umfasst eine Verbrennungsversuchsreihe und die Entwicklung eines Stoff- und Energiestrommodells sowie dessen Erweiterung um eine wirtschaftliche und eine ökologische Betrachtung.

N-Butanol eignet sich aus gerätetechnischer Sicht innerhalb des untersuchten Bereiches von 0 bis 20 % (V/V) als Biokomponente in Heizöl EL für den Einsatz in einem marktüblichen Stauscheibenbrenner. Dabei tritt keine signifikante Veränderung der Abgasemissionen sowohl absolut als auch relativ zum Heizwert des Gemisches auf. Andererseits senkt n-Butanol den Flammpunkt des Brennstoffgemisches, so dass der flächendeckende Einsatz in Heizöl EL nur bis zu einer Konzentration von 0,5 % (V/V) n-Butanol als Biokomponente in Kombination mit 10 % (V/V) FAME möglich ist.

Zur Überprüfung der ökonomischen und ökologischen Kriterien wurden zwei Szenarien identifiziert. Das Basisszenario reflektiert den Stand der Technik und verursacht Produktionskosten von 1,21 € L⁻¹ n-Butanol, die durch den Umsatz von 0,90 € L⁻¹ nicht gedeckt werden können. Mit Treibhausgasemissionen von 37,0 g CO_{2eq} MJ⁻¹ entstehen durch den Einsatz von n-Butanol CO_{2eq}-Verminderungskosten in Höhe von 527 € t⁻¹ CO_{2eq}. In der Wirkungskategorie Versauerung erhöht der Einsatz von n-Butanol im Basisszenario die Emissionen gegenüber Heizöl EL zwar um etwa 67 %, stellt jedoch gegenüber FAME, das eine Erhöhung von 544 % verursacht, eine erhebliche Verbesserung dar. Die fossile Ressourcenbeanspruchung gegenüber Heizöl EL sinkt durch n-Butanol um 67 % auf 0,39 MJ MJ⁻¹.

Das Fortschrittsszenario berücksichtigt bislang großtechnisch nicht etablierte Technologien wie beispielsweise die in-situ Produktabtrennung mittels Pervaporation. Die Produktionskosten im Fortschrittsszenario betragen 0,99 € L⁻¹ n-Butanol. Durch den Einsatz von n-Butanol als Biokomponenten in Heizöl EL sinken die Emissionen an CO₂-Äquivalenten im Fortschrittsszenario auf 23,5 g MJ⁻¹ und etwa 60 % derer von Biodiesel (FAME) und 73 % derer von Heizöl EL. Die CO_{2eq}-Vermeidungskosten betragen im Fortschrittsszenario 266 € t⁻¹ CO_{2eq}. Die Emissionen an SO₂-Äquivalenten sinken auch im Fortschrittsszenario nicht unter die von Heizöl EL, sondern liegen fast 30 % darüber. Bezogen auf die Biokomponente FAME reduziert der Einsatz von n-Butanol jedoch die Emissionen an SO₂-Äquivalenten um 80 %. Der fossile Ressourcenverbrauch verringert sich gegenüber FAME um 53 % auf 0,25 MJ MJ⁻¹ und liegt damit weit unter dem von Heizöl EL. Es zeigt sich, dass der Einfluss der anteiligen Anbauemissionen von Reststroh in allen Wirkungskategorien verhältnismäßig gering ist.

Es konnte gezeigt werden, dass die Produktion von n-Butanol aus Getreidestroh zu Kosten von 0,90 € L⁻¹ durch eine optimierte Positionierung der Anlage im Fortschrittsszenario zu erreichen ist und damit wirtschaftlich sein kann.

Abstract

This thesis examines the applicability of n-butanol in the domestic heating market with regards to technical, commercial and ecological aspects in comparison to heating oil and biodiesel (FAME). Emphasis is put on a series of combustion experiments and the development of a mass and energy flow model. The model is further extended towards a commercial and ecological examination.

The utilization of n-butanol in a common yellow burner as a bio-component up to a volume ratio (V/V) of 20 % does not yield a significant absolute or relative change of exhaust emissions in comparison to heating oil. However, the addition of n-butanol causes the flash point of heating oil blends to quickly drop below the limit of 55 °C. The comprehensive large area use is therefore possible only with 0.5 % (V/V) of n-butanol in combination with 10 % (V/V) of FAME.

Two scenarios were defined and their potential commercial as well as ecological implications assessed. The basic scenario on one hand, reflects state of the art technology and results in production cost of 1.21 € L⁻¹ n-butanol not covered by the turnover of 0.90 € L⁻¹. The emission of 37.0 g CO_{2eq} MJ⁻¹ leads to greenhouse gas abatement cost of 527 € t⁻¹ CO_{2eq}. The acidification due to the utilization of n-butanol exceeds the acidification of heating oil by 67 %. FAME, however, contributes to acidification to a much higher extent with 544 %. Furthermore, the use of n-butanol reduces the fossil resource use in comparison to heating oil by 67 % to 0.39 MJ MJ⁻¹.

On the other hand the technological progress scenario considers technologies that are to date not established at industrial scale. An example is in-situ product recovery by pervaporation. The production cost of such a scenario amounts to 0.99 € L⁻¹ n-butanol. The utilization of n-butanol in the technological progress scenario reduces the greenhouse gas emissions to 23.5 g MJ⁻¹. The greenhouse gas abatement cost account for 266 € t⁻¹ CO_{2eq}. The acidification of n-butanol still exceeds that of heating oil by about 30 %. However, in comparison to FAME the utilization of n-butanol in this scenario lowers the acidification by 80 %. The fossil resource input (0.25 MJ MJ⁻¹) is considerably less than the one of heating oil and FAME. It became clear that the influence of the straw cultivation is comparatively low in all analyzed categories.

It could be demonstrated that the commercially viable production of n-butanol from straw at a cost of 0.90 € L⁻¹ in the progress scenario is possible with an optimized positioning of the plant.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	1
1.1 Ausgangslage und Problemstellung	1
1.2 Zielsetzung und Lösungsweg	2
2 Einsatz flüssiger Brennstoffe in Deutschland und fermentative Herstellung von n-Butanol	5
2.1 Eigenschaften flüssiger Brennstoffe in Deutschland	5
2.1.1 Heizöl extra leichtflüssig	5
2.1.2 Bioheizöl	7
2.2 Grundlagen der Ölfeuerung	9
2.3 Eigenschaften und Einsatz von n-Butanol	11
2.4 Fermentative Herstellung von n-Butanol	12
2.4.1 Mikrobiologische Grundlagen, Substrate und Fermentation	13
2.4.2 Hydrolyse lignocellulosebasierter Substrate	14
2.4.3 In situ-Produktabtrennung	17
2.5 Biomassennutzung und Verfügbarkeit in Deutschland	19
2.5.1 Energie- und klimapolitische Bedingungen	20
2.5.2 Reststrohpotential in Deutschland	20
3 Experimentelle Überprüfung der Einsetzbarkeit von n-Butanol als Biokomponente in Heizöl EL	25
3.1 Parameterstudie zu Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen als Brennstoff	25
3.1.1 Untersuchungskriterien an Heizöl EL/n-Butanol-Gemische	26
3.1.2 Konzeption und Planung der Parameterstudie	29
3.1.3 Ergebnisbeschreibung der Parameterstudie	30
3.1.4 Ergebnisanalyse und Bewertung	37
3.2 Experimentelle Überprüfung von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen als Brennstoff	38
3.2.1 Planung der Versuchsreihe	39
3.2.2 Versuch I: Prüfung des Verhaltens von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in verschiedenen Brennerbetriebspunkten mittels Luftzahlvariation	41
3.2.3 Versuch II: Prüfung des Verhaltens von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen im Magerbetrieb	45
3.3 Einsetzbarkeit von n-Butanol als Biokomponente in Heizöl EL	48

4 Erarbeitung eines Stoff- und Energiestrommodells zur Herstellung von n-Butanol	51
4.1 Methodisches Vorgehen der Stoff- und Energiestrommodellierung	51
4.1.1 Produktionstheoretische und ingenieurwissenschaftliche Ansätze zur Modellierung von Produktionssystemen	51
4.1.2 Ableitung des Modellierungsrahmens	64
4.1.3 Entwicklung eines angepassten aktivitätsanalytischen Ansatzes zur Modellierung des zu untersuchenden Produktionssystems	66
4.2 Umsetzung der Stoffstrommodellierung	68
4.2.1 Biomassevorbereitung	70
4.2.2 Fermentation	79
4.2.3 Separation	90
4.2.4 Wasseraufbereitung	93
4.3 Umsetzung der Energiestrommodellierung	96
4.3.1 Biomassevorbereitung	96
4.3.2 Fermentation	100
4.3.3 Separation	103
4.3.4 Wasseraufbereitung	106
4.4 Ergebnisse des Stoff- und Energiestrommodells	112
5 Erweiterung des Modells um eine Wirtschaftlichkeitsbetrachtung	115
5.1 Investitionskostenabschätzung der Modellanlage	115
5.1.1 Methodisches Vorgehen der Investitionskostenabschätzung einer Modellanlage zur Herstellung von n-Butanol	116
5.1.2 Umsetzung der Investitionskostenabschätzung einer Modellanlage zur Herstellung von n-Butanol	129
5.1.3 Ergebnisse der Investitionskostenabschätzung	132
5.2 Zahlungsströme der Modellanlage	134
5.2.1 Methodisches Vorgehen der Modellierung von Zahlungsströmen einer Modellanlage zur Herstellung von n-Butanol	135
5.2.2 Umsetzung der Modellierung von Zahlungsströmen einer Modellanlage zur Herstellung von n-Butanol	151
5.2.3 Ergebnisse der Zahlungsströme	158
5.2.4 Sensitivitätsanalyse	160
5.3 Ergebnisse der Wirtschaftlichkeitsbetrachtung	162

6 Erweiterung des Modells um eine ökologische Betrachtung	165
6.1 Methodisches Vorgehen der Nachhaltigkeitsüberprüfung	165
6.1.1 Ökologieorientierte Methoden zur Wirkungsabschätzung im Rahmen einer Ökobilanz	166
6.1.2 Rechnergestützte Ansätze zur Durchführung der Wirkungsabschätzung im Rahmen einer Ökobilanz	168
6.1.3 Konzeption einer Ökobilanz des zu untersuchenden Produktionssystems	170
6.2 Umsetzung der Sachbilanz	174
6.3 Ergebnisse der ökologischen Betrachtung	176
 7 Analyse, Bewertung und Umsetzung der Modellergebnisse	 183
7.1 Analyse und Bewertung des Basisszenarios	183
7.1.1 Wirtschaftlichkeitsbetrachtung	183
7.1.2 Ökologische Betrachtung	184
7.2 Umsetzung des Fortschrittsszenarios	185
7.2.1 Umsetzung von Stoff- und Energieflüssen sowie Zahlungsströmen	185
7.2.2 Umsetzung der Sachbilanz	189
7.3 Ergebnisse des Fortschrittsszenarios	190
 8 Schlussbetrachtung und Ausblick	 197
8.1 Schlussbetrachtung	197
8.2 Ausblick	201
 9 Literaturverzeichnis	 205

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1-1:	Aufbau und Lösungsweg der Arbeit	3
Abbildung 2-1:	Aktuelle und erwartete Wärmebereitstellung in Mrd. MJ a ⁻¹ (Shell, 2011)	7
Abbildung 2-2:	Öldüse ohne Düsenabschlussventil (Hans G. Werner GmbH & Co., Reutlingen)	9
Abbildung 2-3:	Aufbau und Prinzip eines Stauscheibenbrenners (Institut für Wärme und Öltechnik)	10
Abbildung 2-4:	Aufbau und Prinzip eines Blaubrenners (Institut für Wärme und Öltechnik)	11
Abbildung 2-5:	Vereinfachter Ausschnitt aus dem Stoffwechsel der Aceton-Butanol-Ethanol-Fermentation mittels Clostridiaceae (in Anlehnung an Ranjan et al. (2012))	14
Abbildung 2-6:	Schematische Darstellung des Aufbaus von Lignocellulose (Thostrup, 2006)	15
Abbildung 2-7:	Verteilung der theoretisch vorhandenen Strohmenigen in Deutschland (DBFZ, 2012)	21
Abbildung 3-1:	Bandbreite für den Destillationsverlauf von Heizöl EL A nach DIN SPEC 51603-1	27
Abbildung 3-2:	Ergebnis der Sichtprüfung von Heizöl/n-Butanol-Gemischen; es liegen homogene Gemische vor, Verunreinigungen, Sedimente oder Wasser sind nicht sichtbar	30
Abbildung 3-3:	Dichte von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration nach DIN EN ISO 12185 ($r = 0,4 \text{ kg m}^{-3}$)	30
Abbildung 3-4:	Heizwert von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration nach DIN 51900-2 ($r = 0,120 \text{ MJ kg}^{-1}$; angelehnt an DIN 51900-1, r für DIN 51900-2 noch nicht festgelegt)	31
Abbildung 3-5:	Flammpunkt von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration nach DIN EN ISO 2719 ($r = 1,2 \text{ °C}$)	31
Abbildung 3-6:	Kinematische Viskosität von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration nach DIN EN ISO 3104 ($r = 0,0138 \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1}$)	32
Abbildung 3-7:	Verdampfte Volumenanteile von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen bei 250 und 350 °C in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration nach DIN EN ISO 3405 ($r \approx 0,94 \text{ °C}$)	33
Abbildung 3-8:	Cold Filter Plugging Point von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration nach DIN EN 116 ($r = 1 \text{ °C}$)	33
Abbildung 3-9:	Koksrückstand von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration nach DIN EN ISO 10370 ($r = 0,0071 \text{ % (m/m)}$)	34
Abbildung 3-10:	Wassergehalt von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration nach DIN EN ISO 12937 ($r = 0,26 \text{ mg kg}^{-1}$)	34
Abbildung 3-11:	Thermische Stabilität von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration nach DIN 51371 (eine Vergleichbarkeit für die DIN 51371 wurde noch nicht ermittelt)	35
Abbildung 3-12:	Schmierfähigkeit von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration nach DIN EN ISO 12156-1 ($r = 63 \text{ µm}$)	35

Abbildung 3-13: Oxidationsstabilität von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration nach ASTM D 7545-09 ($r = 0,053$ h; vorläufiger Wert)	36
Abbildung 3-14: Erfüllung der Anforderungen an Heizöl EL/n-Butanol-Gemische in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration	37
Abbildung 3-15: NO_x -Emissionen von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der Luftzahl. Die Messwerte sind für $\text{CO}_{2\text{MAX}}$ und Heizwert bezüglich der n-Butanol-Konzentration korrigiert ($r \approx 20 \text{ mg kWh}^{-1}$ beziehungsweise 10 ppm)	42
Abbildung 3-16: CO-Emissionen von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der Luftzahl. Die Messwerte sind für $\text{CO}_{2\text{MAX}}$ und Heizwert bezüglich der n-Butanol-Konzentration korrigiert ($r \approx 2,5 \text{ mg kWh}^{-1}$ beziehungsweise 2 ppm)	43
Abbildung 3-17: Rußemissionen von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der Luftzahl	43
Abbildung 3-18: NO_x -Emissionen von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration ($r \approx 20 \text{ mg kWh}^{-1}$ beziehungsweise 10 ppm)	47
Abbildung 3-19: CO-Emissionen von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration ($r \approx 3 \text{ mg kWh}^{-1}$ beziehungsweise 2 ppm)	47
Abbildung 4-1: Übersicht mikroökonomischer Produktionsfunktionen (in Anlehnung an Küpper (1977) und Schultmann (2003))	53
Abbildung 4-2: Veranschaulichung eines Digraphs (in Anlehnung an Steven (1998) und Schultmann (2003))	57
Abbildung 4-3: Struktur sequenziell modularer Systeme in Anlehnung an Lohe (1995)	63
Abbildung 4-4: Prozessstufen in der Produktion von n-Butanol aus Weizenstroh	65
Abbildung 4-5: Aggregationsebenen der Prozessabbildung (in Anlehnung an Dykhoff und Spengler (2010))	65
Abbildung 4-6: Prozessstufen sowie Stoff- und Energieströme des Bilanzraums	69
Abbildung 4-7: Prozesse sowie Stoff- und Energieströme der Biomassevorbereitung	71
Abbildung 4-8: Zusammensetzung von Weizenstroh. Darstellung auf Basis von Saha et al. (2005)	77
Abbildung 4-9: Prozesse sowie Stoff- und Energieströme der Fermentation	80
Abbildung 4-10: Prozesse sowie Stoff- und Energieströme der Separation	90
Abbildung 4-11: Prozesse sowie Stoff- und Energieströme der Wasseraufbereitung	93
Abbildung 4-12: Prozesse sowie Stoff- und Energieströme der Biomassevorbereitung	97
Abbildung 4-13: Prozesse sowie Stoff- und Energieströme der Fermentation	100
Abbildung 4-14: Prozesse sowie Stoff- und Energieströme der Separation	104
Abbildung 4-15: Prozesse sowie Stoff- und Energieströme der Wasseraufbereitung	107
Abbildung 5-1: Verlauf der Jahresmittelwerte des Chemical Engineering Plant Cost Index (vgl. Chemical Engineering (2001-2011))	118
Abbildung 5-2: Verlauf des Degressionsexponenten in Abhängigkeit der Kapazität in logarithmischer Darstellung (in Anlehnung an Dysert (2003))	120

Abbildung 5-3:	Zusammenhang zwischen Ungenauigkeit, Bearbeitungskosten und Zeitaufwand eines Projektes (in Anlehnung an Schwind (1979))	127
Abbildung 5-4:	Lebenszyklus- und Planungsphasen eines Anlagenprojektes (eigene Darstellung in Anlehnung an Sattler und Werner (2000))	127
Abbildung 5-5:	Bestandteile der Total Investment Cost (Angaben gerundet)	133
Abbildung 5-6:	Prozessstufen in der Produktion von n-Butanol aus Weizenstroh	136
Abbildung 5-7:	Schematische Darstellung der mittleren Transportstrecke (in Anlehnung an Kappler (2008))	144
Abbildung 5-8:	Kosten zur Herstellung von einem Liter n-Butanol aus Reststroh im Basisszenario	159
Abbildung 5-9:	Einfluss der Variation ausgewählter Parameter auf die Herstellungskosten von n-Butanol im Basisszenario	161
Abbildung 5-10:	Einfluss der Variation der Anlagenkapazität auf die Herstellungskosten von n-Butanol im Basisszenario	162
Abbildung 6-1:	Prozessstufen in der Produktion von n-Butanol aus Weizenstroh	170
Abbildung 6-2:	Ergebnisse der Nachhaltigkeitsuntersuchung des Basisszenarios (BS) und der Referenzen Heizöl EL und FAME (etwaige Gutschriften sind Bestandteil der Einzelsummen)	177
Abbildung 7-1:	Kosten zur Herstellung von einem Liter n-Butanol aus Reststroh im Fortschrittsszenario	191
Abbildung 7-2:	Einfluss der Variation ausgewählter Parameter auf die Herstellungskosten von n-Butanol im Fortschrittsszenario	192
Abbildung 7-3:	Ergebnisse der Nachhaltigkeitsuntersuchung des Basisszenarios (BS), Fortschrittsszenarios (FS), Fortschrittsszenarios inklusive Anbau (FS Anbau) und der Referenzen Heizöl EL und FAME (etwaige Gutschriften sind Bestandteil der Einzelsummen)	193
Abbildung 8-1:	Zusammenfassende Darstellung der untersuchten Kriterien des Einsatzes von n-Butanol als Biokomponenten in Heizöl EL im Vergleich zur Referenz FAME	201
Abbildung 9-1:	Verwendeter Zugbegrenzer am Abgasrohr	A-1
Abbildung 9-2:	Eingesetzte Düse des Typs Fluidics 0,4 60° HF nach Beendigung aller Versuchsreihen. Die Düse weist weder Ablagerungen noch Verkokungen auf	A-1
Abbildung 9-3:	Eingesetzter Düsenfilter des Typs Fluidics 0,4 60° HF nach Beendigung aller Versuchsreihen. Der Filter zeigt keine Ablagerungen	A-2

Tabellenverzeichnis

Tabelle 2-1:	Ausgewählte Mindestanforderungen an Heizöl EL nach DIN 51603-1 (2011), Cold Filter Plugging Point (CFPP)	6
Tabelle 2-2:	Ausgewählte Mindestanforderungen an Heizöl EL nach DIN SPEC 51603-6 (2011)	8
Tabelle 2-3:	Ausgewählte Eigenschaften von Ethanol, n-Butanol und Heizöl EL; [a] Rakopoulos et al. (2010); [b] DIN 51603-1; [c] GESTIS Stoffdatenbank (2012e); [d] GESTIS Stoffdatenbank (2012d); [e] GESTIS Stoffdatenbank (2012c)	12
Tabelle 2-4:	Nachhaltiges Reststrophpotential in Frischmasse in Deutschland (Potential in Anlehnung an DBFZ (2012); Flächen in Anlehnung an DESTATIS (2012))	23
Tabelle 3-1:	Parameter der zweiten Versuchsreihe	46
Tabelle 4-1:	Darstellung der Stoffstromvektoren der Aktivität Biomassevorbereitung	71
Tabelle 4-2:	Stoffstromvektoren der Aktivität Biomassevorbereitung	79
Tabelle 4-3:	Stoffstromvektoren der Aktivität Fermentation	90
Tabelle 4-4:	Stoffstromvektoren der Aktivität Separation	93
Tabelle 4-5:	Stoffstromvektoren der Aktivität Wasseraufbereitung	95
Tabelle 4-6:	Bedarf elektrischer Energie von Anlagenkomponenten in der Biomassevorbereitung	98
Tabelle 4-7:	Energiestromvektoren der Biomassevorbereitung, Basis 1 t Weizenstroh	99
Tabelle 4-8:	Bedarf elektrischer Energie von Anlagenkomponenten in der Fermentation	102
Tabelle 4-9:	Energiestromvektoren der Fermentation, Basis 1 t aufschließbares Substrat	103
Tabelle 4-10:	Bedarf Prozesswärme von Anlagenkomponenten in der Separation	104
Tabelle 4-11:	Bedarf elektrischer Energie von Anlagenkomponenten in der Separation	105
Tabelle 4-12:	Kühlwasserbedarf von Anlagenkomponenten in der Separation	106
Tabelle 4-13:	Energiestromvektoren der Separation, Basis 1 t ABE-Produkte	106
Tabelle 4-14:	Energiestromvektoren der Fermentation, Basis 1 t aufschließbares Substrat	112
Tabelle 4-15:	Stoff- und Energieströme der Modellanlage des Basisszenarios	114
Tabelle 5-1:	Fixed Capital Investment prozesstechnischer Anlagen (in Anlehnung an Peters (2004))	117
Tabelle 5-2:	Investitionskostenabschätzung mit Hilfe differenzierter Zuschlagssätze nach Peters et al. (2004)	123
Tabelle 5-3:	Klassifikation von Kostenschätzung (in Anlehnung an AACEI (2011) und Sattler und Werner (2000))	128
Tabelle 5-4:	Differenzierte Zuschlagssätze der Modellanlage	131
Tabelle 5-5:	Umschlags- und Transportkosten sowie Zeitbedarf inklusive Personalkosten (in Anlehnung an DBFZ (2012))	145
Tabelle 5-6:	Owner's Cost der Modellanlage	152
Tabelle 5-7:	Personalbedarf der Modellanlage bei einer Kapazität von 100.000 t a ⁻¹ nach Schicht und Leistungsgruppe	157
Tabelle 7-1:	Stoff- und Energieströme der Modellanlage des Fortschrittsszenarios	189

Tabelle 9-1: Komponenten einer Modellanlage zur fermentativen Herstellung von n-Butanol im Basisszenario, Basiskapazität (*BK*), Zielkapazität (*ZK*), Basisjahr (*BJ*), Zieljahr (*ZJ*)

B-1

Abkürzungsverzeichnis

a	Annum (Jahr)
Actn	Aceton
Adsr	Adsorber
Afbr	Aufbereitung
Afschg	Aufschlussgrad
AM	Apparate und Maschinen
Anl	Anlage
Ann	Annuität
Asch	Asche
Aztr	Azeotrop
BAFA	Bundesamt für Wirtschaft und Ausfuhrkontrolle
Bdrf	Bedarf
BFltr	Bandfilter
Bh	Betriebsstunde
Bnd	Bandförderer
BS	Basisszenario
btr	betriebsgebunden
ClI	Cellulose
Ca(OH) ₂	Calciumhydroxid
CML	Centrum voor Milieukunde
CO	Kohlenstoffmonoxid
CO ₂	Kohlenstoffdioxid
DC	Direct Cost
DIN	Deutsches Institut für Normung
Drl	Darlehen
EEG	Erneuerbare-Energien-Gesetz
EKA	Eigenkapitalanteil
el	elektrisch
etc	et cetera
Enzy	Enzyme
eq	Äquivalente
Ethn	Ethanol
exp	Exponent
FCI	Fixed Capital Investment
Fhrt	Fahrt
FKA	Fremdkapitalanteil
FM	Frischmasse
Frmt	Fermenter
FS	Fortschrittsszenario
g	Gramm
Gbls	Gebälse
Gwr	Gewerbesteuer
h	hora (Stunde)
H ₂	Wasserstoff
H ₂ O	Wasser
H ₂ SO ₄	Schwefelsäure
ha	Hektar
Hbs	Hebesatz
Hcks	Häcksler
Hcll	Hemicellulose
HMF	Hydroxymethylfurfural

Hydr	Hydrolyse
IC	Indirect Cost
In	Index
Inst	Instandhaltung
kap	kapitalgebunden
kg	Kilogramm
klk	kalkulatorisch
km	Kilometer
Knds	Kondensation
Kor	Korrekturfaktor
Krp	Körperschaftssteuer
kW	Kilowatt
kWh	Kilowattstunde
L	Liter
LG	Leistungsgruppe
Lgn	Lignin
LKW	Lastkraftwagen
m	Meter
Mio	Millionen
MIPS	Material-Input pro Service-Einheit
MJ	Megajoule
Msz	Messzahl
MW	Megawatt
NBtl	n-Butanol
NO _x	Stickoxide
Nutzg	Nutzungsgrad
Pmp	Pumpe
pot	potentiell
Prsnl	Personal
Ref	Referenz
Rhr	Rührer
Rktr	Reaktor
Rs	Reststoffe
Rüst	Rüstzeit
Säu	Säure
Snst	Sonstige
Sprt	Separation
Str	Stroh
t	Tonne (1.000 Kilogramm)
TCI	Total Capital Investment
th	thermisch
TM	Trockenmasse
Tnk	Tank
Trns	Transport
UBA	Umweltbundesamt
Umsc	Umschlag
VFltr	Vakuumfilter
vgl	vergleiche
Verb	Verbrennung
vrb	verbrauchsgebunden
Vrbr	Vorbereitung
Vrdm	Verdampfer
Vrlst	Verlust
Vrs	Versicherung
Vrw	Verwaltung

WACC	Weighted Average Cost of Capital
Was	Wasser
WC	Working Capital
Wt	Wärmetauscher
Zckr	Zucker
Zell	Zellmasse
Zwl	Zwischenlager
Zykl	Zyklon
% (m/m)	Massenprozent
% (V/V)	Volumenprozent

1 Einleitung

1.1 Ausgangslage und Problemstellung

Die deutsche Bundesregierung plant im Rahmen ihres nationalen Aktionsplans zur Energiewende den Anteil erneuerbarer Energien im Wärme- und Kältesektor bis zum Jahr 2020 auf 14 % zu erhöhen (EEWärmeG, 2011). Darüber hinaus wird vorgesehen, den Raumwärmebedarf im gleichen Zeitraum um 20 % und bis 2050 um 80 % zu senken. Im Vordergrund stehen dabei neben der Erhöhung der Energieeffizienz die Verringerung der Treibhausgasemissionen (BRD, 2010). In Deutschland werden rund 35 % der gesamten Endenergie für die Bereitstellung von Raumwärme, -kälte und Warmwasser verwendet. Davon werden etwa 27 % durch Heizöl extra leichtflüssig (*Heizöl EL*) gedeckt (BMVBS, 2012). Heizöl EL ist damit eines der wichtigsten Mineralölerzeugnisse in Deutschland. Der Gesamtbedarf entspricht mit 20 Mio. t a⁻¹ etwa dem an Ottokraftstoff in Deutschland (BAFA, 2009-2012).

Zur Verringerung des Bedarfs nicht erneuerbarer Brennstoffe liegen verschiedene Konzepte vor, die auf die Steigerung der Energieeffizienz oder die Nutzung alternativer Energieformen wie Geo- oder Solarthermie zielen. Eine Vielzahl der Konzepte erfordert jedoch eine gebäudetechnische Eignung und verursacht für den Einzelnen teils einen erheblichen Investitionsbedarf. Hingegen fallen für den Einsatz von Bioheizölen keine zusätzlichen Systemkosten an¹. Ein großer Teil der Ölbrenner im Gebäudebestand eignet sich für den Einsatz und praktisch alle Neusysteme sind ebenfalls zugelassen (IWO, 2011). Derzeit enthalten die meisten Bioheizöle bis zu 10 % Biodiesel (*FAME*²) und sind in Deutschland flächendeckend erhältlich. Die Biokomponente FAME kann jedoch nur eingeschränkt aus Reststoffen wie Alt Speisefett hergestellt werden und steht andernfalls in direkter Konkurrenz zur Nahrungsmittelproduktion. Im Hinblick auf die daraus resultierenden ethischen Bedenken und auf die Berücksichtigung der begrenzten Anbaukapazität sollte eine erweiterte Nutzung von Bio-brennstoffen daher vorwiegend auf Basis von Reststoffen in Betracht gezogen werden.

Der Einsatz des Alkohols n-Butanol wird zurzeit als Alternative zu Dieselmotorkraftstoff im Verbrennungsmotor diskutiert (Rakopoulos, et al., 2010). N-Butanol kann fermentativ auf Basis lignocellulosebasierter Reststoffe wie Stroh hergestellt werden. Es konkurriert daher nicht mit der Nahrungsmittelproduktion und erfüllt darüber hinaus die Forderung von Knorr (1983) nach einer nachhaltigen und ganzheitlichen Nutzung von Agrarrohstoffen. Aufgrund der ähnlichen Charakteristika von Dieselmotorkraftstoff und Heizöl EL könnte n-Butanol zu-

¹ Bei erheblichen Rückständen im Tank wird vor dem Einsatz von Bioheizöl eine Tankreinigung empfohlen (IWO, 2011)

² Fatty Acid Methyl Esther

künftig auch eine Alternative zur bereits existierenden Biokomponente FAME in Heizöl EL bieten. Mit 27 MJ L^{-1} weist n-Butanol 74 % des Heizwertes von Heizöl EL auf. Im Vergleich zum als Kraftstoff verbreitet eingesetzten Alkohol Ethanol besitzt n-Butanol eine höhere Energiedichte, einen geringeren Dampfdruck, einen höheren Flammpunkt und ist uneingeschränkt mit mineralischem Heizöl EL mischbar (Hoffmann, et al., 2012). Bislang wurde die technische Einsetzbarkeit als Biokomponente in Heizöl EL jedoch nicht überprüft. Darüber hinaus liegen bisher keine Angaben hinsichtlich der Wirtschaftlichkeit und ökologischen Nachhaltigkeit des Einsatzes vor.

1.2 Zielsetzung und Lösungsweg

Die Zielsetzung der vorliegenden Arbeit besteht in der Überprüfung der Einsetzbarkeit von n-Butanol im Raumwärmemarkt unter technischen, ökonomischen sowie ökologischen Kriterien.

Zur Erreichung der Zielsetzung werden in Kapitel 2 zunächst der deutsche Raumwärmemarkt und die Grundlagen der Ölfeuerung beschrieben (siehe Kapitel 2.1 und 2.2). Anschließend folgt die Erläuterung grundlegender Eigenschaften von n-Butanol und dessen derzeitiger Einsatz (siehe Kapitel 2.3). Darüber hinaus werden die prozesstechnischen und mikrobiologischen Grundlagen der Produktion von n-Butanol aufgezeigt (siehe Kapitel 2.4) und die Biomasseverfügbarkeit in Deutschland dargestellt (siehe Kapitel 2.5).

In Kapitel 3 erfolgt die experimentelle Überprüfung der Einsetzbarkeit von n-Butanol anhand einer Versuchsreihe. Eingangs wird eine Parameterstudie zur grundsätzlichen Untersuchung der Eigenschaften von n-Butanol als Gemisch mit Heizöl EL und im Reineinsatz mit Hilfe von Analysemethoden durchgeführt (siehe Kapitel 3.1). Anschließend werden die Anforderungen an den Betrieb eines Ölbrenners mit n-Butanol-haltigen Heizölen abgeleitet und in einer Versuchsreihe für den Einsatz von Heizöl EL und n-Butanol als Biokomponente überprüft (siehe Kapitel 3.2). Das Kapitel schließt mit der Auswertung der Ergebnisse zur technischen Einsetzbarkeit von n-Butanol im Raumwärmemarkt (siehe Kapitel 3.3).

Als Basis für die Untersuchung der ökonomischen und ökologischen Bewertung des Einsatzes von n-Butanol wird in Kapitel 4 ein Stoff- und Energiestrommodell erarbeitet. Die Abbildung des Systems erfordert die Identifizierung eines geeigneten Modellierungsansatzes und dessen Anpassung auf die fermentative Herstellung von n-Butanol (siehe Kapitel 4.1). In der anschließenden Umsetzung der Stoffströme werden der Einsatz und die Vorbereitung von Reststroh sowie dessen fermentative Umwandlung zu n-Butanol mit der Hilfe des Mikroorganismus *Clostridium beijerinckii* betrachtet (siehe Kapitel 4.2). Das auf diese Weise abgebildete Stoffstromszenario bietet die Voraussetzung für die Ermittlung der Energieströme der Modellanlage (siehe Kapitel 4.3.). Die technologische Umsetzung dieses *Basisszenarios* basiert im Gegensatz zum später diskutierten *Fortschrittsszenario* auf dem Einsatz etablierter Technologien. Kapitel 4.4 fasst die Ergebnisse abschließend zusammen.

Ziel des fünften Kapitels ist die Erweiterung der Stoff- und Energiestrommodellierung um eine ökonomische Betrachtung. Das Kapitel gliedert sich in die Investitionskostenschätzung (siehe Kapitel 5.1) und die Abbildung aller Zahlungsströme der Modellanlage (siehe Kapitel 5.2). Sowohl die Investitionskostenschätzung als auch die Darstellung aller Zahlungsströme setzen geeignete Modellierungsansätze voraus. Diese werden anhand einer Diskussion aus den bestehenden Ansätzen abgeleitet. Die Umsetzung der Zahlungsströme greift sowohl auf die Ergebnisse der Stoff- und Energiestrommodellierung als auch auf die der Investitionskostenabschätzung zurück. Abschließend werden die Ergebnisse des Kapitels zusammengefasst und die wichtigsten Parameter mittels einer Sensitivitätsanalyse variiert und analysiert (siehe Kapitel 5.3).

Gegenstand des sechsten Kapitels ist die Überprüfung der ökologischen Nachhaltigkeit des Einsatzes von n-Butanol im Raumwärmemarkt. Dazu erfolgt eine Bewertung der in Kapitel 4 identifizierten Stoff- und Energieströme durch eine Ökobilanz in Anlehnung an die DIN EN ISO 14040. Zur Erstellung der Sachbilanz und Wirkungsabschätzung wird auf die Software GEMIS 4.7 zurückgegriffen (siehe Kapitel 6.2). Es werden dabei die Wirkungskategorien Treibhauspotential, Versauerungspotential und Ressourcenbeanspruchung untersucht und die Ergebnisse abschließend interpretiert (siehe Kapitel 6.3).

Ziel des siebten Kapitels ist die Identifikation eines technologischen Fortschrittsszenarios zur Verringerung der Produktionskosten und Umweltauswirkungen. Kapitel 7.1 nimmt daher eine umfassende technische, ökonomische und ökologische Bewertung des Basisszenarios vor. Zu diesem Zweck wird auf die Ergebnisse der Kapitel 4, 5 und 6 zurückgegriffen. Anschließend erfolgt die Umsetzung des Fortschrittsszenarios und dessen Aus- und Bewertung anhand des entwickelten Modells mittels einer Szenarioanalyse (siehe Kapitel 7.2).

Kapitel 8 diskutiert das entwickelte Modell und dessen Ergebnisse und fasst diese in einem Fazit zur Eignung von n-Butanol als Biokomponente in Heizöl zusammen. Die Arbeit schließt mit einem Ausblick zu den Zukunftsperspektiven von n-Butanol als Biokomponente im deutschen Raumwärmemarkt.

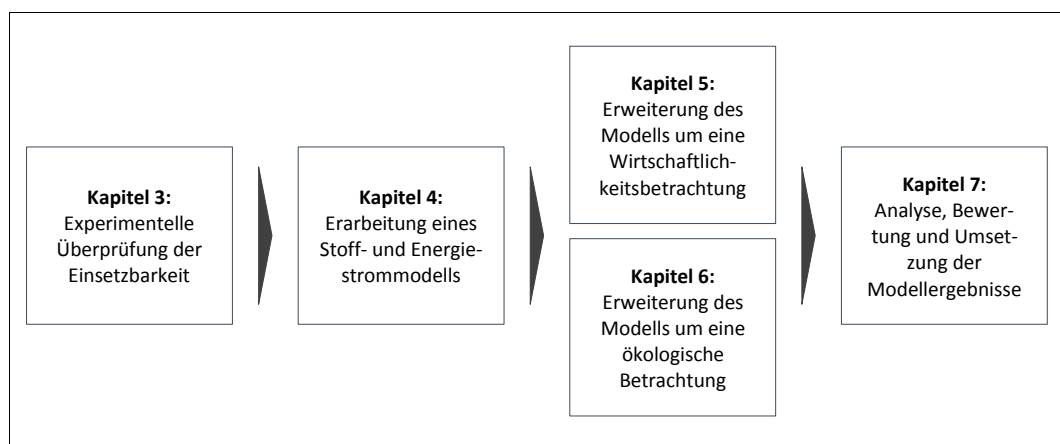


Abbildung 1-1: Aufbau und Lösungsweg der Arbeit

2 Einsatz flüssiger Brennstoffe in Deutschland und fermentative Herstellung von n-Butanol

Das vorliegende Kapitel beschreibt zunächst die Rahmenbedingungen für den Einsatz flüssiger Brennstoffe im deutschen Raumwärmemarkt (siehe Kapitel 2.1) sowie die technischen Grundlagen der Ölfeuerung (siehe Kapitel 2.2). Anschließend werden die Eigenschaften von n-Butanol in Gegenüberstellung zu Heizöl extra leichtflüssig (*Heizöl EL*) diskutiert und dessen Einsatzmöglichkeiten über den Rahmen der Arbeit hinaus aufgezeigt (siehe Kapitel 2.3). Kapitel 2.4 charakterisiert ausgewählte Prozesse zur fermentativen Herstellung von n-Butanol und erläutert die Einsatzmöglichkeiten unterschiedlicher Substrate. Den Abschluss bildet eine Übersicht der energie- und klimapolitischen Rahmenbedingungen in Deutschland sowie des Potentials und der aktuellen Nutzung von Reststroh (siehe Kapitel 2.5).

2.1 Eigenschaften flüssiger Brennstoffe in Deutschland

Unter den in Deutschland im Raumwärmemarkt eingesetzten flüssigen Brennstoffen hat mineralisches Heizöl die größte Bedeutung, während Flüssiggase eine untergeordnete Rolle spielen. Das in Deutschland verkaufte Heizöl stammt praktisch ausschließlich aus Mineralöl beziehungsweise Erdöl. Der im Umgang mit Erdöl teils verwendete Zusatz „mineralisch“ weist auf die ursprüngliche Bezeichnung von Erdöl als Steinöl hin (Richter, 2002). Die heute als Rohstoff oder Energieträger genutzten Produkte werden, ausgehend von ihrem Entstehungszeitpunkt, auch als „fossil“ bezeichnet. Im Gegensatz zu fossilem Heizöl zählt Heizöl, das auf Basis von Biomasse erzeugt wird, zu den erneuerbaren Brennstoffen. Beide, fossile und erneuerbare Heizöle, werden im Folgenden näher erläutert. Darüber hinaus werden die Grundlagen der Ölfeuerung dargelegt.

2.1.1 Heizöl extra leichtflüssig

Eigenschaften

Das im deutschen Raumwärmemarkt erhältliche fossile Heizöl entspricht praktisch ausschließlich der Qualität extra leichtflüssig (*Heizöl EL*). Leicht-, mittel- und schwerflüssige Heizöle haben im Raumwärmemarkt hingegen keine Bedeutung (Richter, 2002). Über die Klassifizierung des Fließvermögens hinaus lässt sich Heizöl durch weitere chemische und physikalische Eigenschaften charakterisieren. Diese als Mindestanforderungen formulierten Eigenschaften an Heizöl EL werden in der DIN 51603-1 definiert. Sie sind das Resultat einer über Jahrzehnte durchgeführten wechselseitigen Anpassung von Heizöl EL und Ölbrennern.

Über die Definition der Mindestanforderungen hinaus setzt die DIN 51603-1 einen Handelsstandard für Heizöl EL. Tabelle 2-1 zeigt einige ausgewählte Eigenschaften in der Übersicht³.

Tabelle 2-1: Ausgewählte Mindestanforderungen an Heizöl EL nach DIN 51603-1 (2011), Cold Filter Plugging Point (CFPP)

Eigenschaft	Einheit	min.	max.
Dichte bei 15 °C	kg m ⁻³		860
Brennwert, H _s	MJ kg ⁻¹	45,4	
Flammpunkt im geschlossenen Tiegel nach Pensky-Martens	°C		55
Kinematische Viskosität bei 20 °C	mm ² s ⁻¹		6
Cloudpoint	°C		3
Temperaturgrenzwert der Filtrierbarkeit (CFPP) in Abhängigkeit des Cloudpoints			
bei Cloudpoint = 3 °C	°C		-12
bei Cloudpoint = 2 °C	°C		-11
bei Cloudpoint ≤ 1 °C	°C		-10
Koksrückstand nach Conradson	% (m/m)		0,3
Schwefelgehalt für Heizöl schwefelarm	% (m/m)		0,005
Wassergehalt	mg kg ⁻¹		200
Gesamtverschmutzung	mg kg ⁻¹		24
Asche	% (m/m)		0,01

Bereits in der Raffinerie wird Heizöl EL auf die Anforderungen der Norm angepasst und gegebenenfalls additiviert. Neben Fließ-, Stabilitäts- und Verbrennungsverbesserern enthält es weitere Additive in Form von Duftstoffen, die für den Verbraucher meist in Additivpaketen kombiniert werden (Richter, 2002). Heizöl EL besteht annähernd vollständig aus Kohlenwasserstoffen, deren Hauptbestandteil die linearen Alkane bilden (Liska, 2009). Aus der gemeinsamen Logistik mit FAME⁴ können darüber hinaus auch FAME-Anteile enthalten sein. Nach DIN 51603-1 (2011) dürfen diese oder andere biogene Komponenten eine Konzentration von 0,5 % (V/V) nicht überschreiten. Heizöl, das mehr als 3 % (V/V) biogene Komponenten enthält, wird als Bioheizöl bezeichnet und in Kapitel 2.1.2 näher erläutert.

Bedarf

Etwa 27 % des Wärmebedarfs in Deutschland werden zurzeit durch Heizöl EL gedeckt (Shell, 2011). Damit entspricht der Heizölverbrauch mit 20 Mio t a⁻¹ (Ø 3 Jahre⁵) dem Verbrauch an Ottokraftstoff in Deutschland (BAFA, 2009-2012). Durch Wärmedämmmaßnahmen, Brennwertechnik und teilweisen Ersatz des Brennstoffes Heizöl EL durch Erdgas ist der Heizölbe-

³ Die Auswahl orientiert sich an Liska (2009)

⁴ Fatty Acid Methyl Esther

⁵ Der Heizölverbrauch ist stark von den Witterungsbedingungen abhängig. Darüber hinaus wird der Heizölbedarf indirekt über die eingelagerten Mengen ermittelt und daher über einen Zeitraum von drei Jahren gemittelt

darf seit Jahren rückläufig. Shell (2011) rechnet damit, dass er im Jahr 2030 jedoch noch immer bei etwa 66 % des aktuellen Niveaus liegen wird (siehe Abbildung 2-1).

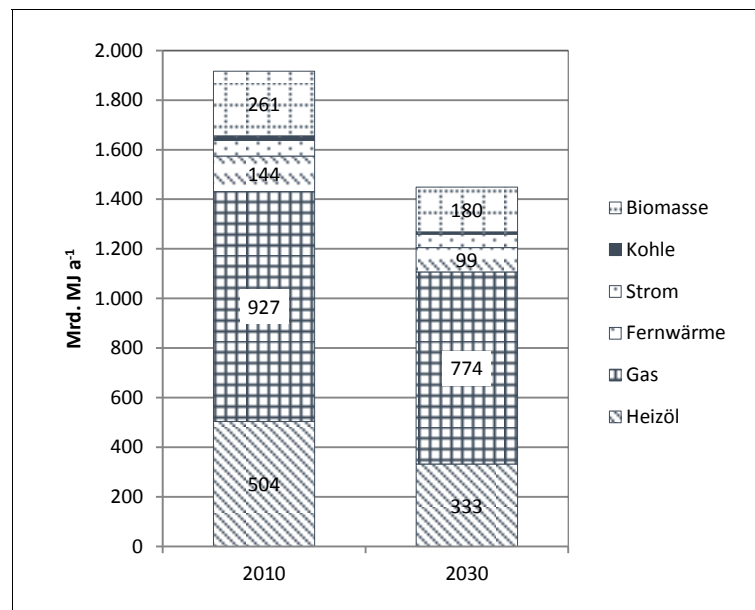


Abbildung 2-1: Aktuelle und erwartete Wärmebereitstellung in Mrd. MJ a⁻¹ (Shell, 2011)

Die Gründe für einen auch in Zukunft weiterhin vergleichsweise hohen Heizölbedarf sind maßgeblich wirtschaftlicher Art. Bei einem Neubau mit geringem Wärmebedarf können die einmaligen standortabhängigen Kosten für den Anschluss leitungsgebundener Energien sowie die jährlichen Grundgebühren den Einbau einer Ölheizung wirtschaftlich sinnvoll machen. Des Weiteren ergibt sich durch Marktschwankungen gegebenenfalls die Möglichkeit günstigerer Bezugspreise von Heizöl EL. Darüber hinaus präferieren einige Hausbesitzer, den Brennstoff unabhängig von vertraglichen Bindungen im eigenen Haus zu bevorraten und so gegebenenfalls auch unabhängig von Versorgungsschwankungen zu sein. Darüber hinaus liegt die Modernisierungsrate durch die lange Einsatzzeit der Anlagen von bis zu 20 Jahren derzeit bei nur etwa 1 % (Shell, 2011).

2.1.2 Bioheizöl

Ein Heizöl, das mindesten 3 % (V/V) alternative nicht-mineralölstämmige Komponenten enthält und der DIN SPEC 51603-6 (2011) entspricht, wird als Heizöl EL A bezeichnet. Dabei bezeichnen alternative Komponenten jedoch nicht unmittelbar biogene Komponenten. Besteht das Heizöl aus mehr als 3 % (V/V) biogenen Komponenten, wird es als Heizöl EL A Bio beziehungsweise Bioheizöl definiert. Mit dem Einsatz nicht-mineralölstämmiger Brennstoffe in Heizöl EL A besteht die Notwendigkeit der Erweiterung der Mindestqualitätsanforderungen und geeigneter Prüfmethode. Die bislang in diesem Prozess gewonnen Erkenntnisse diesbezüglich sind in Form der DIN SPEC 51603-6 veröffentlicht. Diese befindet sich im Status einer Vornorm (DIN, 2012). Biogene Komponenten sind demnach als solche zugelassen,

wenn deren Ausgangsstoffe den Anforderungen der Biomasseverordnung bzw. Bioabfallverordnung genügen. Diese beinhalten neben Herkunfts- auch Nachhaltigkeitskriterien. Das in Deutschland derzeit erhältliche Bioheizöl enthält ausschließlich die Biokomponente FAME⁶.

In Deutschland wird FAME überwiegend auf Basis von Raps- und Sonnenblumenöl produziert. Dabei muss im Sinne der Nachhaltigkeitsverordnung ein Treibhausgasminderungspotential von mindestens 35 % vorliegen. Bioheizöl, das nicht mehr als 5,9 % (V/V) biogene Komponenten enthält, ist von den Geräteherstellern für praktisch alle Bestandsanlagen freigegeben. Neuere Anlagen sind für den Einsatz von Heizöl EL A Bio 10 mit bis zu 10,9 % (V/V) biogenen Komponenten zugelassen (IWO, 2012).

Die wichtigsten Mindestanforderungen an Heizöl EL A beziehungsweise Heizöl EL A Bio werden dabei von der DIN 51603-1 für reines Heizöl EL abgeleitet (Liska, 2009). Davon abweichende Anforderungen sind in Tabelle 2-2 aufgeführt. Der Marktanteil von Bioheizöl liegt derzeit deutlich unterhalb von 1 %⁷.

Tabelle 2-2: Ausgewählte Mindestanforderungen an Heizöl EL nach DIN SPEC 51603-6 (2011)

Eigenschaft	Prüfvorschrift	Einheit	min.	max.
Begutachtung bei Raumtemperatur	-		Homogene Flüssigkeit, frei von sichtbaren Verunreinigungen und Sedimenten sowie freiem Wasser	
Heizwert, H_i	DIN 51900-1 und DIN 51900-2 oder DIN 51900-3	MJ kg^{-1}	42,6	
Wassergehalt	DIN EN ISO 12937	mg kg^{-1}		300
Oxidationsstabilität	DIN EN 15751	h	ist anzugeben, ein Grenzwert liegt nicht vor	
Säurezahl	DIN EN 14104	mg KOH g^{-1}		0,25
Iodzahl	DIN EN 14111	$\text{g Iod (100 g)}^{-1}$		70
Phosphorgehalt	DIN EN 14107	mg kg^{-1}		6
Summe an Natrium und Kalium	DIN EN 14538	mg kg^{-1}		5
Summe an Magnesium und Calcium	DIN EN 14538	mg kg^{-1}		5
Lager- und thermische Stabilität	-	%(m/m)	Die Angabe eines Grenzwertes ist erst nach Entwicklung eines geeigneten Verfahrens möglich	

⁶ Fatty Acid Methyl Esther

⁷ Da bislang zu wenige Händler ihre Bioöllumsätze melden, wird der Umsatz in den amtlichen Mineralölstatistiken aus Gründen des Datenschutzes nicht ausgewiesen (BAFA, 2009-2012)

2.2 Grundlagen der Ölfeuerung

Die Ölfeuerung hat die Aufgabe, die im Brennstoff enthaltene Energie möglichst effizient, umweltschonend und wirtschaftlich in nutzbare Wärme umzuwandeln. Die eng aufeinander abgestimmten Komponenten umfassen einen Tank, einen Heizkessel, eine Regelung und einen Schornstein. Kernstück des Systems ist der Heizkessel, der aus einem Brenner, einem Wärmetauscher und weiteren Komponenten besteht. In den Zentralheizungen von Wohngebäuden kommen überwiegend Druckzerstäubungsbrenner zum Einsatz (Richter, 2002). Ziel ist die Zerstäubung des Brennstoffes in feinste Tröpfchen und deren anschließende Vermischung mit Luft. Dafür sind neben einer Ölzerstäuberdüse (siehe Abbildung 2-2) unter anderem eine Heizöl-Hochdruckpumpe, ein Magnetventil, eine Zündeinrichtung und eine Mischeinrichtung notwendig. Der Betrieb der Mischeinrichtung kann mittels eines Verbrennungsluftgebläses und einer Luftklappenregulierung variiert werden. Es lassen sich dabei abhängig von der Bauform grundsätzlich mehrere Arten der Gemischbildung unterscheiden.

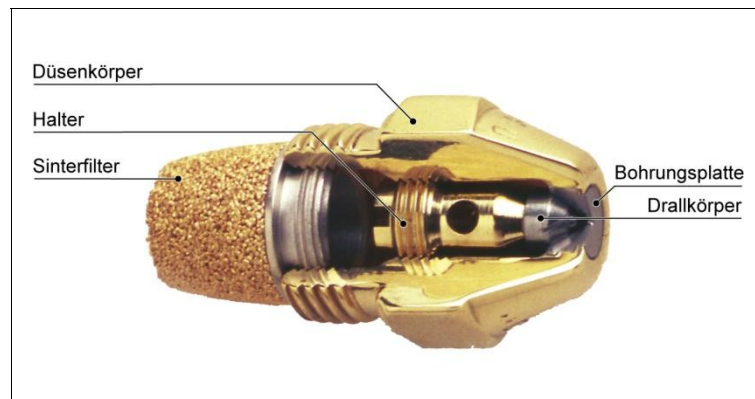


Abbildung 2-2: Öldüse ohne Düsenabschlussventil (Hans G. Werner GmbH & Co., Reutlingen)

Im Stauscheibenbrenner werden die erzeugten Heizöltropfen direkt mit der eingeblasenen Verbrennungsluft verbrannt. Die Durchmischung findet überwiegend während der Verbrennungsreaktion statt, wodurch eine gelb leuchtende Diffusionsflamme entsteht (Richter, 2002). Ölbrenner dieser Funktion sind in fast allen Standard- und Niedertemperaturkesseln verbaut. Im Vergleich zu den moderneren Blaubrennern erzeugt diese Art der Verbrennung höhere Emissionen an Ruß und Stickoxiden (NO_x). Ruß bildet sich durch unvollständige Verbrennung. Diese wird in diesem Brennerart insbesondere durch einen lokalen Luftmangel oder ein generell unterstöchiometrisches Luftverhältnis hervorgerufen. Die Bildung von Stickoxiden hingegen wird durch hohe Temperaturen begünstigt, die auch lokal auftreten können. Abbildung 2-3 illustriert das Prinzip des Stauscheibenbrenners.

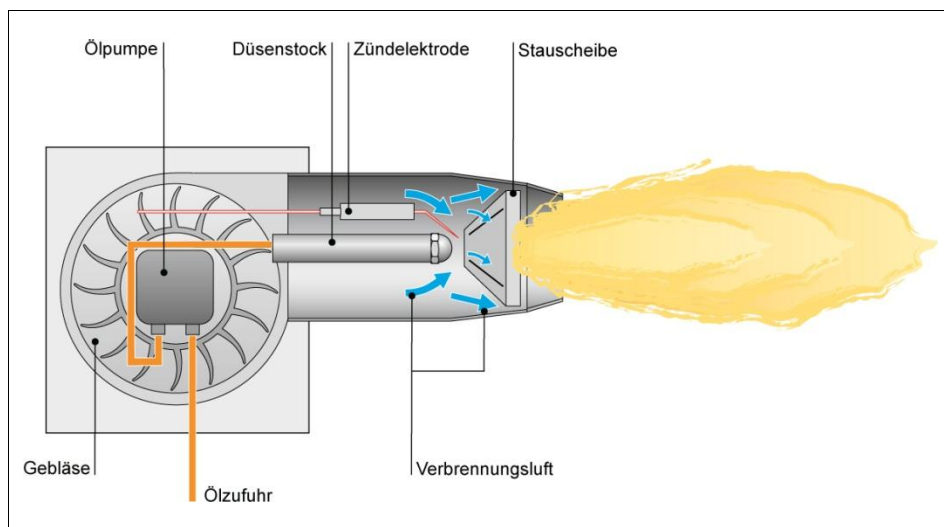


Abbildung 2-3: Aufbau und Prinzip eines Stauscheibenbrenners (Institut für Wärme und Öltechnik)

Im Blaubrenner findet zunächst eine Vermischung des zerstäubten Brennstoffs mit der Verbrennungsluft und dem rezirkulierten heißen Heizgas statt (siehe Abbildung 2-4). Dabei verdunstet der eingesetzte Brennstoff vollständig und es bildet sich ein homogenes Gemisch. Dieses verbrennt nach der Zündung in Form einer blau leuchtenden Vormischflamme (Richter, 2002). Der Blaubrenner repräsentiert damit den aktuellen Stand der Technik. Er eignet sich insbesondere für den Einsatz in Brennwertkesseln. Durch die homogene Verbrennung werden lokal hohe Temperaturen im Blaubrenner, die die Bildung von Stickoxiden begünstigen, vermieden. Ein Blaubrenner weist diesbezüglich deutlich geringere Emissionen auf als ältere bestehende Systeme (siehe oben). Durch die annähernd ideale Vormischung entsteht bei der Verbrennung praktisch kein Ruß.

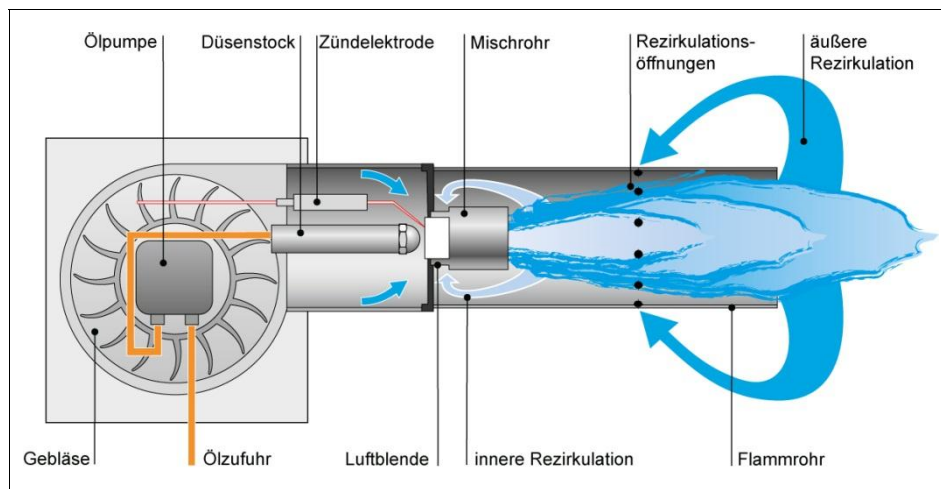


Abbildung 2-4: Aufbau und Prinzip eines Blaubrenners (Institut für Wärme und Öltechnik)

In der Praxis existieren mit dem Drallform- und Mehrdüsenmischsystem weitere Mischsysteme, die auf den vorgestellten Ansätzen basieren⁸. Unter den 6 Mio. in Deutschland betriebenen Ölheizungen befinden sich etwa 5,7 Mio. Standard- und Niedertemperaturkessel (vorwiegend Stauscheibenbrenner) und 0,3 Mio. Brennwertkessel (Blaubrenner). Insgesamt sind davon etwa 24 % älter als 20 Jahre und nur etwa ein Drittel jünger als 14 Jahre. Bei einer technisch sinnvollen Lebensdauer einer Ölheizung von 15 bis 20 Jahren ist damit bereits ein Großteil des Bestandes überaltert (Shell, 2011).

2.3 Eigenschaften und Einsatz von n-Butanol

Eigenschaften

N-Butanol ist ein höherkettiger Alkohol mit vier Kohlenstoffatomen und der Summenformel C_4H_9OH . Im Gegensatz zu Ethanol wird n-Butanol energetisch bislang kaum genutzt. N-Butanol weist den gleichen Aufbau wie Ethanol auf, verfügt jedoch über zwei Kohlenstoffatome mehr. Mit der Länge des Moleküls verändern sich auch dessen chemische und physikalische Eigenschaften. N-Butanol ist vollständig mit Heizöl EL mischbar und weist eine Energiedichte H_i von 27 MJ L^{-1} auf (siehe Kapitel 3.1). Das entspricht etwa 74 % des Heizwertes von Heizöl EL. N-Butanol hat im Vergleich zu Ethanol einen achtmal geringeren Dampfdruck und einen deutlich höheren Flammpunkt von $37,5^\circ\text{C}$. In Verbindung mit einer geringen Korrosivität ist n-Butanol daher für die Handhabung in der bestehenden Mineralölinfrastruktur geeignet (Ranjan, et al., 2012). Die Eigenschaften von n-Butanol sind daher mit denen von Mitteldestillaten wie Heizöl EL, Diesel oder Kerosin zu vergleichen. Tabelle 2-3 zeigt eine Übersicht ausgewählter Eigenschaften von Ethanol, n-Butanol und Heizöl EL.

⁸ Für weitergehende Informationen zum Thema Drallform- und Mehrdüsenmischsystemen wird auf Richter (2002) verwiesen.

Tabelle 2-3: Ausgewählte Eigenschaften von Ethanol, n-Butanol und Heizöl EL; [a] Rakopoulos et al. (2010); [b] DIN 51603-1; [c] GESTIS Stoffdatenbank (2012e); [d] GESTIS Stoffdatenbank (2012d); [e] GESTIS Stoffdatenbank (2012c)

Eigenschaft	Einheit	Ethanol	n-Butanol	Heizöl EL
Dichte	kg m ⁻³	790 ^[a]	813	860 ^[b]
Heizwert h _i	MJ kg ⁻¹	26,8 ^[a]	32,8	45,4 ^[b]
Heizwert h _u	MJ L ⁻¹	21,2	26,7	42,6 ^[b]
Sauerstoffgehalt	% (m/m)	34,8 ^[a]	21,6 ^[a]	0 ^[b]
Dampfdruck bei 20°C	hPa	58,0 ^[a]	6,7 ^[c]	1 ^[d]
Flammpunkt	°C	12 ^[e]	37,5	>55 ^[b]

Einsatz

Der Bedarf von n-Butanol liegt derzeit bei etwa 4,5 Mio. t a⁻¹ und wird praktisch ausschließlich auf Basis fossiler Rohstoffe gewonnen (Green Biologics , 2012). N-Butanol wird unter anderem als Lösemittel und Plattformchemikalie eingesetzt. Erst in jüngerer Vergangenheit wurde n-Butanol aufgrund seiner Ähnlichkeit mit fossilen Mitteldestillaten und der Kompatibilität mit mineralölstämmigen Produkten auf weitere Einsatzmöglichkeiten hin untersucht. So wurde n-Butanol bereits erfolgreich sowohl im Dieselmotor (Rakopoulos, et al., 2010) als auch im Ottomotor (Szwaja, et al., 2010) getestet. Darüber hinaus überprüft das Unternehmen Cobalt Technologies derzeit den Einsatz von n-Butanol in Strahltriebwerken in Kooperation mit der US-amerikanischen Marine (Cobalt Technologies, 2012). Die Einsetzbarkeit von n-Butanol als Biokomponenten in Heizöl EL ist hingegen trotz des hohen Verbrauchs von Heizöl bislang nicht Gegenstand der Forschung gewesen.

2.4 Fermentative Herstellung von n-Butanol

Das auf dem Markt derzeit verfügbare n-Butanol stammt fast ausschließlich aus dem sogenannten Oxo-Prozess auf Basis fossiler Rohstoffe. Derzeit sammeln Firmen wie Butamax, Cobalt Technologies, Butalco und Butylfuel erste Erfahrungen in der fermentativen Herstellung. Dabei ist die Fermentation von n-Butanol auf der Basis von zucker- oder stärkehaltigen Substraten in der industriellen Umsetzung schon seit etwa 100 Jahren bekannt (Jones, et al., 1986). Zverlov et al. (2006) berichten, dass in der ehemaligen UdSSR bis in die späten 1980er Jahre mindestens acht Anlagen in Betrieb waren. Im Folgenden wird daher keine Einzeltechnologie zur fermentativen Herstellung von n-Butanol erläutert, sondern ein Überblick über mögliche Herstellungsvarianten gegeben. Für kaum eines der Verfahren liegt derzeit Erfahrung im industriellen Maßstab vor.

2.4.1 Mikrobiologische Grundlagen, Substrate und Fermentation

Die in der Vergangenheit zur Produktion von n-Butanol eingesetzten Bakterien der Familie der Clostridiaceae sind auch heute noch Gegenstand der Forschung. Darüber hinaus werden zurzeit weitere Mikroorganismen wie *Zymomonas mobilis*, *Pichia stipitis* und *Escherichia coli* untersucht (Swana, et al., 2010). Dazu liegen bislang jedoch kaum experimentelle Erkenntnisse und keinerlei Nachweis über deren großtechnische Eignung vor. Aufgrund dessen wird im Folgenden ausschließlich auf die am häufigsten eingesetzten Vertreter der Clostridiaceae eingegangen. Clostridiaceae gehören zu den grampositiven Bakterien und sind obligat anaerob. Zu den bekanntesten Industriestämmen gehören *C. beijerinckii*, *C. acetobutylicum*, *C. saccharoperbutylacetonicum* und *C. saccharobutylicum*, die sich hinsichtlich ihres Stoffwechsels geringfügig unterscheiden (Ranjan, et al., 2012).

In der ersten von zwei Stoffwechselphasen, der Azedogenese, werden aus dem Substrat Azetat und Butyrat erzeugt. In der zweiten Phase, der Solventogenese, werden diese zur Bildung von n-Butanol eingesetzt. Während bei der Fermentation von Ethanol vergleichsweise wenig Nebenprodukte entstehen, werden bei der Fermentation von n-Butanol auch Aceton und Ethanol gebildet (siehe Abbildung 2-5)⁹. Das Verhältnis von Aceton, n-Butanol und Ethanol, der sogenannten ABE-Fermentation, beträgt etwa 3:6:1. Mit steigender n-Butanol-Konzentration kommt es zur Inhibierung des Stoffwechsels, der oberhalb von 20 g L⁻¹ n-Butanol eingestellt wird (Ranjan, et al., 2012). Neben den Hexosen Glucose, Fructose, Galactose und Mannose können simultan auch die Pentosen Xylose und Arabinose verarbeitet werden. Dadurch eignen sich Clostridiaceae im Gegensatz zu vielen anderen Mikroorganismen auch zur Verarbeitung von hydrolysierten Lignocellulose.

Lignocellulose findet sich in nahezu allen strukturgebenden Pflanzenbestandteilen. Dadurch können auch nicht zucker- oder stärkehaltige Pflanzenteile wie Stroh oder Holz für die Herstellung von n-Butanol herangezogen werden. Neben weiteren wurde die Fermentation von hydrolysiertem Roggenstroh (Qureshi, et al., 2010a), Weizenstroh (Qureshi, et al., 2007a), Maisstroh¹⁰ (Ezeji, et al., 2007) und Switchgrass (Qureshi, et al., 2010c) im Experiment erfolgreich nachgewiesen. Dabei eignet sich vor allem Weizenstroh in besonderer Weise als Fermentationssubstrat. Es kann im Gegensatz zu anderen Substraten ohne eine zusätzliche Entgiftung eingesetzt werden. Darüber hinaus weist Weizenstroh, bedingt durch spezielle Inhaltsstoffe¹¹, eine höhere Fermentationsgeschwindigkeit als die meisten anderen Substrate auf (Qureshi, et al., 2012a). In der praktischen Umsetzung lassen sich Clostridiaceae sowohl in einer Batch- oder Fed-Batch-Fermentation als auch in einem kontinuierlich betriebenen Fermenter einsetzen (vgl. hierzu: Qureshi et al (2007a), Qureshi et al. (2007b) und Ezeji et al. (2012)).

⁹ Im Hinblick auf die Zielstellung der Arbeit wird der Stoffwechsel hier nicht detaillierter beschrieben. Für tiefergehende Informationen sei auf die Arbeiten von Jones und Woods (1986) sowie Lehmann (2012) verwiesen.

¹⁰ Englisch: Corn stover; Rückstände der Maisspflanze nach der Ernte, besteht maßgeblich aus Blättern und Stängeln

¹¹ Furfural und Hydroxymethylfurfural haben einen positiven Einfluss auf die Fermentationsgeschwindigkeit (Qureshi, et al., 2012a)

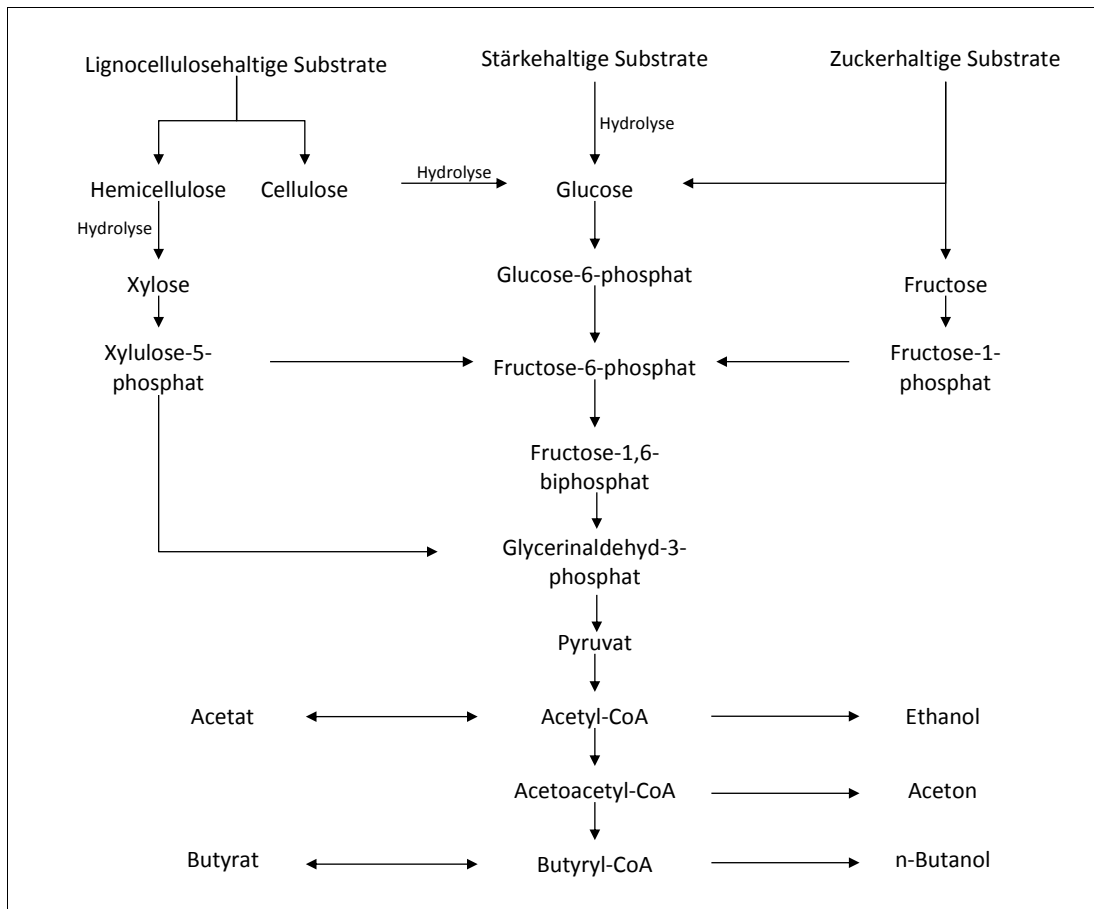


Abbildung 2-5: Vereinfachter Ausschnitt aus dem Stoffwechsel der Aceton-Butanol-Ethanol-Fermentation mittels Clostridiaceae (in Anlehnung an Ranjan et al. (2012))

2.4.2 Hydrolyse lignocellulosebasierter Substrate

Lignocellulose besteht ähnlich einem Verbundwerkstoff aus verschiedenen Bestandteilen, von denen Cellulose, Hemicellulose und Lignin die mit Abstand häufigsten sind. Cellulose besteht aus Glucose, die ein lineares Polymer in meist mikrokristalliner Struktur bildet. Hemicellulose ist ebenfalls aus Hexosen aufgebaut, enthält jedoch auch Pentosen und weitere Bestandteile und ist leichter löslich als Cellulose. Lignin ist ein Polymer ohne einheitliche Struktur, das aus Phenylpropanoiden aufgebaut ist (Malherbe, et al., 2002).

Die Tertiärstruktur von Lignocellulose wird durch kovalente und nicht-kovalente Bindungen hervorgerufen. Cellulose bildet dabei sowohl kristalline Mikrofibrillen als auch amorphe Regionen aus. Hemicellulose ist durch kovalente und Wasserstoffbindungen mit der Cellulose verbunden. Sie lässt sich daher nur aufwändig trennen (Heredia, et al., 1995). Hemicellulose stellt die Verbindung zum Lignin dar, das in Abhängigkeit der enthaltenen Phenylpropanoiden zwischen den Cellulosemikrofibrillen eingelagert wird (siehe Abbildung 2-6). Die Zusammensetzung und Struktur der Lignocellulose variiert mit dem betrachteten Substrat.

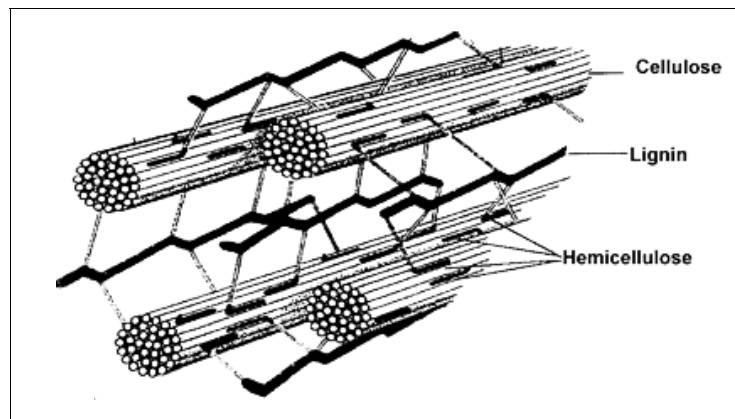


Abbildung 2-6: Schematische Darstellung des Aufbaus von Lignocellulose (Thostrup, 2006)

Es existiert eine Vielzahl von Hydrolyseprozessen, die sich in Abhängig der vorliegenden Art der Lignocellulose zum Aufschluss eignen. Das Ziel aller Prozesse besteht immer im Aufschluss sowohl der komplexen Lignocellulosestruktur als auch der Polymere in Monomere. Für den Aufschluss eignen sich verschiedene Methoden, die sich in chemische, physikalisch-chemische und biologische Methoden einteilen lassen¹². Keine der genannten Methoden bieten einen vollständigen Aufschluss. Sie eignen sich daher insbesondere zum partiellen Aufschluss des Substrates in der Vorbereitung für eine anschließende enzymatische Hydrolyse.

Chemische Methoden

Eine der bewährtesten chemischen Methoden ist die saure Hydrolyse, insbesondere die Vorbehandlung mit verdünnter Schwefelsäure. In der Literatur finden sich dazu verschiedenste Parameter. Während Qureshi et al. (2007a) eine Säurekonzentration von 1 % (m/m) und eine Einwirkzeit von einer Stunde bei 121 °C vorsehen, berichten Galbe et al. (2012) auch von deutlich kürzeren Kontaktzeiten bei höheren Temperaturen bis zu 200 °C. Die Säure löst dabei unspezifisch alle Bestandteile gleichermaßen und setzt so auch Inhibitoren wie Ferulasäure, Syringaldehyd und Cumarsäure frei (Ezeji, et al., 2007).

Neben der sauren Hydrolyse eignet sich ebenfalls die alkalische Hydrolyse zur Vorbehandlung von Lignocellulose. Dabei werden beispielsweise Natrium-, Kalium oder Ammoniumhydroxid meist bei geringeren Temperaturen als die oben genannte Schwefelsäure eingesetzt. Durch die Quellung werden die Verbindungen zwischen Cellulose, Hemicellulose und Lignin aufgebrochen und die Oberfläche für einen enzymatischen Aufschluss vergrößert (Galbe, et al., 2012).

Eine Alternative dazu stellt das in der Papierindustrie entwickelte Organosolv-Verfahren dar (Kleinert, 1971). Dabei werden Methanol, Ethanol, Aceton, Glycol oder Phenole mit geringen Zusätzen von Schwefel- oder Salzsäure zur spezifischen Lösung des Lignin eingesetzt (Galbe,

¹² Die Einteilung orientiert sich an Galbe et al. (2012)

et al., 2012). Das Lösemittel wird bei diesem Prozess anschließend vom Substrat entfernt und erzeugt eine vergleichsweise hochwertige Ligninqualität, die sich zur Weiterverarbeitung zu chemischen Grundstoffen eignet (Haase, 2012).

Ein weniger bekanntes Verfahren besteht im Einsatz ionischer Flüssigkeiten. Diese bestehen aus Salzen, bei denen mindestens ein Ion organischen Ursprungs ist. Dabei wird durch delokalisierte Ladungen die Bildung eines stabilen Kristallgitters in der Weise behindert, dass die Salze bei geringen Temperaturen, teilweise bei Raumtemperatur, in flüssigem Zustand vorliegen (Wasserscheid, et al., 2000). Diese und weitere Eigenschaften können durch die Wahl der Ionen gesteuert werden. Eine Reihe ausgewählter ionischer Flüssigkeiten, wie 1-n-Butyl-3-Methylimidazolium, ist daher in der Lage, die Bindungen zwischen Cellulose, Hemicellulose und Lignin in Makromoleküle aufzubrechen, ohne größere Mengen an Inhibitoren freizusetzen (Galbe, et al., 2012). Für die Anwendung im industriellen Maßstab müssen ionische Flüssigkeiten aus ökonomischer Sicht annähernd vollständig zurückgewonnen werden. Darüber hinaus muss die Inhibierung der anschließenden Fermentation durch Rückstände ausgeschlossen werden. Umsetzbare Lösungsansätze für eine industrielle Anwendung liegen diesbezüglich noch nicht vor (Galbe, et al., 2012).

Physikalisch-chemische Methoden

Eine der bekanntesten physikalisch-chemischen Methoden zum Aufschluss von Lignocellulose ist die Vorbehandlung mit Dampf. Bei der Methode wird das teilweise mit Schwefelsäure eingeweichte Substrat mittels Dampf für 1 – 20 min auf Temperaturen von 160 – 240 °C erhitzt und meist abrupt entspannt (Galbe, et al., 2012). Die Methode ist daher auch unter der Bezeichnung Dampfexplosion bekannt. Entgegen der gängigen Vermutung liegt der Hauptmechanismus jedoch nicht im Bersten der Polymerstruktur während der Entspannung, sondern vielmehr in der Autolyse durch im Substrat vorhandene organische Säuren, wie Essigsäure (Galbe, et al., 2012). Im Hinblick auf die Freisetzung von Inhibitoren ist der Vorgang daher mit der Vorbehandlung mittels verdünnter Schwefelsäure vergleichbar.

Darüber hinaus ist die Methode der Hydrothermolyse mit Hilfe von Wasser anstelle von Dampf bekannt. Sie bietet sich insbesondere als Nassoxidation unter Zugabe von Luft oder Sauerstoff an. Einige Bereiche des Lignins werden dabei bei Temperaturen von 120 – 200 °C, teilweise bei erhöhtem pH-Wert gelöst, und oxidiert (Schmidt, et al., 1998).

Eine alternative Methode ist der Einsatz von Ammoniak anstelle von Dampf oder Wasser. Nach einer Kontaktzeit von 10 – 60 min bei Temperaturen von etwa 100 °C wird der Druck schlagartig verringert. Daher ist der Vorgang auch unter der Bezeichnung Ammonia fiber explosion (*AFEX*) bekannt (Teymouri, et al., 2005). Ammoniak reagiert dabei basisch und ruft mit der Vergrößerung der Oberfläche und partiellen Lösung von Lignin ähnliche Effekte wie die Vorbehandlung mit Basen hervor (Galbe, et al., 2012).

Werden Druck und die Temperatur des Ammoniaks über 132 °C bzw. 11,4 MPa (114 bar) erhöht, wird es zum überkritischen Medium und weist dadurch veränderte Eigenschaften auf (Kruse, et al., 2008c). Auch Wasser und Kohlendioxid gelangen bei Temperaturen oberhalb von 374 °C bzw. 31 °C und Drücken von 22,1 MPa (221 bar) bzw. 7,4 MPa (74 bar) in den überkritischen Bereich (Kruse, et al., 2008a; Kruse, et al., 2008b). Überkritische Medien weisen besondere Lösungseigenschaften auf, die sich über die Prozessparameter steuern lassen. Die Eignung überkritischer Medien zur Lösung von Lignin wurde experimentell bereits erfolgreich nachgewiesen, ist bislang jedoch noch nicht kommerziell nutzbar (Ferreira Santos, et al., 2011; Schacht, et al., 2008).

Einen gänzlich anderen Ansatz verfolgt die Elektroporation durch Pulsed-Electric-Fields (PEF). Diese Felder werden durch eine wechselnd angelegte Feldspannung hervorgerufen. Das Verfahren wurde in der Lebensmittelindustrie bereits vielfach erfolgreich angewendet, um den Massentransfer zu erhöhen (Knorr, et al., 1998; Knorr, et al., 1994). In der Vorbehandlung von Lignocellulose ist eine Erhöhung der Durchlässigkeit für Chemikalien und Enzyme ebenfalls erwünscht (Kumar, et al., 2009). Im Experiment konnte bereits eine erhöhte Farbstoffaufnahme in Folge der Elektroporation für Holzhackschnitzel und Rutenhirsestroh (Switchgrass) gezeigt werden (Kumar, et al., 2011). Ein Ergebnis über den Einfluss auf die enzymatische Aufschließbarkeit PEF-behandelter Substrate liegt in diesem Zusammenhang jedoch noch nicht vor.

Biologische Methoden

Während einige Autoren auch die enzymatische Hydrolyse zu den biologischen Methoden zählen (vgl. hierzu: Lee (1997)), werden im Folgenden ausschließlich mikrobiologische Methoden diskutiert. Die Lignocellulose des Substrates kann dabei von Braun-, Weiß- oder Weichfäulepilzen zersetzt werden. Während Weiß- und Weichfäulepilze in erster Linie Lignin abbauen (Belkacemi, et al., 1998), verarbeiten Braunfäulepilze Cellulose und Hemicellulose (Ray, et al., 2010). Gemein ist allen Arten eine geringe Umsatzrate, durch die zurzeit keine umsetzbaren Industrieanwendungen bekannt sind (Galbe, et al., 2012).

2.4.3 In situ-Produktabtrennung

Wie in Kapitel 2.4.1 diskutiert, wirkt n-Butanol ab einer Konzentration von etwa 20 g L⁻¹ inhibierend auf die Fermentation. Bereits unterhalb dieser Konzentration beeinflusst n-Butanol die Umsatzrate negativ (Ranjan, et al., 2012). Ohne eine Produktabtrennung können daher nicht mehr als etwa 60 g L⁻¹ Zucker eingesetzt werden. Um höhere Biomasse/Wasser-Verhältnisse realisieren zu können, muss n-Butanol während der Fermentation in situ abgetrennt werden. Das setzt voraus, dass die dafür eingesetzten Verfahren sich nicht negativ auf die Fermentationsrate auswirken. Im Folgenden wird eine Reihe bekannter Trennverfahren vorgestellt, die sich für den in situ-Einsatz eignen.

Flüssig-Flüssig-Extraktion

N-Butanol ist in wässrigen Lösungen nur begrenzt löslich und bildet in reinem Wasser oberhalb von etwa 79 g L^{-1} eine eigene Phase aus. Die Flüssig-Flüssig-Extraktion beruht auf der Tatsache, dass n-Butanol in einigen nicht mit Wasser mischbaren Lösemitteln deutlich höhere Löslichkeiten aufweist. Voraussetzung ist eine hohe Selektivität des Lösungsmittels für die Fermentationsprodukte Aceton, n-Butanol und Ethanol (ABE-Produkte) sowie dessen Ungiftigkeit für die eingesetzten Mikroorganismen.

Bei der Anwendung wird ein geeignetes Lösemittel wie Oleylalkohol oder Mesitylen durch die Fermentationsbrühe geführt. Die in das Lösemittel übergehenden Produkte werden anschließend, beispielsweise mittels Destillation, abgetrennt (Kraemer, et al., 2011). Neben dem Einsatz von Reinstoffen ist auch die Verwendung von Lösemittelgemischen bekannt (Ranjan, et al., 2012). Rechnerisch sind dadurch hohe Energieeinsparungen von 90 % gegenüber der etablierten Destillation möglich. Der Prozess befindet sich für die Separation von ABE-Produkten jedoch noch im experimentellen Stadium (Kraemer, et al., 2011).

Gas Stripping

Neben den oben diskutierten flüssigen Lösemitteln eignen sich in ähnlicher Weise verschiedene Gase zur selektiven Produktentfernung. Dabei werden beispielsweise Fermentationsgase oder Stickstoff in die Fermentationsbrühe eingeleitet. Die während dieses Vorgangs in das Gas diffundierenden ABE-Produkte werden anschließend durch Kondensation abgetrennt. Über die Produktabtrennung hinaus weisen Qureshi et al. (2007a) auf den Agitationseffekt des Gases in der Fermentationsbrühe hin. Dieser wirkt sich positiv auf die Fermentationsgeschwindigkeit aus und kann ein Rührwerk ersetzen. Durch ihre Einfachheit eignet sich die Methode in besonderer Weise für den industriellen Einsatz (Ranjan, et al., 2012).

Pervaporation

Wird das Trägergas nicht direkt in die Fermentationsbrühe eingeleitet, sondern durch eine Membran getrennt, spricht man von Pervaporation. Dabei werden die ABE-Produkte mit möglichst hoher Sensitivität durch die Membran sorbiert, diffundieren durch die diese und werden bei geringem Druck auf der Gegenseite vom Trägergas desorbiert (Ranjan, et al., 2012). Wie auch beim Gas Stripping eignet sich vor allem die Kondensation zur Produktabtrennung aus dem Trägergas. Die Funktionalität der Pervaporation für die Fermentation mit *Clostridium beijerinckii* wurde im Versuch bereits erfolgreich nachgewiesen (Qureshi, et al., 1999; Qureshi, et al., 2008b). Es besteht eine Reihe von Ansätzen, die Selektivität, Haltbarkeit und Durchlässigkeit von Membranen hinsichtlich des Einsatzes in der ABE-Fermentation zu verbessern (Ranjan, et al., 2012). Jedoch wird in Experimenten von einer Einschränkung der Membranfunktionalität durch Verschmutzung (*Fouling*) berichtet (Wu, et al., 2012; Qureshi, et al., 2008c).

Pertraktion

Wird anstelle eines Trägergases ein Lösemittel eingesetzt, so dass die Permeation durch eine Membran von einer flüssigen in eine andere flüssige Phase stattfindet, liegt Pertraktion vor. Anstelle einer Membran kommen dabei insbesondere Hohlfasern zum Einsatz, darüber hinaus wird derzeit auch die Einsetzbarkeit flüssiger Membranen überprüft (Beltran, et al., 2012). Durch die Trennung von Lösemittel und Fermentationsbrühe umgeht die Methode dabei die in der Flüssig-Flüssig-Extraktion notwendige Voraussetzung der Ungiftigkeit des Lösemittels und praktische Schwierigkeiten wie die Bildung von Emulsionen (Ranjan, et al., 2012). Die Einsetzbarkeit des Verfahrens wurde von Qureshi et al. (2005) bestätigt, jedoch liegen in der Literatur bislang keine Informationen über die langfristige Betriebsbereitschaft der Hohlfasern oder einer Flüssigmembran vor.

Adsorption

Einen gänzlich anderen Ansatz beschreibt das Prinzip der Adsorption. Dabei lagern sich die ABE-Produkte mit einer hohen Selektivität auf der Oberfläche von Festkörpern an. Die anschließende Freisetzung der adsorbierten ABE-Produkte erfolgt durch thermische Regeneration des Adsorptionsmediums. Als Adsorptionsmedien eignen sich beispielsweise aktivierte Holzkohle und verschiedene Silikate, Harze und weitere Kunststoffe (Qureshi, et al., 2005). Um die Bildung eines Biofilms zu vermeiden, wird in der Praxis ausschließlich von Zellen gereinigte Fermentationsbrühe über das Adsorptionsmedium geleitet (Ranjan, et al., 2012). Das Verfahren führt im Experiment zu Energieeinsparungen von bis zu 60 % gegenüber der Destillation (Qureshi, et al., 2005). Es ist jedoch bislang unklar, ob der Prozess für die Produktabtrennung im Rahmen einer ABE-Fermentation industriell geeignet ist.

2.5 Biomassennutzung und Verfügbarkeit in Deutschland

Deutschland ist innerhalb von Europa der zweitgrößte Agrarproduzent (DBFZ, 2012) und deckt seinen Biomassebedarf derzeit überwiegend auf der Basis von Holz. Die Nutzung von Biomasse als Energieträger hat in der Vergangenheit verstärkt zu Diskussionen um deren Nachhaltigkeit geführt. In Deutschland sollen daher insbesondere landwirtschaftliche Reststoffe stärker für eine energetische Nutzung herangezogen werden (BMU, 2011). Darunter werden alle Stoffe verstanden, die bei der Produktion, Ernte oder Verarbeitung im landwirtschaftlichen Bereich anfallen (DBFZ, 2012). Es besteht daher weder eine direkte noch indirekte Konkurrenz zur Nahrungsmittelkette.

Nach Angaben des Deutschen Biomasseforschungszentrums (2012) werden landwirtschaftliche Reststoffe in größerem Umfang zurzeit fast ausschließlich in Form tierischer Exkremente genutzt. Diese werden zur Produktion von Biogas eingesetzt, während feste Rückstände bislang kaum genutzt werden. Insbesondere das Potential der Getreidestrohnutzung ist bislang wenig erschlossen. Dabei eignet es sich im Vergleich zu anderen landwirtschaftlichen Reststoffen durch seinen hohen Cellulose- und niedrigen Feuchtigkeitsgehalt vergleichsweise gut für den Transport und die Lagerung. Die erste großtechnische Strohfeu-

erung mit einem Bedarf von 75.000 t a⁻¹ wird Mitte 2013 im Emsland in Betrieb gehen (Otto, 2012).

2.5.1 Energie- und klimapolitische Bedingungen

In Europa besteht durch die Erneuerbare-Energien-Richtlinie (EG, 2009) eine einheitliche Zielsetzung über den Ausbau erneuerbarer Energien auf insgesamt 20 % im Jahr 2020. Die Höhe des Anteils in jedem Mitgliedsland ist dabei individuell geregelt und beträgt für Deutschland 18 % im Jahr 2020. Über die Höhe des Anteils erneuerbarer Energien hinaus enthält die Erneuerbare-Energien-Richtlinie Nachhaltigkeitskriterien. Diese umfassen die Einsparung von Treibhausgasen, den Flächenschutz und die nachhaltige landwirtschaftliche Bewirtschaftung (DBFZ, 2012). Dabei werden die Treibhausgasemissionen von Reststoffen wie Stroh vorerst nicht berücksichtigt (siehe Kapitel 6.1.3).

Im Raumwärmesektor regelt seit dem Jahr 2008 das Gesetz zur Förderung erneuerbarer Energien im Wärmebereich den Anteil einzusetzender erneuerbarer Energien. Diese müssen bis zum Jahr 2020 mindestens 14 % betragen (EeWärmeG, 2011). Das Gesetz gilt sowohl für Neubauten als auch grundlegend zu renovierende Gebäude der öffentlichen Hand. Dabei bleibt es dem Eigentümer überlassen, welche Maßnahmen er zur Erfüllung der Vorgaben wählt.

Im Raum Baden-Württemberg gilt eine zusätzliche Regelung für den Altbestand. Diese sieht einen Anteil erneuerbarer Energien von 10 % ebenso für den Gebäudebestand vor, sofern wesentliche Komponenten wie der Kessel ausgetauscht werden (EeWärmeG, 2007). Im Vergleich zum Neubau stellen diese Regelung und die damit gegebenenfalls verbundenen baulichen Maßnahmen besondere Anforderungen an Eigentümer. Baden-Württemberg war daher das erste Bundesland, in dem Heizöl EL mit 10 % FAME-Anteil großflächig angeboten wurde.

Darüber hinaus existiert ein bundesweites Marktanreizprogramm, das Investitionshilfen für förderwürdige Technologien zur Bereitstellung von Raumwärme und Warmwasser gewährt (DBFZ, 2012).

2.5.2 Reststrophpotential in Deutschland

Das Deutsche Biomasseforschungszentrum (2012) definiert für den Umgang mit Reststoffen die vier Potentialdefinitionen theoretisches, wirtschaftliches, nachhaltiges und erschließbares Potential. Die Potentiale werden im Folgenden in Anlehnung an die Studie des Deutschen Biomasseforschungszentrums erläutert.

Das *theoretische Potential* umfasst die gesamte innerhalb eines Zeitraumes beziehungsweise einer Region bereitgestellte Biomasse. Es gibt damit die physikalische Obergrenze der Biomassenutzung wieder. Aufgrund verschiedener Einschränkungen lässt sich das theoretische

Potential in der Praxis jedoch nicht vollständig zur Nutzung heranziehen, wodurch es für eine Potentialabschätzung kaum praktische Relevanz besitzt. Zum theoretischen Potential von Reststroh wurde bereits eine Reihe von Studien veröffentlicht, die aufgrund unterschiedlicher Modelle und Annahmen teils stark divergieren (vgl. hierzu: Leible et al. (2003), Fritsche et al. (2004), Thrän et al. (2011), DBFZ (2012)). Alle Studien gehen jedoch von der Grundannahme aus, dass das Aufkommen von Stroh proportional zur Produktion von Getreide ist. Bei einem Korn-Stroh-Verhältnis von 1:0,8 (DüV, 2006) schätzt das Deutsche Biomasseforschungszentrum (2012) das theoretische Potential von Getreidestroh auf 29,8 Mio. t a⁻¹ Frischmasse. Abbildung 2-7 stellt die Verteilung nach Landkreisen dar.

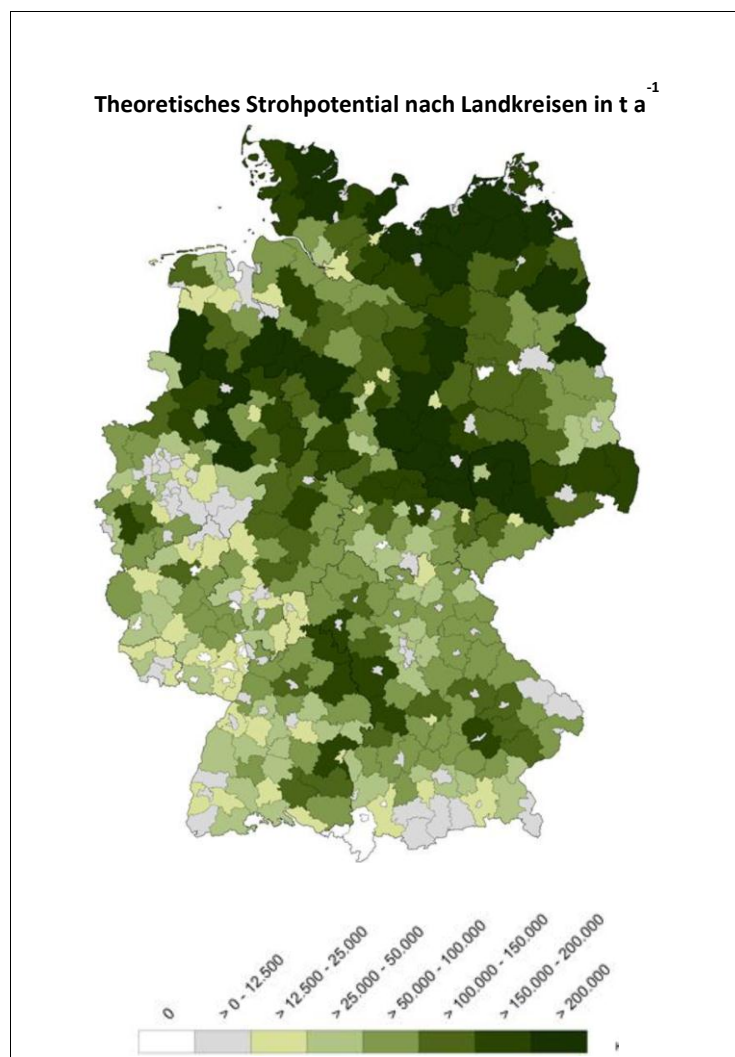


Abbildung 2-7: Verteilung der theoretisch vorhandenen Strohmenge in Deutschland (DBFZ, 2012)

Berücksichtigt man technische Restriktionen, beispielsweise bei der Bergung, erhält man das *technische Potential*. Es beinhaltet gesetzliche, ökologische und gesellschaftliche Einschränkungen. Diese können durch Schutzgebiete, Cross-Compliance-Regelungen und die Berücksichtigung der Nahrungsmittelproduktion gegeben sein. Das technische Potential gibt daher

den Anteil des theoretischen Potentials wieder, der für eine Biomassenutzung im Rahmen der existierenden Regelungen erschlossen werden kann.

Das *wirtschaftliche Potential* ist der Anteil des technischen Potentials, dessen Erschließung unter Berücksichtigung von Markt- und Steuerungseinflüssen ökonomisch sinnvoll ist. Zu den beeinflussenden Faktoren zählen Subventionen, Umlagesysteme und steuerliche Aspekte sowie die Referenzpreise fossiler Energieträger. Im Gegensatz zum technischen Potential variiert das wirtschaftliche Potential daher in Abhängigkeit der Marktbedingungen.

Zieht man weitere ökologische Faktoren, naturschutzfachliche, landschaftsästhetische und ressourcenschutz-spezifische Aspekte hinzu, spricht man vom *nachhaltigen Potential*. Das nachhaltige Potential berücksichtigt beispielsweise eine langfristig ausgeglichene Humusbilanz durch den Verbleib von Biomasse auf dem Acker. Der verbleibende Anteil variiert dabei mit der Bodenart, dem im Boden bereits vorhandenen Humus, dem Anteil an ausgebrachten Reststoffen aus der Viehzucht und der Fruchtfolge des Ackers. So gelten beispielsweise Leguminosen und Ackergras als humusmehrend, Zuckerrüben und Silomais hingegen als humuszehrend.

Das Deutsche Biomasseforschungszentrum (2012) erarbeitete eine Abschätzung des nachhaltigen Potentials unter Berücksichtigung dieser Faktoren (siehe Abbildung 2-4). Durch den Einsatz verschiedener Schätzmethode ergibt sich eine Bandbreite an Abschätzungen, deren Maximum und Minimum jeweils aufgeführt ist. Das nachhaltige Potential an Reststroh im Raum Deutschland liegt demnach zwischen 8,0 und 13,3 Mio. t a⁻¹. Es beträgt damit 27 beziehungsweise 45 % des theoretischen Potentials. Bezogen auf die Gesamtfläche Deutschlands entspricht das nachhaltige Reststrohaufkommen der Menge von 22,3 bis 37,1 t km⁻² a⁻¹ Reststroh. Die größten Reststrohpotentiale liegen unabhängig von der eingesetzten Methode im Osten Schleswig-Holsteins, im Nordwesten Mecklenburg-Vorpommerns und im nördlichen Nordrhein-Westfalen bis nach Niedersachsen (DBFZ, 2012).

Tabelle 2-4: Nachhaltiges Reststrohpotential in Frischmasse in Deutschland (Potential in Anlehnung an DBFZ (2012); Flächen in Anlehnung an DESTATIS (2012))

Bundesland	Fläche km²	Theoretisches P. Mio. t a⁻¹	Max nachhaltiges P. Mio. t a⁻¹	Min nachhaltiges P. Mio. t a⁻¹
Schleswig-Holstein	15.799	1,9	0,9	0,6
Hamburg	755	0,0	0,0	0,0
Niedersachen	47.613	4,6	2,0	0,9
Bremen	419	0,0	0,0	0,0
Nordrhein-Westfalen	34.092	3,0	1,4	1,2
Hessen	21.115	1,5	0,7	0,6
Rheinland-Pfalz	19.854	1,0	0,4	0,2
Baden-Württemberg	35.751	2,1	0,8	0,7
Bayern	70.550	4,7	1,8	1,5
Saarland	2.569	0,1	0,0	0,0
Berlin	888	0,0	0,0	0,0
Brandenburg	29.483	1,8	0,8	0,4
Mecklenburg-Vor.	23.191	2,8	1,4	0,5
Sachsen	18.420	1,7	0,8	0,1
Sachsen-Anhalt	20.450	2,7	1,4	0,3
Thüringen	16.173	1,8	0,9	0,3
Deutschland	357.121	29,8	13,3	8,0

Die obige Betrachtung kann die Komplexität der Rohstoffbereitstellung für ein Einzelprojekt lediglich verkürzt abbilden. Neben weiteren gesellschaftspolitischen Restriktionen, die die zu erschließende Strohmenge verringern können, liegen lokale Konzentrationen vor, die in der Lage sind, deutliche Abweichungen vom durchschnittlichen Flächenaufkommen zu bewirken. Die tatsächlich zur Verfügung stehende Reststrohmenge für ein Projekt wird daher als das *erschließbare Potential* definiert.

3 Experimentelle Überprüfung der Einsetzbarkeit von n-Butanol als Biokomponente in Heizöl EL

Das Ziel des vorliegenden Kapitels ist die Überprüfung der Einsetzbarkeit von n-Butanol als Biokomponente in Heizöl EL. Für den Betrieb von Ölbrennern mit Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen gelten die gleichen Anforderungen wie für den Betrieb mit Heizöl EL. Die Einsetzbarkeit von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen kann dann als grundsätzlich positiv bewertet werden, wenn folgende Anforderungen erfüllt sind:

- Keine Erhöhung der Abgasemissionen von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen im Vergleich zu Heizöl EL
- Gewährleistung der Betriebssicherheit des Einsatzes von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen

Im ersten von zwei Schritten wird eine Parameterstudie durchgeführt, die die Eigenschaften von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen auf Basis von Analyseergebnissen bewertet. Darauf aufbauend folgt im zweiten Schritt eine experimentelle Überprüfung der Einsetzbarkeit von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in einem marktüblichen Stauscheibenbrenner (siehe Kapitel 2.2). Das Kapitel schließt mit der Zusammenfassung aller Teilergebnisse. Beide Untersuchungen wurden in Zusammenarbeit mit dem Oel-Wärme-Institut GmbH, Herzogenrath durchgeführt und teilweise in Hoffmann et al. (2012) veröffentlicht.

3.1 Parameterstudie zu Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen als Brennstoff

Ziel der Parameterstudie ist die grundsätzliche Überprüfung der Einsetzbarkeit von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen mit der Hilfe von Analysemethoden. In der Literatur liegen vergleichbare Ergebnisse bislang ausschließlich über den Einsatz von Diesel/n-Butanol-Gemischen in Verbrennungsmotoren vor (vgl. hierzu: Rakopoulos et al. (2010); Thongchai et al. (2009)). Für die untersuchten Diesel/n-Butanol-Gemische bis 40 % (V/V) n-Butanol bestehen keine Betriebseinschränkungen. Zwar stellt der Betrieb eines Ölbrenners andere Anforderungen an den Brennstoff, jedoch lassen diese Ergebnisse auf eine potentielle Einsetzbarkeit von n-Butanol als Biokomponente in Heizöl EL schließen. Im Folgenden werden zunächst die Untersuchungskriterien aus den Anforderungen an alternatives Heizöl EL A¹³ auf Basis der DIN SPEC 51603-6 definiert. Anschließend erfolgt die Analyse und Überprüfung der grundsätzlichen Einsetzbarkeit in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration.

¹³ siehe Kapitel 2.1

3.1.1 Untersuchungskriterien an Heizöl EL/n-Butanol-Gemische

Ölfeuerungsanlagen und Heizöl EL sind durch einen jahrelangen Prozess der Anpassung aufeinander abgestimmt. In diesem Zusammenhang definiert die DIN 51603-1 die Anforderungen an Brennstoffe für den Einsatz in Ölfeuerungsanlagen. Durch die Notwendigkeit auch Heizöle mit alternativem beziehungsweise erneuerbarem Anteil überprüfen zu können, ist die angepasste Spezifikation DIN SPEC 51603-6 erarbeitet worden (siehe Kapitel 2.1). Sie ist aus der bestehenden DIN 51603-1 für Heizöl EL hervorgegangen und befindet sich zurzeit im Status einer Vornorm. Die in der vorliegenden Arbeit untersuchten Kriterien werden im Folgenden anhand einer Kurzbeschreibung vorgestellt:

1. Homogenität:

Gemäß DIN SPEC 51603-6 muss der Brennstoff nach Sichtprüfung homogen, frei von sichtbaren Verunreinigungen und Sedimenten sowie freiem Wasser sein. Die DIN 51603-1 stellt diesbezüglich keine Anforderungen an den Brennstoff.

2. Dichte:

Sie beschreibt das Verhältnis von Masse bezogen auf ein Standardvolumen. Die Ermittlung erfolgt nach DIN ISO 12185. Gemäß DIN 51603-1 und DIN SPEC 51603-6 darf sie nicht mehr als 860 kg m^{-3} betragen. Ein unterer Grenzwert ist nicht definiert.

3. Heizwert:

Er gibt den Gehalt thermischer Energie einer Stoffmenge wieder, die bei einer Verbrennung ohne Kondensation der Verbrennungsgase zur Verfügung steht. Er wird gemäß DIN 51900-2 in einem Bombenkalorimeter ermittelt. Im Gegensatz zum Heizwert H_i enthält der Brennwert H_s gegebenenfalls die Kondensationswärme der Verbrennungsgase. Brennwerte lassen sich in Heizwerte umrechnen. Nach DIN SPEC 51603-6 muss der Brennwert mindestens 42 MJ kg^{-1} betragen, was bei Heizöl EL einem Heizwert von $40^{14} \text{ MJ kg}^{-1}$ entspricht.

4. Flammpunkt:

Er bezeichnet die Temperatur, bei der sich ein zündfähiges Brennstoff/Luft-Gemisch bildet. Die DIN EN ISO 2719 beschreibt das Verfahren nach Pensky-Martens mit geschlossenem Tiegel. Dabei wird die Probe beim Aufheizen in regelmäßigen Temperaturintervallen einer Zündquelle ausgesetzt und die niedrigste Entzündungstemperatur ermittelt. Der Flammpunkt darf für Brennstoffe

¹⁴ $39,62 \text{ MJ kg}^{-1}$ Umrechnung nach DIN 18599-1

gemäß DIN 51603-1 und DIN SPEC 51603-6 die Temperatur von 55 °C nicht unterschreiten.

5. Kinematische Viskosität:

Sie ist ein Maß für die Zähflüssigkeit eines Brennstoffs. Die Bestimmung erfolgt durch die Ermittlung der Durchflusszeit durch kalibrierte Kapillare gemäß DIN EN ISO 3104. Nach DIN 51603-1 und DIN SPEC 51603-6 darf sie $6 \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1}$ bei 20 °C beziehungsweise $3,8 \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1}$ bei 40 °C nicht überschreiten.

6. Destillationsverlauf:

Er kennzeichnet den Verdunstungsgrad eines Brennstoffes in Abhängigkeit der Temperatur. Die Analyse findet durch die Erwärmung einer Probe in einem Destillationskolben nach DIN EN ISO 3405 statt. In Abhängigkeit der Destillationstemperaturen werden die aufgefangenen Destillatmengen und der Rückstand ermittelt. Gemäß DIN 51603-1 darf die verdunstete Menge Brennstoff bei einer Temperatur von 250 °C nicht mehr als 65 % (V/V) betragen. Bei einer Temperatur von 350 °C müssen mindestens 85 % (V/V) verdunstet sein. Darüber hinaus fordert die DIN SPEC 51603-6, dass der Destillationsverlauf innerhalb einer Bandbreite liegt, die durch die zwei in Abbildung 3-1 gezeigten Ungleichungen begrenzt wird.

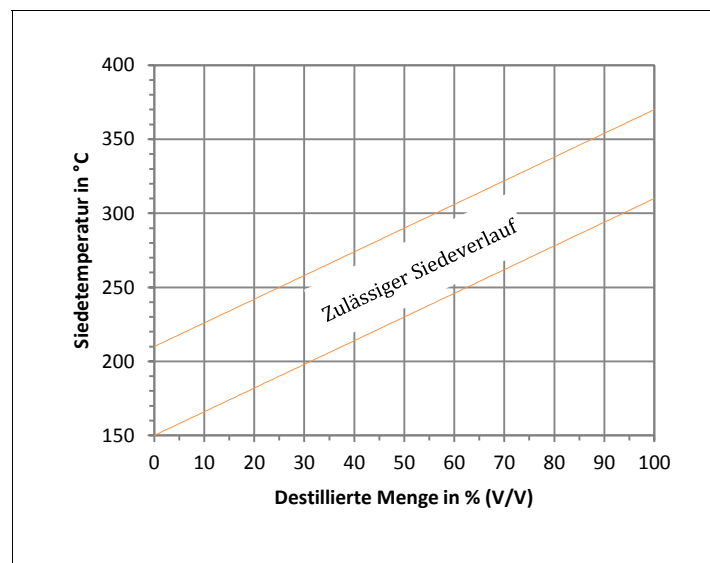


Abbildung 3-1: Bandbreite für den Destillationsverlauf von Heizöl EL A nach DIN SPEC 51603-1

7. Temperaturgrenzwert der Filtrierbarkeit (*Cold filter plugging point, CFPP*):

Die Temperatur, bei der ein Kälte ausgesetzter Brennstoff eine so starke Paraffinausscheidung aufweist, dass das Durchströmen eines Filters unter genormten Bedingungen nicht mehr möglich ist, wird Temperaturgrenze der Filtrierbarkeit genannt. Die Bestimmung erfolgt gemäß DIN EN 116. In Abgrenzung dazu wird der Punkt, an dem die Paraffinausscheidung sichtbar wird,

Cloudpoint genannt. Nach DIN 51603-1 und DIN SPEC 51603-6 erfüllen Brennstoffe mit einem CFPP von maximal -12 °C die Spezifikation in jedem Fall. Für höhere Werte gelten Einschränkungen (vgl. hierzu: DIN 51603-1; DIN SPEC 51603-6).

8. Koksrückstand:

Die Rückstandsmenge einer Probe, die nach der Verdampfung beziehungsweise der Pyrolyse unter Standardbedingungen gemäß DIN EN ISO 10370 zurückbleibt, wird Koksrückstand genannt. Nach DIN 51603-1 darf der Koksrückstand maximal 0,3 % (m/m) betragen. Die Vornorm DIN SPEC 51603-6 stellt diesbezüglich keine Anforderungen an den Brennstoff.

9. Wassergehalt:

Der Wassergehalt wird gemäß DIN EN ISO 12937 und in mg kg⁻¹ angegeben. Er wird durch Titration in einem coulometrischen Apparat nach Karl Fischer durch die Reaktion mit Jod bestimmt. Nach DIN 51603-1 darf er maximal 200 mg kg⁻¹ betragen. Die auf alternative Komponenten ausgelegte DIN SPEC 51603-6 sieht eine höhere Obergrenze von maximal 300 mg kg⁻¹ vor, die im Folgenden Anwendung findet.

10. Thermische Stabilität:

Die thermische Stabilität ist ein Maß für den Alterungsrückstand von Brennstoffen. Diese werden unter Standardbedingungen nach DIN 51371 bei erhöhter Temperatur von 105 °C und in Kontakt mit einer Kupferspule für 16 h gelagert. Filtrierbare und unfiltrierbare Rückstände bilden dabei das thermische Sediment. Gemäß DIN 51603-1 liegt dieses unter 140 mg. Die DIN SPEC 51603-6 verweist darauf, dass zur Bestimmung der thermischen Stabilität alternativer Komponenten noch kein Testverfahren verabschiedet wurde.

11. Schmierfähigkeit:

Die Schmierfähigkeit eines Brennstoffes wird gemäß DIN EN ISO 12156-1 durch einen Reibungskörpertest geprüft. Dabei wird mit Hilfe eines Schwingungsverschleißprüfgeräts (high-frequency reciprocating rig, HFRR) der Verschleiß eines mit dem Brennstoff geschmierten Prüfkörpers unter definierten Bedingungen ermittelt. Die Größe der beim Test entstehenden Abflachung, die Verschleißskalotte, gibt den Verschleißgrad wieder. Nach DIN 51603-1 und DIN SPEC 51603-6 darf die Verschleißskalotte den Grenzwert von 460 µm nicht überschreiten.

12. Oxidationsstabilität:

Sie ist ein Maß für die Stabilität eines Brennstoffes in der Langzeitlagerung. Während der Analyse wird der Brennstoff unter erhöhter Temperatur von 110 °C von einem Luftstrom durchströmt. Die dabei entstehenden Oxidationsprodukte werden in entmineralisiertes Wasser überführt. Die Leitfähigkeit des Wassers lässt einen Rückschluss auf die bei der Oxidation entstehenden Carbonsäuren zu. Die Zeit bis zum Erreichen einer stark erhöhten Freisetzung von Oxidationsprodukten wird Induktionszeit genannt. Der Test erfolgt gemäß DIN EN 15751 beziehungsweise ASTM D 7545-09. In der DIN SPEC 51603-6 existiert noch kein Grenzwert für die Induktionszeit, diese ist lediglich anzugeben. Die Überprüfung ist für FAME-Gehalte von mehr als 2 % vorgesehen, ein Vergleich der Oxidationsstabilität von Heizöl EL und Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen lässt dennoch Rückschlüsse auf die Einsetzbarkeit zu.

3.1.2 Konzeption und Planung der Parameterstudie

Für die Analyse werden Heizöl EL/n-Butanol-Gemische in folgenden Konzentrationen aufgemischt: 0 %, 10 %, 20 %, 50 %, 70 %, 100 %. Für den Flammpunkt wird eine zügige Abnahme mit steigender n-Butanol-Konzentration erwartet (vgl. hierzu: Thongchai et al. (2009)). Um ein möglichst genaues Bild über den Einfluss der Konzentration von n-Butanol auf den Flammpunkt in Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen zu erhalten, werden für die Analyse des Flammpunktes folgende weitere Proben untersucht: 1,5 %, 2,5 %, 5 %, 15 %, 30 %, 40 %, 60 %, 80 %. Zusätzlich zu den in Kapitel 3.1.1 identifizierten Anforderungen, wird für alle Proben der n-Butanol-Gehalt analysiert.

3.1.3 Ergebnisbeschreibung der Parameterstudie

1. Homogenität:

Die Sichtprüfung ergibt, dass alle Heizöl EL/n-Butanol-Gemische homogen, frei von Verunreinigungen und Sedimenten sowie freiem Wasser sind. Abbildung 3-2 zeigt eine Probenauswahl.

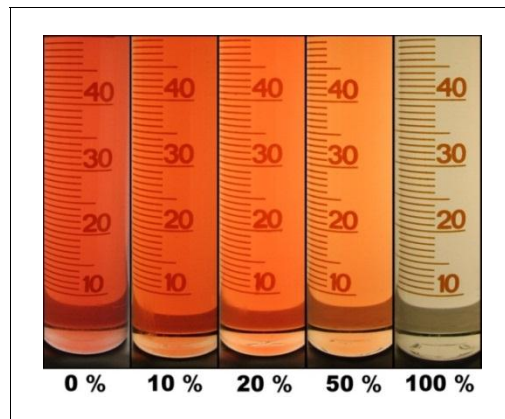


Abbildung 3-2: Ergebnis der Sichtprüfung von Heizöl/n-Butanol-Gemischen; es liegen homogene Gemische vor, Verunreinigungen, Sedimente oder Wasser sind nicht sichtbar

2. Dichte:

Die Dichte der untersuchten Proben nimmt mit steigendem n-Butanol-Gehalt ab (siehe Abbildung 3-3). Alle Proben liegen unterhalb des Grenzwertes von 860 kg m^{-3} .

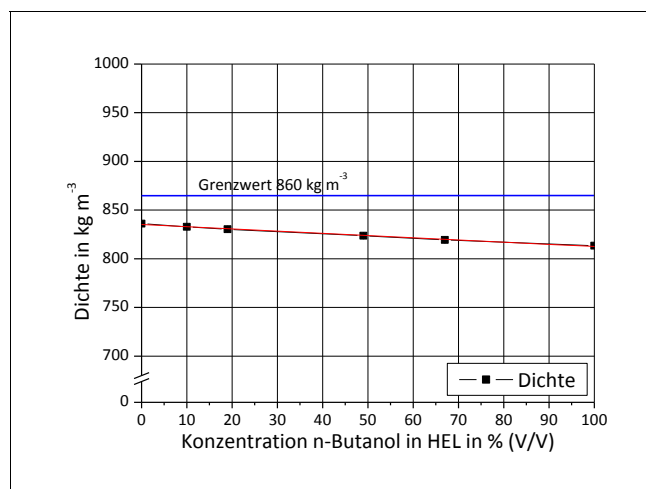


Abbildung 3-3: Dichte von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration nach DIN EN ISO 12185 ($r = 0,4 \text{ kg m}^{-3}$)

3. Brennwert / Heizwert:

Der Heizwert der Heizöl EL/n-Butanol-Gemische fällt mit steigendem n-Butanol-Gehalt und unterschreitet ab etwa 20 % n-Butanol die Minimalanforderung der DIN SPEC 51603-6 von 40 MJ kg^{-1} (siehe Abbildung 3-4).

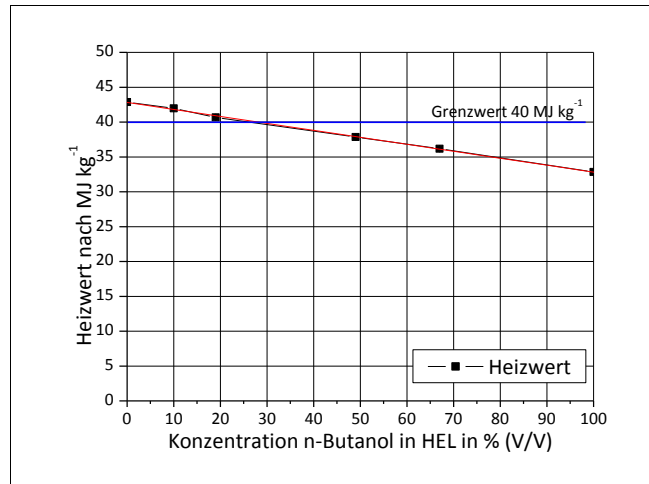


Abbildung 3-4: Heizwert von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration nach DIN 51900-2 ($r = 0,120 \text{ MJ kg}^{-1}$; angelehnt an DIN 51900-1, r für DIN 51900-2 noch nicht festgelegt)

4. Flammpunkt:

Der Flammpunkt der geprüften Heizöl EL/n-Butanol-Gemische fällt mit steigendem n-Butanol-Gehalt stark ab. Oberhalb einer n-Butanol-Konzentration von 1 % (V/V) wird der Grenzwert von 55°C unterschritten. Ab etwa 10 % (V/V) n-Butanol erreichen die Proben ein Niveau von etwa 38°C (siehe Abbildung 3-5).

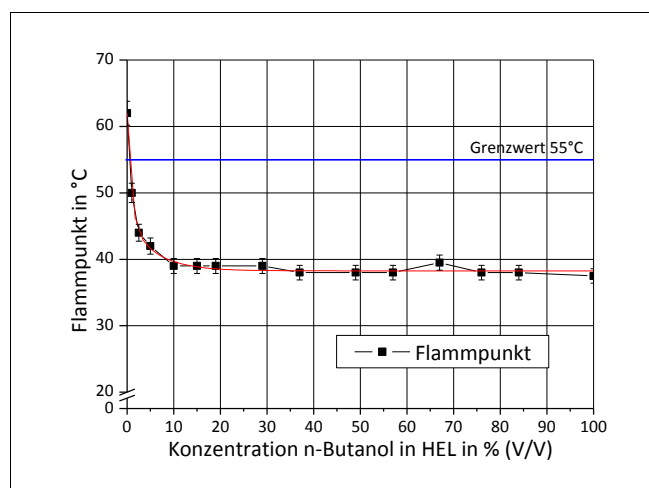


Abbildung 3-5: Flammpunkt von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration nach DIN EN ISO 2719 ($r = 1,2^\circ\text{C}$)

5. Kinematische Viskosität:

Die kinematische Viskosität der untersuchten Proben ändert sich nicht signifikant und liegt für alle Proben unterhalb der Maximalanforderung von $3,8 \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1}$ (siehe Abbildung 3-6).

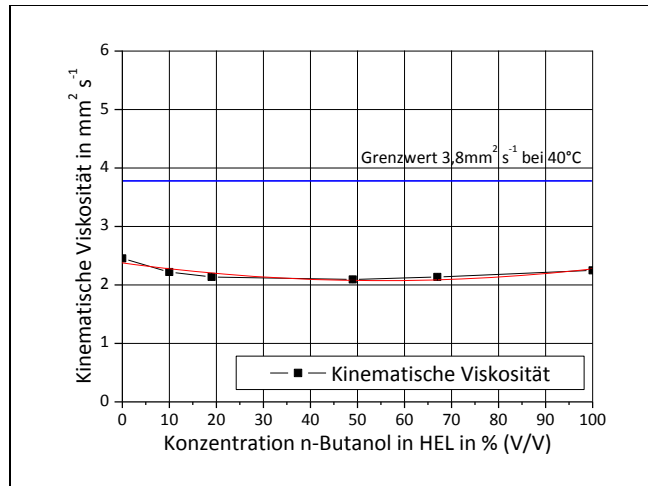


Abbildung 3-6: Kinematische Viskosität von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration nach DIN EN ISO 3104 ($r = 0,0138 \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1}$)

6. Destillationsverlauf:

Die nach DIN EN ISO 3405 ermittelten Analysewerte des Destillationsverlaufs wurden für n-Butanol-Konzentrationen bis 20 % (V/V) bestimmt. Mit steigendem n-Butanol-Gehalt steigen ebenfalls die verdampften Volumenanteile an. Diese Beobachtung gilt sowohl für den Test bei 250°C als auch für den Test bei 350°C . Für höhere n-Butanol-Konzentrationen lässt sich mit der Testmethodik kein Ergebnis ermitteln. Wie in Abbildung 3-7 zu sehen, erfüllen jedoch alle Gemische bis 20 % (V/V) die Anforderungen. Für Gemische höherer Konzentration kann davon ausgegangen werden, dass rasch der Maximalwert von 65 % (V/V) verdampftem Volumenanteil überschritten wird. Eine weitergehende Analyse des gesamten Destillationsverlaufes wurde nicht erstellt.

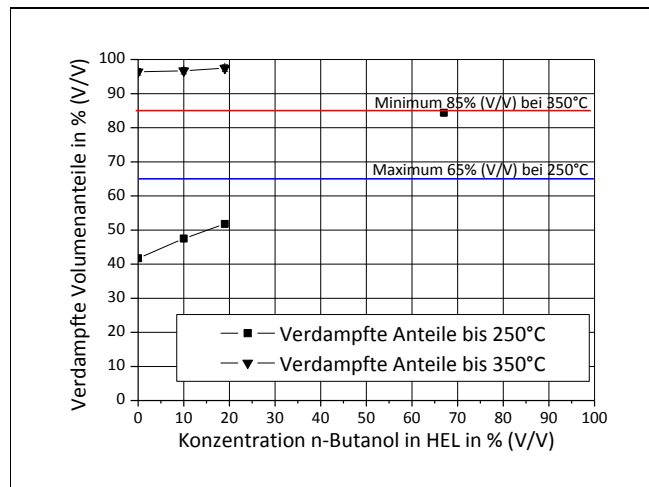


Abbildung 3-7: Verdampfte Volumenanteile von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen bei 250 und 350 °C in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration nach DIN EN ISO 3405 ($r \approx 0,94$ °C)

7. Temperaturgrenzwert der Filtrierbarkeit (CFPP):

Alle untersuchten Proben liegen bezüglich des CFPP unterhalb der Maximalanforderung von -12 °C und steigen mit zunehmendem n-Butanol-Gehalt leicht an. Für n-Butanol im Reineinsatz liegt der CFPP bei -51 °C (siehe Abbildung 3-8).

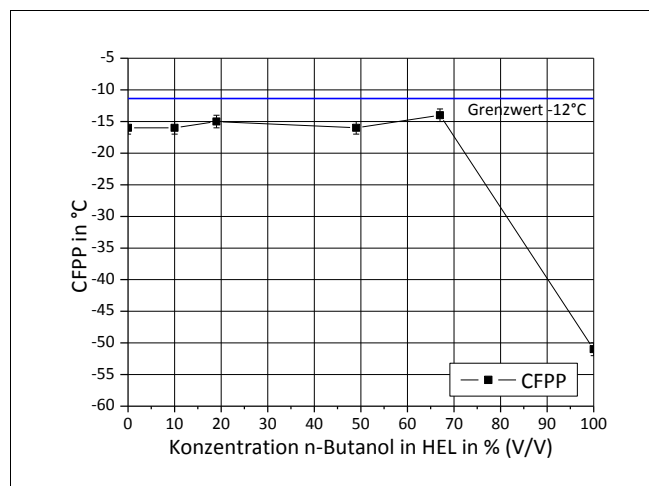


Abbildung 3-8: Cold Filter Plugging Point von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration nach DIN EN 116 ($r= 1$ °C)

8. Koksrückstand:

Alle untersuchten Proben liegen unterhalb des Maximalwertes. Das Niveau der Rückstände ändert sich mit steigendem n-Butanol-Gehalt nur geringfügig (siehe Abbildung 3-9).

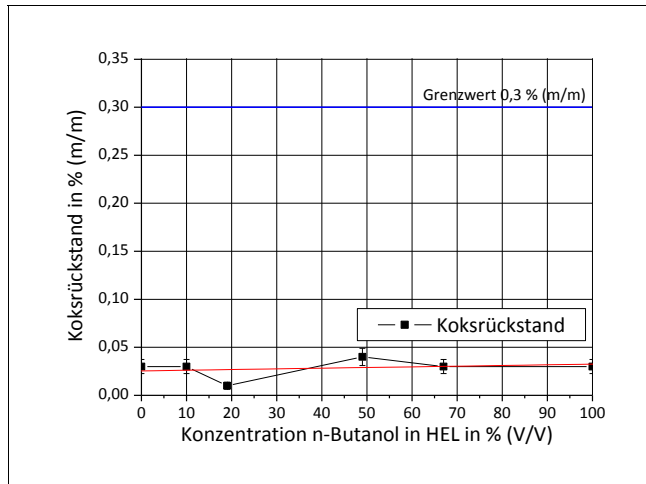


Abbildung 3-9: Koksrückstand von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration nach DIN EN ISO 10370 ($r = 0,0071 \text{ % (m/m)}$)

9. Wassergehalt:

Mit steigendem n-Butanol-Gehalt erhöht sich der Wassergehalt der Proben deutlich. Bis etwa 70 % (V/V) n-Butanol liegen alle Proben unterhalb der Maximalanforderung von 300 mg kg^{-1} . Die Probe mit 100 % (V/V) n-Butanol erfüllt diese Anforderung jedoch nicht (siehe Abbildung 3-10).

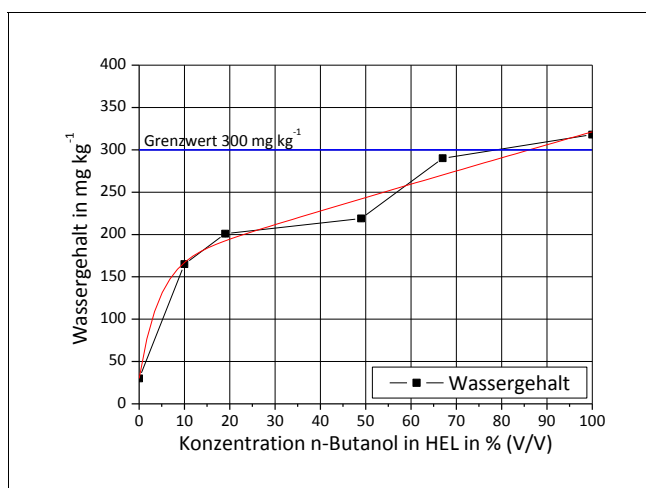


Abbildung 3-10: Wassergehalt von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration nach DIN EN ISO 12937 ($r = 0,26 \text{ mg kg}^{-1}$)

10. Thermische Stabilität:

Mit steigendem n-Butanol-Anteil erhöht sich die Sedimentmenge zunächst. Ab 20 % (V/V) n-Butanol liegt sie jedoch wieder auf dem Niveau reinen Heizöls EL. Alle geprüften Proben liegen unterhalb der Maximalanforderung der DIN SPEC 51603-6 von 140 mg kg^{-1} Sedimentanteil (siehe Abbildung 3-11).

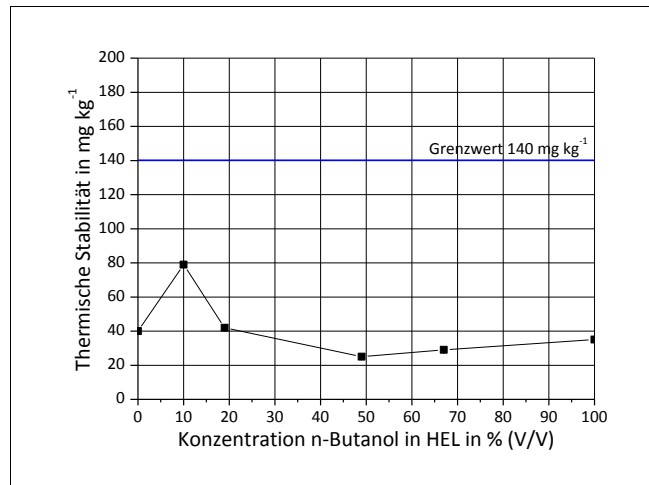


Abbildung 3-11: Thermische Stabilität von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration nach DIN 51371 (eine Vergleichbarkeit für die DIN 51371 wurde noch nicht ermittelt)

11. Schmierfähigkeit:

Die Schmierfähigkeit sinkt mit steigendem n-Butanol-Gehalt deutlich. Alle Proben bis 20 % (V/V) n-Butanol weisen eine Verschleißkalotte unterhalb des Grenzwertes von $460 \mu\text{m}$ (siehe Abbildung 3-12).

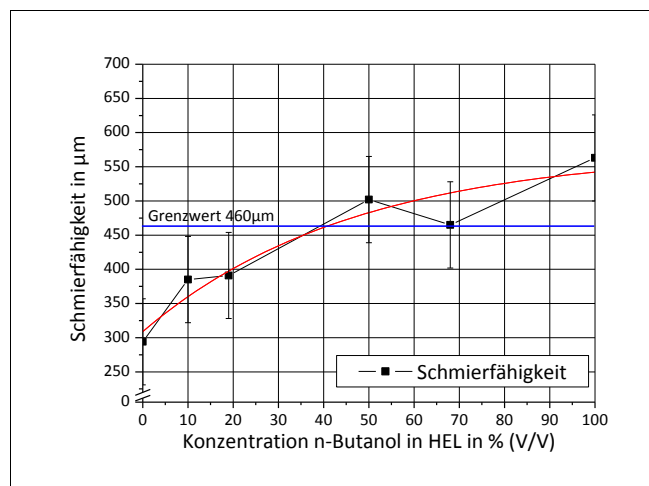


Abbildung 3-12: Schmierfähigkeit von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration nach DIN EN ISO 12156-1 ($r = 63 \mu\text{m}$)

12. Oxidationsstabilität:

Die Oxidationsstabilität der Proben nimmt mit zunehmendem n-Butanol-Gehalt zunächst ab. Bei 20 % (V/V) n-Butanol entspricht sie etwa der von Heizöl EL und steigt dann weiter an. Das getestete Heizöl EL weist auch im Reineinsatz eine eher geringe Stabilität von 2 h auf. Die Zugabe von n-Butanol beeinflusst diese nicht signifikant (siehe Abbildung 3-13).

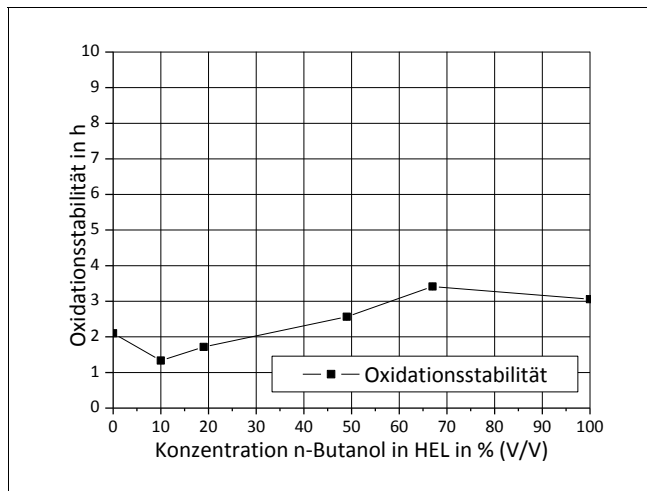


Abbildung 3-13: Oxidationsstabilität von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration nach ASTM D 7545-09 ($r = 0,053$ h; vorläufiger Wert)

3.1.4 Analyse und Bewertung der Ergebnisse

Die Parameterstudie liefert in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration hinsichtlich der Eignung von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen ein heterogenes Bild. Abbildung 3-14 stellt die Ergebnisse der Einzeluntersuchungen dar und gibt jeweils die n-Butanol-Konzentration an, bis zu der die Anforderung für jeden Parameter erfüllt ist.

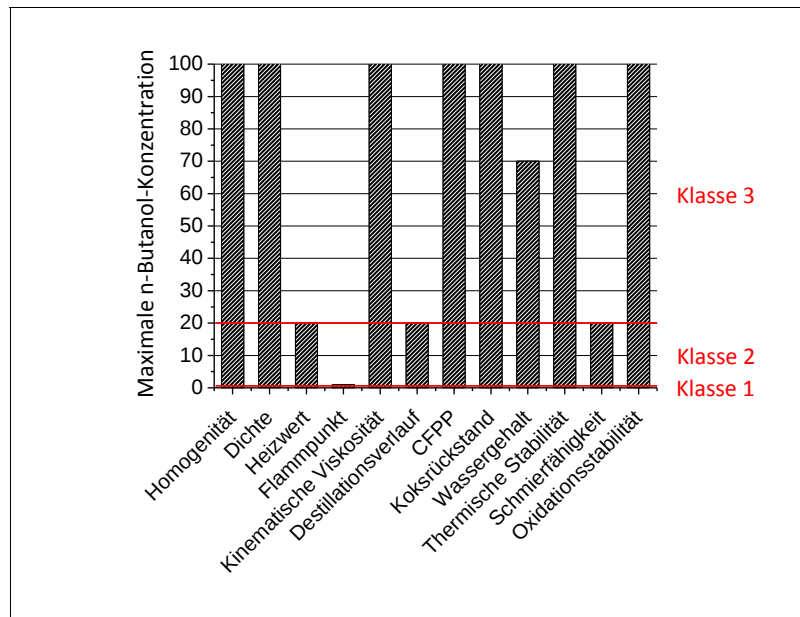


Abbildung 3-14: Erfüllung der Anforderungen an Heizöl EL/n-Butanol-Gemische in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration

Es ist zu erkennen, dass die Anzahl der erfüllten Parameter mit steigender n-Butanol-Konzentration abnimmt. Es lassen sich drei Klassen definieren:

- **Klasse 1: < 1 % (V/V) n-Butanol:**
Alle Normparameter werden erfüllt.
- **Klasse 2: 1 – 20 % (V/V) n-Butanol:**
Brennstoffgemische dieser Klasse erfüllen alle Anforderungen mit Ausnahme des Flammpunktes, der bei nur 39 °C liegt. Sie bedürfen damit besonderer Lagerungsbedingungen. Stehen geeignete Lagerungsmöglichkeiten für brennbare Flüssigkeiten zur Verfügung, sinkt damit die Anforderungen an den Flammpunkt. Technische Störungen im Betrieb mit Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen sind bis 20 % (V/V) nicht zu erwarten.
- **Klasse 3: >20 % (V/V) n-Butanol:**
Brennstoffgemische dieser Klasse stimmen in Bezug auf den Heizwert, Flammpunkt, Destillationsverlauf, Wassergehalt und Schmierfähigkeit nicht mit den Anforderungen überein. Über einer Konzentration von 20 % (V/V) n-Butanol lässt sich mit der eingesetzten Testmethodik kein belastbares Ergebnis ermitteln. Werden die Anfor-

derungen hinsichtlich des Destillationsverlaufs und der Schmierfähigkeit nicht erfüllt, kann es zu Einschränkungen in der Betriebssicherheit kommen. Der Destillationsverlauf ist durch raffinerienachgelagerte Prozesse praktisch nicht mehr zu beeinflussen. Die Schmierfähigkeit kann jedoch durch den Zusatz eines schmierfähigkeitsverbessernden Additivs oder durch Zumischung von Biodiesel verbessert werden. Biodiesel nach DIN EN 14214 hat eine Verschleißkalotte von unter $320\text{ }\mu\text{m}$ (HFFR). Bereits geringe Beimischungen verbessern die Schmierfähigkeit von Brennstoff-Gemischen daher deutlich (Muñoz, et al., 2011). Das Unterschreiten des Heizwertes stellt prinzipiell kein Risiko für die Betriebssicherheit dar, sondern äußert sich in erster Linie in einem erhöhten Verbrauch sowie Transport- und Lagervolumen. Ab 70 % (V/V) n-Butanol überschreitet der Wassergehalt des Brennstoffes die Anforderungen, was zu einer Beeinträchtigung der Lebensdauer von Ölfeuerungsanlagen durch Korrosion führen kann.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass Gemische der Klasse 1 als betriebssicher eingestuft werden können. Wie auch bei der Beimischung von n-Butanol in Diesel (vgl. hierzu: Thongchai et al. (2009)), bedürfen höhere Konzentrationen von n-Butanol in Heizöl EL besonderer Lagerbedingungen. Die Betriebssicherheit von Gemischen der Klasse 2 ist daher nur unter dieser Voraussetzung gegeben. Der Einsatz von Brennstoffen der Klasse 3 muss ohne Modifikationen am Brenner als kritisch beurteilt werden. Andernfalls ist von einer Verkürzung der Lebensdauer der Anlage auszugehen. Für die im zweiten Schritt geplante experimentelle Eignungsprüfung sind keine Modifikationen am Brenner vorgesehen. Daher ist die experimentelle Überprüfung der Einsetzbarkeit für Gemische der Klasse 2 beziehungsweise Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen bis zu einem n-Butanol-Gehalt von 20 % (V/V) sinnvoll.

3.2 Experimentelle Überprüfung von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen als Brennstoff

Ziel ist die experimentelle Überprüfung der Einsetzbarkeit von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen im Verbrennungsversuch. In der vorangegangenen Parameterstudie wurde die brennstoffspezifische Eignung anhand von Normanforderungen geprüft. Für Heizöl EL/n-Butanol-Gemische bis zu einer Konzentration von 20 % (V/V) n-Butanol wurden keine generellen Einschränkungen hinsichtlich der Betriebssicherheit für die Überprüfung im Ölbrennern. Aus den eingangs definierten Anforderungen an den Betrieb eines Ölbrenners werden zunächst die Untersuchungskriterien abgeleitet. Darauf aufbauend erfolgen die Planung und Konzeption der Versuchsreihe und Einzelversuche. Das Kapitel schließt mit der Auswertung der Versuchsergebnisse.

3.2.1 Planung der Versuchsreihe

3.2.1.1 Untersuchungskriterien an Heizöl EL/n-Butanol-Gemische in der experimentellen Überprüfung

Wie bereits in Kapitel 2.5 beschrieben, sind der Brennstoff Heizöl EL und das System Ölfeue-rungsanlage in einem jahrzehntelangen Prozess aufeinander angestimmt worden. In der Ein-leitung wurden zwei Anforderungen an den Einsatz von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen gestellt.

Zum einen darf die Emission von Schadstoffen durch den Einsatz nicht negativ beeinflusst werden. In den folgenden Versuchen werden daher die Emissionen von Schadstoffen im Ab-gas von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen im Vergleich zu reinem Heizöl EL untersucht. Im Einzelnen betrifft das den Gehalt an Stickoxiden (Untersuchungskriterium 1), den Gehalt an Kohlenstoffmonoxid (Untersuchungskriterium 2) und den Gehalt an Rußen im Abgas (Unter-suchungskriterium 3).

Zum anderen ergibt sich aus der Forderung nach einer hohen Betriebssicherheit des Ge-samtsystems die Überprüfung weiterer technischer Randbedingungen. Im Besonderen wer-den daher signifikante Auffälligkeiten wie Geräuschentwicklung, Zündung des Brenners, Korrosionserscheinungen und übermäßige Ablagerungsbildung im Brennraum untersucht (Untersuchungskriterium 4). Die Untersuchungskriterien eins bis drei lassen sich während der einzelnen Versuche untersuchen. Die Überprüfung des Untersuchungskriteriums vier findet nach Abschluss der Versuchsreihe und Zerlegung des Brenners statt. Ein Langzeitver-such wird nicht geplant.

3.2.1.2 Konzeption der Einzelversuche

Der erste Versuch untersucht das Brennverhalten innerhalb der erweiterten Betriebsgrenze. Hierzu wird bei einer Verbrennung mit konstantem n-Butanol-Gehalt die Luftzahl variiert. Der Versuch wird für verschiedene Heizöl EL/n-Butanol-Gemische wiederholt.

Während Heizöl EL keinen Sauerstoff enthält, bringt der Einsatz von n-Butanol Sauerstoff in die Verbrennung ein. Alle im Hausbrandbereich eingesetzten Brenner werden fest auf ein Luftverhältnis eingestellt. Sie stellen sich nicht auf unterschiedliche Sauerstoffgehalte im Brennstoff ein. Es ist anzunehmen, dass sich die Verbrennung in einem zu fetten Betriebs-punkt mit Brennstoffüberschuss durch einen steigenden n-Butanol-Gehalt verbessert und in einem mageren Betriebspunkt verschlechtert. Daher ist das Ziel des zweiten Versuches die Überprüfung des Verhaltens von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen, ausgehend von einem fest eingestellten eher mageren Betriebspunkt, wie er im Feld auftreten kann. Der Versuch wird für verschiedene n-Butanol-Konzentrationen durchgeführt.

Der Aufbau beider Versuche wird in den Kapiteln 3.2.2 und 3.2.3 ausführlich beschrieben. Die Untersuchung des Brenners und seiner Komponenten findet nach Abschluss des zweiten

Versuches statt. Die Ergebnisse aus beiden Versuchen und der Untersuchung der Brennerbauteile werden im Anschluss analysiert und bewertet.

3.2.1.3 Aufbau des Versuchsstandes

3.2.1.3.1 Experimenteller Aufbau

Dem experimentellen Aufbau beider Versuche vorangestellt ist zunächst die Klärung der Frage, wie eine möglichst hohe Umsetzbarkeit der Ergebnisse erreicht werden kann. Fast 93 % der im Jahr 2009 in Deutschland verbrauchten Heizölmenge entfielen auf die Nutzung in Haushalt, Gewerbe, Handel oder Dienstleistung (MWV, 2011). In diesem Bereich ist der Stauscheibenbrenner oder Gelbbrenner in mittleren und kleinen Feuerungsanlagen noch weit verbreitet im Einsatz (siehe Kapitel 2.2). Die Versuche werden daher auf einem handelsüblichen Stauscheibenbrenner durchgeführt.

In der experimentellen Untersuchung wird eine typische thermische Nenn-Wärmeleistung von 16 kW gewählt, wozu eine Düse des Typs Fluidics 0,4 60° HF bei einem Pumpendruck von 9,5 bar eingesetzt wird. Der Brenner verfügt unter anderem über die Möglichkeit, die Stellung der Luftklappe und der Stauscheibe im Flammrohr zu verändern. Es ist bekannt, dass die Umgebungsverhältnisse, insbesondere Windgeschwindigkeit und -richtung, Einfluss auf die Testergebnisse nehmen können. Durch die hohe Anzahl an Messpunkten können nicht alle Versuche innerhalb eines Tages durchgeführt werden. Es besteht daher die Möglichkeit, dass Ergebnisse durch wechselnde Bedingungen beeinflusst werden. Um dennoch eine möglichst hohe Vergleichbarkeit der Ergebnisse anzustreben, wird der Kaminzug durch den Einsatz eines Zuggebläses und Zugbegrenzers (siehe Abbildung 9-1 im Anhang) konstant gehalten. Zum Umschalten zwischen Brennstoffproben ist ein Dreiwegeventil montiert. Es erlaubt den unterbrechungsfreien Wechsel zwischen vorgemischten Brennstoffproben während des Betriebs. Eine Unterbrechung des Betriebs durch den Austausch der Brennstoffprobe würde nach kurzer Zeit zu einer Reduktion der Brennraumtemperatur führen und zu Einschränkungen hinsichtlich der Vergleichbarkeit der Testläufe führen.

3.2.1.3.2 Eingesetzte Messtechnik

Die in Kapitel 3.2.1.2 beschriebenen Emissionen können durch entsprechende Abgasmessgeräte bestimmt werden. Die Gehalte an Stickoxiden und Kohlenstoffmonoxid werden im Versuch durch ein Messgerät der Baureihe Testo 340 ermittelt. Der Gehalt an Rußen wird der DIN 51402-1 entsprechend durch eine Rußpumpe bestimmt. Die Abgasproben für beide Apparate werden während des laufenden Betriebs durch fest im Abgasstrom positionierte Sonden entnommen und unmittelbar ausgewertet. Die in Kapitel 3.2.1.1 abgeleiteten

Untersuchungskriterien werden lichtmikroskopisch oder durch Inaugenscheinnahme sowie akustisch überprüft.

3.2.1.3.3 Korrektur der Emissionsmesswerte

Die Messergebnisse sind im Folgenden in mg kWh^{-1} angegeben und um den verringerten Heizwert der n-Butanol-haltigen Proben korrigiert worden. Darüber hinaus fand eine Anpassung der Ergebnisse hinsichtlich des maximalen CO_2 -Gehaltes ($\text{CO}_{2 \text{ MAX}}$) im Abgas statt, der bei der Berechnung der Messwerte im Testgerät eine Rolle spielt. Die Korrektur ist notwendig, da das Testgerät nur die absolute Konzentration (ppm) im Abgas erfasst und auf dieser Basis eine Umrechnung in relative Werte (mg kWh^{-1}) vornimmt. Bei 20 % (V/V) n-Butanol-Gehalt beträgt der Korrekturfaktor +5 %. Die im Folgenden gezeigten Ergebnisse sind daher bereits um Heizwert und $\text{CO}_{2 \text{ MAX}}$ korrigiert. Die absoluten Emissionen liegen bei einem n-Butanol-Gehalt von 20 % (V/V) um etwa 5 % tiefer.

3.2.2 Versuch I: Prüfung des Verhaltens von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in verschiedenen Brennerbetriebspunkten mittels Luftzahlvariation

3.2.2.1 Planung des Versuches

Der Versuch überprüft das Verhalten von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der Luftzahl. Wie in Kapitel 3.2.1.2 definiert, besteht das Ziel in der Untersuchung des Brennverhaltens über einen möglichst breiten Bereich. Dazu sind Gemische folgender n-Butanol-Konzentrationen vorgesehen: 0 %, 10 %, 20 % (V/V). Daraus ergeben sich die Versuchsläufe 1, 2 und 3. Die Luftzahl eines Gelbbrenners liegt im Normbetriebsbereich üblicherweise zwischen 1,2 und 1,3. Über diesen Bereich hinaus werden nach Umstellung des Brennstoffes folgende sieben Stufen variiert: 1,1; 1,2; 1,25; 1,3; 1,4; 1,8; 2,2.

Vor Beginn des ersten Versuchslaufes wurde der Brenner installiert und Düse, Pumpe, Filter und Brennstoffleitungen erneuert. Der Pumpendruck wurde auf 9,5 bar angepasst, der Düsenstock für Heizöl EL eingestellt und die Funktionsfähigkeit der Anlage festgestellt. Um die Vergleichbarkeit der Messwerte zu erhöhen, finden alle Messungen in stationärem Zustand statt. Zu Beginn eines Versuchs steht daher eine Aufwärmphase des Brenners von etwa 120 Minuten. Die gewünschten Betriebspunkte werden während des laufenden Betriebs eingeregelt.

3.2.2.2 Beobachtungen und Ergebnisse

Die Beschreibung der Ergebnisse wird im Folgenden für alle drei Versuchsläufe aufgeführt:

- **Gehalt an Stickoxiden im Abgas:**

Die Ergebnisse aller Brennstoffproben wurden, wie in Kapitel 3.2.1.3.3 erläutert, korrigiert und zeigen einen ähnlichen Verlauf. Der NO_x -Gehalt steigt zunächst mit der Luftzahl an und erreicht zwischen 1,2 und 1,4 ein Maximum (Abbildung 3-18). Mit weiter ansteigender Luftzahl fällt der NO_x -Gehalt wieder ab. Die Probe mit 10 % (V/V) n-Butanol liegt durchgängig über der von reinem Heizöl EL, die ihrerseits durchgängig über der von 20 % (V/V) n-Butanol liegt. Für eine Luftzahl von 1,1 befinden sich sowohl reines Heizöl EL als auch die Probe mit 20 % (V/V) n-Butanol unterhalb der Maximalanforderung von 110 mg kWh^{-1} . Die Probe mit 10 % (V/V) n-Butanol unterschreitet auch im Rahmen der Messtoleranz die Maximalanforderung nicht. Für alle anderen Messpunkte liegt sie nicht signifikant über der von reinem Heizöl EL.

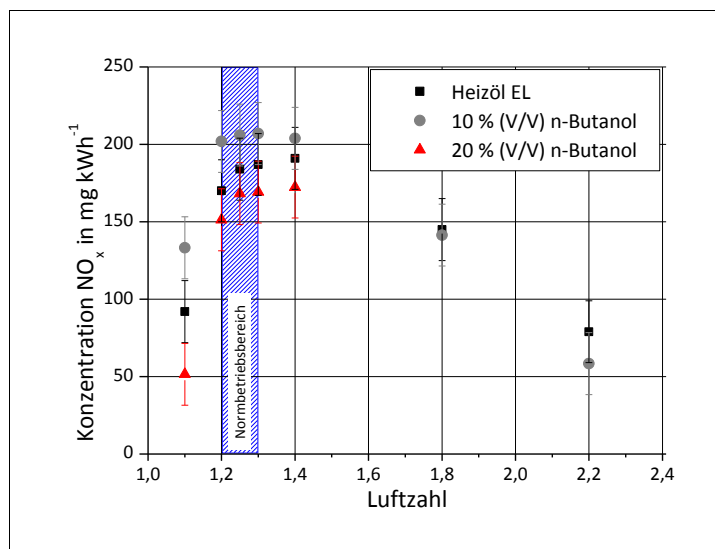


Abbildung 3-15: NO_x -Emissionen von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der Luftzahl. Die Messwerte sind für $\text{CO}_{2\text{MAX}}$ und Heizwert bezüglich der n-Butanol-Konzentration korrigiert ($r \approx 20 \text{ mg kWh}^{-1}$ beziehungsweise 10 ppm)

- **Gehalt an Kohlenstoffmonoxid im Abgas:**

Die CO-Emissionen aller drei Proben sinken mit ansteigender Luftzahl von zunächst über $2.000 \text{ mg kWh}^{-1}$ stark ab. Bei der Luftzahl 1,25 erreichen sie ein Minimum von 0 und steigen ab 1,4 wieder an (Abbildung 3-19). Im Rahmen der Messtoleranz unterscheiden sich die Messwerte im Bereich von 1,2 bis 1,4 nicht signifikant. Alle Proben weisen zwischen der Luftzahl 1,2 und 1,4 sehr niedrige Emissionen unterhalb von 10 mg kWh^{-1} auf. Für höhere Luftzahlen liegen keine Daten vor, da der Versuch durch das Auftreten von Fehlzündungen abgebrochen werden musste.

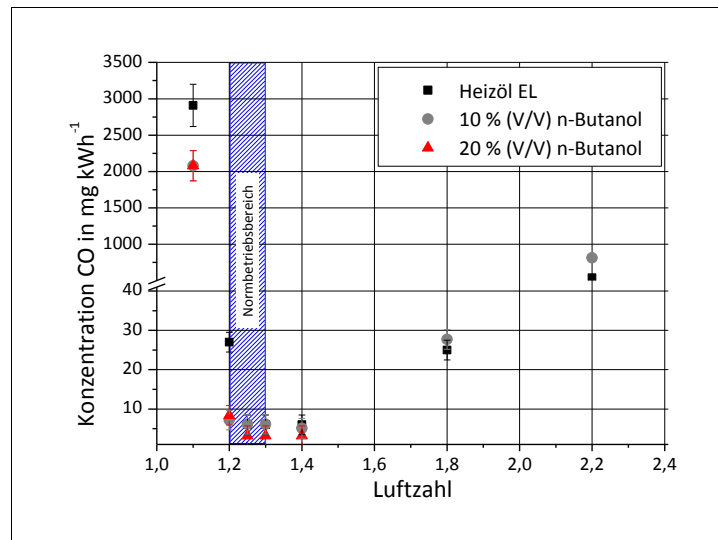


Abbildung 3-16: CO-Emissionen von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der Luftzahl. Die Messwerte sind für $\text{CO}_{2\text{MAX}}$ und Heizwert bezüglich der n-Butanol-Konzentration korrigiert ($r \approx 2,5 \text{ mg kWh}^{-1}$ beziehungsweise 2 ppm)

- **Rußemissionen im Abgas:**

Die Rußzahl des Abgases aller Brennstoffproben sinkt ausgehend von 1,1 mit steigender Luftzahl stark ab und erreicht bei 1,25 ein Minimum von 0. Ab 1,8 steigt die Rußzahl wieder an. Zwischen einer Luftzahl von 1,25 und 1,4 zeigen alle Proben sehr geringe Rußemissionen der Rußzahl 1 oder 0. Darüber hinaus liegen keine Daten vor, da der Versuch wie oben beschrieben abgebrochen werden musste.

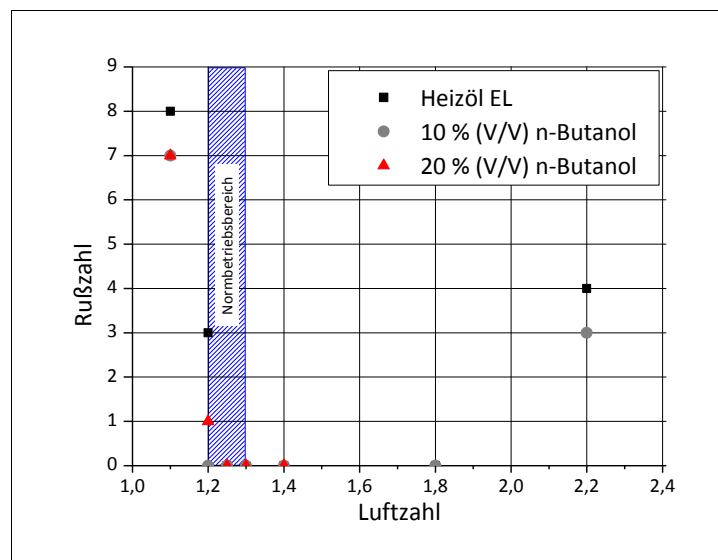


Abbildung 3-17: Rußemissionen von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der Luftzahl

- **Signifikante Auffälligkeiten:**

Während der Durchführung der Versuche 1 und 2 mit 0 % (V/V) beziehungsweise 10 % (V/V) n-Butanol-Gehalt wurden keine besonderen Vorkommnisse beobachtet. Versuchslauf 3 musste im Betriebspunkt Luftzahl 1,8 abgebrochen werden, da es zu Brennerausfällen kam. Ebenso wurde bei dieser Luftzahl eine erhöhte Geräuschentwicklung wahrgenommen. Eine Luftzahl von 1,8 liegt jedoch weit außerhalb des Normbetriebsbereiches und ist daher nicht praxisrelevant. Darüber hinaus wurden Brennstoffproben, die n-Butanol enthalten, olfaktorisch stärker wahrgenommen als die mit reinem Heizöl EL.

3.2.2.3 Ergebnisanalyse und Bewertung

Der Einsatz von n-Butanol als Biokomponente bis 20 % (V/V) ist im Betriebsbereich einer Luftzahl zwischen 1,1 und 1,4 ohne Modifikationen des Brenners ohne Ausfälle möglich. Prinzipiell begünstigt eine hohe Verbrennungstemperatur die Bildung von NO_x . Andererseits begünstigt sie die Oxidation und damit Verringerung von CO zu CO_2 . Die Verbrennungstemperatur nimmt durch den geringeren Energiegehalt mit steigendem n-Butanol-Anteil ab. Daher ist bei n-Butanol Gemischen im Vergleich zu reinem Heizöl EL ein Rückgang des NO_x -Gehaltes und der CO-Emissionen im Abgas zu erwarten.

Gleichzeitig tritt ein zweiter Effekt auf. Da n-Butanol 21,6 % (m/m) Sauerstoff enthält und der steigende Sauerstoffanteil die Bildung von NO_x und Oxidation von CO zu CO_2 fördert, wirken mit der Erhöhung des n-Butanol-Anteils im Brennstoff beide Effekte gegenläufig. Darüber hinaus erhöht der im Brennstoff enthaltene Stickstoff die NO_x -Emissionen des Abgases. Während der Stickstoffgehalt in Heizöl EL bis zu 50 mg kg^{-1} betragen kann, enthält n-Butanol praktisch keinen Stickstoff. Die Unterschiede zwischen Heizöl EL und den Heizöl EL/n-Butanol-Brennstoffproben im Verlauf der NO_x -, CO-Emissionen liegen jedoch überwiegend innerhalb der Messgenauigkeit.

Als ungewöhnlich hoch sind die NO_x -Emissionen der Probe 10 % (V/V) n-Butanol zu bewerten. Sie übersteigen die der Probe 20 % (V/V) n-Butanol in allen Messpunkten und die von reinem Heizöl EL für eine Luftzahl von 1,1. Sie entsprechen damit nicht der Erwartung. Eine Erklärung könnte ein Messfehler des NO_x -Sensors sein. Unter bestimmten Bedingungen kann ein kontinuierlicher Betrieb des NO_x -Sensors zu einer fehlerhaften Auswertung führen. Nach Rücksprache mit dem Hersteller kann es zur Absorption von NO_x in der Flüssigkeit der Kondensatfalle kommen. In diesem Fall tritt eine negative Abweichung der gemessenen Werte von den tatsächlichen auf. Auch wenn man diesen Effekt für die anderen Messreihen unterstellt, ist die Abweichung zwischen den Proben durch diesen Effekt nicht zu erklären (Testo AG, 2011).

Möglicherweise tragen lokal hohe Brennraumtemperaturen sowie der zusätzliche Sauerstoff im Brennstoffgemisch zu einer Erhöhung der NO_x -Emissionen bei. Diese Effekte könnten in Gegenüberstellung zu den Ergebnissen der Probe mit 20 % (V/V) n-Butanol die

geringere Brennraumtemperatur durch einen geringeren Heizwertes noch überkompensieren.

Eine wahrscheinlichere Ursache liegt jedoch in der bestehenden Einschränkung der Wiederholbarkeit in der Versuchspraxis. Insbesondere die Präzision der Luftzahleinstellung kann durch Umwelteinflüsse über mehrere Versuchstage schwanken. Gerade in den steilen Randzonen des Testbereiches kann dies zu erheblichen Ungenauigkeiten führen. Die hohen NO_x -Emissionen der Brennstoffprobe 10 % (V/V) n-Butanol-Gehalt liegen daher vermutlich in einer systematischen Abweichung, die nicht näher spezifiziert werden kann. Um eine abschließende Aussage zur Relevanz der Ergebnisse der Probe 10 % (V/V) n-Butanol machen zu können, sind weitere Versuche notwendig.

Die Interpretation der Ergebnisse ist jedoch insbesondere für den Normbetriebsbereich von Stauscheibenbrennern bei einer Luftzahl zwischen 1,2 und 1,3 relevant. Lässt man die Ergebnisse der Brennstoffprobe mit 10 % (V/V) n-Butanol aufgrund einer zu vermutenden systematischen Abweichung außen vor, so liegen alle Emissionen der Probe 20 % (V/V) innerhalb des Normbetriebsbereiches deutlich unterhalb derer von Heizöl EL. Der Einsatz von Heizöl EL bis zu 20 % (V/V) n-Butanol auf handelsüblichen Stauscheibenbrennern ist gerätetechnisch daher grundsätzlich positiv zu bewerten.

3.2.3 Versuch II: Prüfung des Verhaltens von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen im Magerbetrieb

3.2.3.1 Planung des Versuches

Im zweiten Versuch wird der Einfluss von n-Butanol im Brennstoff auf den Brennerbetrieb in einem Betriebspunkt im oberen Teil des Normbetriebsbereiches überprüft. Während im ersten Versuch die Luftzahl nach Anpassung der n-Butanol-Konzentrationen variiert wurde, wird im zweiten Versuch ein fester Betriebspunkt gewählt und ausschließlich die Konzentration an n-Butanol variiert. Dafür wird ein Betriebspunkt mit einer Luftzahl von 1,25 ausgewählt. Das hat zur Folge, dass mit steigendem n-Butanol-Anteil die für die Verbrennung zur Verfügung stehende Sauerstoffmenge weiter erhöht wird. Es ist hervorzuheben, dass im Gegensatz zum ersten Versuch keine Anpassung des Brenners stattfindet. Der zweite Versuch bildet daher den Einsatz von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen unter Feldbedingungen ab. Die n-Butanol-Konzentration der Brennstoffproben wird stufenweise über 0 %, 1 %, 2,5 %, 5 %, 10 %, 15 % bis auf 20 % (V/V) erhöht.

Es sind drei Versuchsläufe geplant. Die Proben werden in den ersten beiden Versuchsläufen zunächst in aufsteigender n-Butanol-Konzentration angeordnet. Im ersten Versuchslauf wird wie beschrieben keine Anpassung der Luftzahl vorgenommen. Im zweiten Versuchslauf wird die Luftzahl konstant auf 1,25 geregelt. Unterschiede im Ergebnis dieses und des ersten Versuchslaufs wären dann auf den zusätzlichen Sauerstoff im Brennstoff zurückzuführen.

Beim Wechsel zwischen Brennstoffproben sind zum Zeitpunkt des Umschaltens die Brennstoffleitungen und der Filter noch mit dem vorherigen Brennstoff gefüllt. Um Einflüsse durch Vermischen von Brennstoffproben auszuschließen, wiederholt der dritte Versuchslauf den ersten in zufälliger Probenanordnung (siehe Tabelle 3-1). Alle Messungen finden im stationären Zustand statt. Zu Beginn jedes Versuchslaufs steht eine Aufwärmphase des Brenners von etwa 120 Minuten. Messungen einer neuen Brennstoffprobe finden erst nach 45 Minuten stationärem Betrieb mit statt.

Tabelle 3-1: Parameter der zweiten Versuchsreihe

Versuchslauf	Reihenfolge der Proben	Luftzahl
1.	0 %, 1 %, 2,5 %, 5 %, 10 %, 15 % und 20 % (V/V)	Voreinstellung 1,25; keine weiteren Anpassungen
2.	0 %, 1 %, 2,5 %, 5 %, 10 %, 15 % und 20 % (V/V)	Konstante Regelung auf 1,25
3.	0 %, 20 %, 1 %, 15 %, 2,5 %, 10 %, und 5 % (V/V)	Voreinstellung 1,25; keine weiteren Anpassungen

3.2.3.2 Beobachtungen und Ergebnisse

Während der Durchführung des gesamten zweiten Versuches wurde keine Abweichung vom Normbetrieb beobachtet. Die Beschreibung erfolgt im Folgenden für alle drei Versuchsläufe gemeinsam:

- **Gehalt an Stickoxiden im Abgas:**

Die NO_x -Emissionen aller Proben verändern sich durch die Zugaben von n-Butanol kaum. Im Fall von reinem Heizöl EL und geringer n-Butanol-Konzentration betragen die relativen Emissionen etwa 200 mg kWh^{-1} . Mit steigendem n-Butanol-Anteil ist ein minimaler Rückgang zu erkennen. Bezogen auf den geringeren Energiegehalt verändern sich die NO_x -Emissionen jedoch bis zu einer Zumischung von 20 % (V/V) nicht signifikant (siehe Abbildung 3-19).

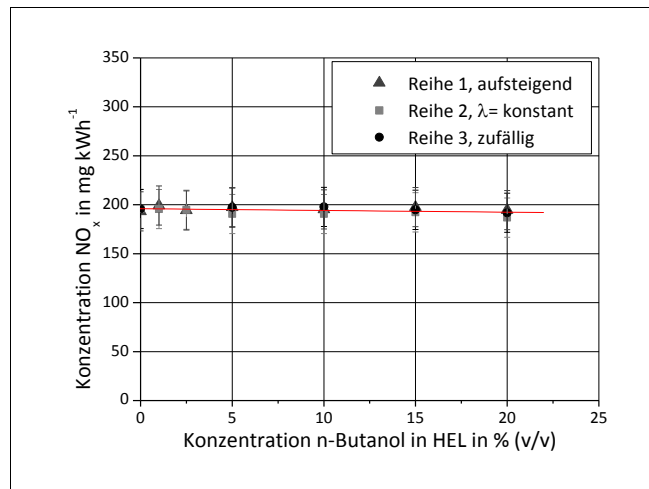


Abbildung 3-18: NO_x-Emissionen von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration ($r \approx 20 \text{ mg kWh}^{-1}$ beziehungsweise 10 ppm)

- Gehalt an Kohlenstoffmonoxid im Abgas:

Wie in Abbildung 3-19 zu sehen, beeinflusst ein steigender n-Butanol-Gehalt die anhand des CO-Gehalts im Abgas ermittelte Verbrennungsgüte nicht signifikant. Der durch den steigenden Sauerstoffanteil im Brennstoff leicht verringerte CO-Gehalt liegt im Rahmen der Messtoleranz. Dies gilt auch unter Berücksichtigung des geringeren Energiegehaltes von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen im Vergleich zu reinem Heizöl EL.

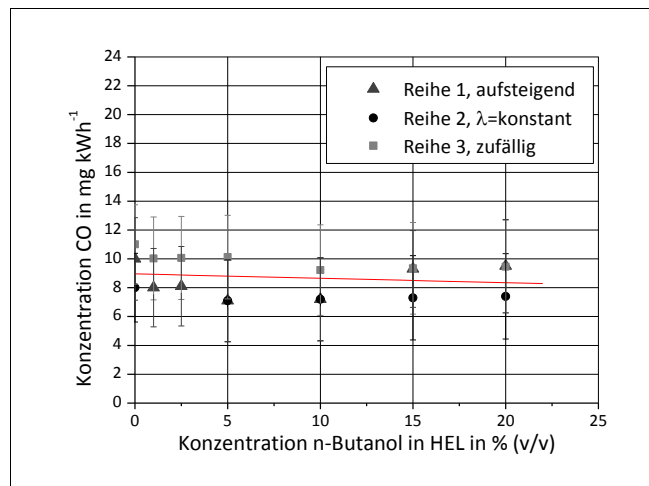


Abbildung 3-19: CO-Emissionen von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen in Abhängigkeit der n-Butanol-Konzentration ($r \approx 3 \text{ mg kWh}^{-1}$ beziehungsweise 2 ppm)

- Rußemissionen im Abgas:

Alle getesteten Abgasproben weisen einen mittels DIN 51402-1 nicht festzustellenden Gehalt an Rußemissionen auf (Rußzahl 0).

- **Signifikante Auffälligkeiten:**

Die olfaktorische Wahrnehmung von n-Butanol-haltigen Brennstoffproben ist stärker als die von reinem Heizöl EL.

3.2.3.3 Ergebnisanalyse und Bewertung

Die korrigierten Messungen des zweiten Versuchs zeigen ein homogeneres Bild als die des ersten. Die NO_x -, CO- und Rußemissionen der n-Butanol-haltigen Proben weichen ohne eine Anpassung des Brenners im Rahmen der Messgenauigkeit nicht von den Ergebnissen der Probe mit reinem Heizöl EL ab. Der zweite Versuch bestätigt daher die grundsätzliche verbrennungstechnische Einsetzbarkeit von n-Butanol als Biokomponente für Heizöl EL bis 20 % (V/V).

Während keine messbaren Rußemissionen entstanden, nehmen die Emissionen von NO_x und CO mit steigendem n-Butanol-Anteil tendenziell, jedoch nicht signifikant, ab. Der Rückgang des NO_x -Gehaltes im Abgas kann durch eine geringere Verbrennungstemperatur erklärt werden, ist jedoch nicht signifikant. Es kann davon ausgegangen werden, dass die Ursache der im Vergleich zu Heizöl um 5 % geringere Heizwert von 34 MJ L^{-1} ist. Eine geringere Verbrennungstemperatur im Brennraum verursacht üblicherweise einen Anstieg der CO-Emissionen. Dass dieser Effekt mit steigendem n-Butanol-Anteil nicht auftritt, sondern ein tendenzieller Rückgang zu verzeichnen ist, lässt auf den oxidierenden Einfluss des Sauerstoffanteils im Brennstoff schließen.

3.3 Einsetzbarkeit von n-Butanol als Biokomponente in Heizöl EL

In der Einleitung des Kapitels werden folgende zwei Merkmale für die technische Überprüfung von n-Butanol als Biokomponente für Heizöl EL definiert:

- Keine Erhöhung der Abgasemissionen von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen im Vergleich zu Heizöl EL
- Gewährleistung der Betriebssicherheit des Einsatzes von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen

Die Emissionen im Abgas eines nicht modifizierten Brenners in Standardeinstellung verschlechtern sich bis 20 % (V/V) n-Butanol weder absolut noch relativ zum Heizwert. Dies gilt sowohl für die NO_x -, CO- als auch für die Rußemissionen. Der Betrieb eines Stauscheibenbrenners mit Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen bis 20 % (V/V) ist grundsätzlich als sicher einzustufen.

Für die Lagerung des Brennstoffs gelten jedoch Einschränkungen. Der Flammpunkt von Heizöl EL muss mindestens 55°C betragen. Bereits Unterhalb von 1 % (V/V) n-Butanol-

Gehalt unterschreiten Heizöl EL/n-Butanol-Gemische diesen Grenzwert. Sie gelten damit als entzündliche Flüssigkeit, für die höhere Sicherheitsauflagen gelten. Diese Einschränkung gilt in gleicher Form für den Einsatz von n-Butanol als Beimischung zu Diesel (Thongchai, et al., 2009).

In einem von der Versuchsreihe unabhängigen Versuch wurde ein weiterer Parameter-test durchgeführt. Die Untersuchung ergab, dass der Flammpunkt von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen mit einer Konzentration von 0,5 % (V/V) n-Butanol durch die Beimischung von 10 % (V/V) FAME auf über 55 °C gesteigert werden kann und damit flächendeckend einsetzbar ist. Für die Realisierung höherer Anteile an n-Butanol besteht noch Forschungsbedarf.

Nach Abschluss aller Versuche wurden die eingesetzten Komponenten wie Düse, Pumpe, Filter und Brennstoffleitungen zerlegt und in Augenschein genommen. Dabei wurden weder Korrosion, Aufquellen von Dichtungen oder Filtergewebe noch erhöhter Verschleiß beobachtet. Auch wenn der Einsatz von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen keine Einschränkungen verursacht, bedarf eine abschließende Aussage zur Einsetzbarkeit jedoch einer Langzeituntersuchung. Diese ist nicht Gegenstand dieser Arbeit.

Für n-Butanol als Biokomponenten in Heizöl EL ergeben sich daher potentiell zwei mögliche Einsatzarten. Zum einen kann eine flächendeckende Beimischung von 0,5 % (V/V) n-Butanol in Bioheizöl mit 10 % (V/V) FAME-Anteil sinnvoll sein. Zum anderen können auch höhere Konzentrationen bis 20 % (V/V) n-Butanol-Gehalt ohne Modifikation des Ölbrenners eingesetzt werden. Dafür muss jedoch eine geeignete Lagerungsmöglichkeit für entzündliche Brennstoffe vorliegen. Dies ist in vielen Industrieanlagen der Fall.

4 Erarbeitung eines Stoff- und Energiestrommodells zur Herstellung von n-Butanol

Wie im vorherigen Kapitel gezeigt wurde, eignet sich n-Butanol als Brennstoff für die bestehende Ölbrennerinfrastruktur. Ziel des vorliegenden Kapitels ist die Abbildung einer Prozesskette zur Produktion von n-Butanol aus Reststroh im Modell. Nachfolgend werden daher zunächst mögliche produktions- und ingenieurwissenschaftliche Modellierungsansätze dargestellt und auf ihre Eignung zur Abbildung des Produktionssystems überprüft. Anschließend wird eine Systemabgrenzung vorgenommen und der identifizierte Ansatz auf das zu untersuchende Produktionssystem übertragen. Zur Produktion von n-Butanol wird eine geeignete Prozesskette in Form einer Modellanlage identifiziert und auf den entwickelten Ansatz übertragen. Grundlage der Auslegung ist der Einsatz aktuell verfügbarer und etablierter Technologien, die im Folgenden als Basisszenario bezeichnet wird. Aufbauend auf den identifizierten Stoffströmen des Basisszenarios folgt die Abschätzung der Energieströme.

4.1 Methodisches Vorgehen der Stoff- und Energiestrommodellierung

4.1.1 Produktionstheoretische und ingenieurwissenschaftliche Ansätze zur Modellierung von Produktionssystemen

Modelle eignen sich dazu, reale Fragestellungen durch Abstraktion eines stoffstrombasierten Produktionssystems und seiner konkreten quantitativen Beziehungen zu lösen (Weiten, 2009). In der Praxis werden die Begriffe System und Modell vielfach missverständlich eingesetzt (Unbehauen, 1983). Unter dem Begriff *System* versteht man „eine räumlich abgeschlossene, logisch zusammengehörende und zeitlich begrenzte Einheit“ (Weiten, 2009). Kennzeichen eines Systems ist ein hoher Grad an Komplexität, die eine vollständige Beschreibung meist nicht zulässt. Ein System besitzt Merkmale und Funktionalitäten, durch die die Realität abstrahiert wird. Ein *Modell* bildet nur die wichtigsten Merkmale und Funktionalitäten eines Systems ab und stellt damit eine weitere Abstraktion dar. Die damit einhergehende Vereinfachung ist immer zielorientiert und Abhängig vom Einsatzzweck (Van Gigh, 1991). Ein Modell eines Systems ist daher in der Regel nicht eindeutig (Marquardt, 1995). Darüber hinaus können aus einem Modell weitere Modelle abgeleitet werden (Schwarze, 1990).

In der Modellbildung unterscheidet man deduktive und induktive Modellierung. Die deduktive Modellierung basiert auf naturwissenschaftlichen Grundmodellen, deren innere Systemzustände bekannt sind. Die induktive Modellierung stützt sich auf Beobachtungen von

Prozessen, die anschließend in mathematische Zusammenhänge überführt werden (Weiten, 2009). Bei der folgenden Modellierung handelt es sich um einen induktiven Ansatz.

Zur formalen Beschreibung von Stoffflussbeziehungen innerhalb eines Produktionssystems steht eine Vielzahl von Ansätzen zur Verfügung. Diese lassen sich in die Klassen produktionstheoretische und ingenieurwissenschaftliche Ansätze gliedern. Zu den produktionstheoretischen Ansätzen gehören mikroökonomische Produktionsfunktionen, die Input-Output-Analyse und die Aktivitätsanalyse. Produktionstheoretische Ansätze zählen zu den empirischen Theorien, da sie Produktionsmodelle deskriptiv auf Basis von Beobachtungen entwickeln (Matthes, 1996).

Zu den ingenieurwissenschaftlichen Ansätzen zählen neben der Modellierung mittels physikalisch-chemischer Gesetzmäßigkeiten die Modellierung auf Basis von Material- und Energiebilanzen sowie Flowsheeting-Modelle¹⁵. Ingenieurwissenschaftliche Ansätze bilden Produktionssysteme meist mit hohem Detaillierungsgrad ab (Mirschel, et al., 2003) und unterscheiden sich von den produktionstechnischen Ansätzen durch eine stärkere Berücksichtigung verfahrenstechnischer Aspekte des Transformationsprozesses. Im Folgenden werden die verschiedenen Ansätze vorgestellt und im Hinblick auf ihre Eignung zur Abbildung des untersuchten Produktionssystems diskutiert. Folgende Anforderungen sind zu erfüllen:

- Problemadäquate Abbildung von mehrstufigen Prozessen beziehungsweise Prozessstufen
- Erfassung von Stoff- und Energieströmen zwischen Prozessstufen
- Berücksichtigung verschiedener Betriebszustände
- Berücksichtigung von technologischem Fortschritt

4.1.1.1 Produktions- und Transformationsfunktionen

Produktionsfunktionen bilden die Abhängigkeit zwischen Faktoreinsatz und Faktorertrag eines Produktionssystems ab. Sie eignen sich sowohl zur Modellierung mikroökonomischer als auch makroökonomischer Systeme (Wannenwetsch, 2002). Überträgt man das Konzept der mikroökonomischen Produktionsfunktionen auf einzelne Prozesse eines Produktionssystems, spricht man von Transformationsfunktionen (vgl. hierzu: Hoitsch (1993) und Küpper (1977)). Produktionsfunktionen lassen sich nach verschiedenen Kriterien klassifizieren (vgl. hierzu: Wannenwetsch (2002) und Schultmann (2003)). Eine erste Charakterisierung erfolgt im Folgenden anhand der unabhängigen Variablen der Produktionsfunktionen (vgl. hierzu: Küpper (1977)). Abbildung 4-1 zeigt eine Übersicht mikroökonomischer Produktionsfunktionen. Im Folgenden werden die einzelnen Funktionstypen im Hinblick auf die Zielsetzung dieser Arbeit diskutiert.

¹⁵ Rechnergestützte Prozesssimulation

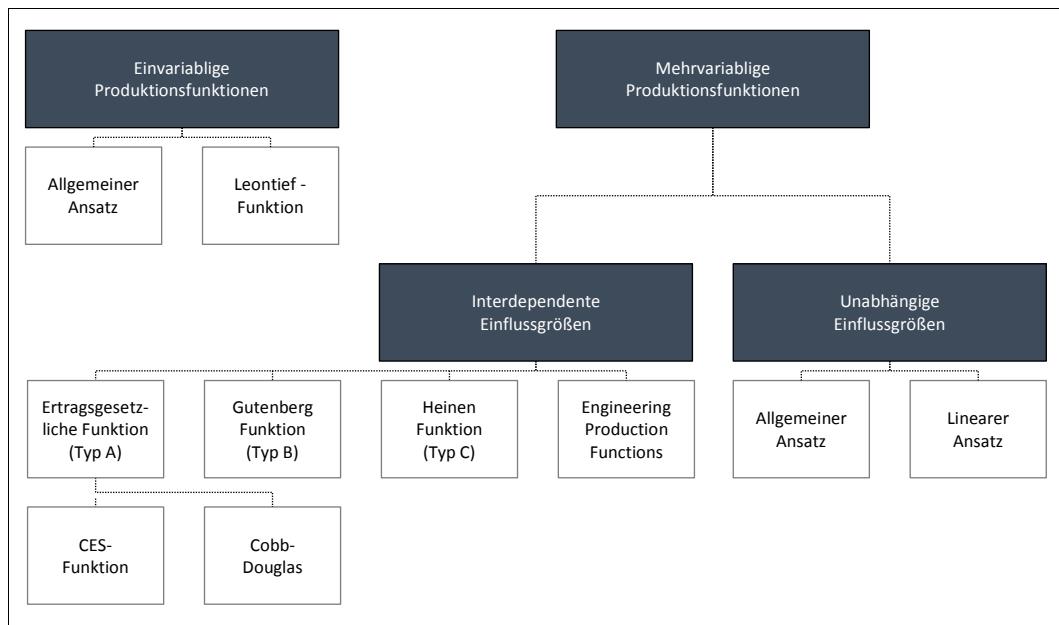


Abbildung 4-1: Übersicht mikroökonomischer Produktionsfunktionen (in Anlehnung an Küpper (1977) und Schultmann (2003))

Einvariablige Produktionsfunktionen

In der Gruppe der einvariablen Produktionsfunktionen wird die Einsatzmenge (r_{ij}), die den Input der Art $i \in \mathbb{R}_+$ zur Erzeugung des Outputs der Art $j \in \mathbb{R}_+$ darstellt, von der Ausbringungsmenge (r_j) in folgender Form determiniert:

Gleichung 4.1

$$r_{ij} = f_{ij}(r_j) \cdot r_j$$

mit:

r_{ij} Einsatzmenge

f_{ij} Funktionaler Zusammenhang

r_j Ausbringungsmenge

Besteht eine proportionale Beziehung zwischen beiden Größen in der Art, dass $f_{ij}(r_j) = a_{ij} = \text{konstant}$ ist, liegt eine Leontief-Funktion vor (Küpper, 1977). Einvariablige Produktionsfunktionen eignen sich jedoch nicht zur Abbildung der zu untersuchenden Prozesskette. Neben der begrenzten praktischen Übertragbarkeit dieses Ansatzes bestehen Einschränkungen durch die nicht zulässige Variabilität und Substituierbarkeit von Einsatzmengen (Rentz, et al., 2006).

Mehrvariablige Produktionsfunktionen unabhängiger Einflussfaktoren

Beeinflussen neben der Ausbringungsmenge weitere Faktoren den Faktoreinsatz, liegt eine mehrvariablige Produktionsfunktion vor. Sind die Faktoren unabhängig, besteht eine additive Funktion folgender Art (Küpper, 1977):

Gleichung 4.2

$$r_{ij} = f_{ij}(r_j) \cdot r_j + g_{ij}^1(e_j^1) \cdot e_j^1 + \dots + g_{ij}^n(e_j^n) \cdot e_j^n + c_{ij}$$

mit:

r_{ij}	Einsatzmenge	f_{ij}	Funktionaler Zusammenhang
r_j	Ausbringungsmenge	g_{ij}	Funktionaler Zusammenhang
e_j	Einflussgröße		

Liegt der Spezialfall proportionaler Abhängigkeit von Ausbringungsmenge und Einsatzmenge vor, handelt es sich um einen linearen Ansatz¹⁶. Einsatzmöglichkeiten derartiger Funktionen ergeben sich in der Realität in der Abbildung von Montage- und Demontagesystemen (Spengler, 1998). Gerade in der Prozesstechnologie kann jedoch überwiegend davon ausgegangen werden, dass die Einsatzfaktoren eine Interdependenz aufweisen. Produktionsfunktionen unabhängiger Einflussfaktoren lassen sich daher nicht zur Modellierung dieser Produktionssysteme heranziehen.

Mehrvariablige Produktionsfunktionen abhängiger Einflussfaktoren

Zur Abbildung interdependenter Einflussgrößen steht eine weitere Gruppe mehrvariabliher Produktionsfunktionen zur Verfügung. Grundsätzlich lassen sich substitutionale (*Typ A*) und limitationale (*Typ B*) Funktionen unterscheiden. Alle weiteren Funktionen erweitern beziehungsweise kombinieren diese Elemente (Schultmann, 2003). Die Abhängigkeiten zwischen Einsatzmengen r_{ij} und Ausbringungsmenge r_j lassen sich wie folgt darstellen (Küpper, 1977):

Gleichung 4.3

$$r_{ij} = f_{ij}\left(1, \frac{r_{1j}}{r_j}, \dots, \frac{r_{nj}}{r_j}\right) \cdot r_j$$

mit:

r_{ij}	Einsatzmenge	f_{ij}	Funktionaler Zusammenhang
r_j	Ausbringungsmenge		

Mit Hilfe des Ertragsgesetzes als bekanntem Vertreter des Typs A wurde von Turgot im 18. Jahrhundert erstmals die Beziehung zwischen den Einsatzfaktoren und dem Ernteertrag eines Ackers abgebildet (Ellinger, et al., 1996). Sie wird daher auch klassische Produktionsfunktion genannt und besitzt einen S-förmigen Verlauf, der durch zunächst steigende, dann sinkende Grenzerträge gekennzeichnet ist (Wannenwetsch, 2002). Zwar weisen auch einige Industrieprozesse einen substitutionalen Charakter auf. Jedoch eignet sich das Ertragsgesetz

¹⁶ siehe dazu auch Leontief-Funktion für einvariablige Produktionsfunktionen.

durch die Annahmen steigender Grenzerträge nur sehr bedingt zu deren Abbildung (Schultmann, 2003).

Weitere Vertreter dieser Gruppe sind die CES-Funktion und die Cobb-Douglas-Funktion. Beide Funktionen sind neoklassische Sonderfälle des Ertragsgesetzes. Für beide gelten daher die gleichen Einschränkungen, jedoch mit dem Unterschied abnehmender Grenzerträge über den Produktionsverlauf (Fandel, 1996). Exemplarisch lässt sich der funktionale Zusammenhang zwischen Ein- und Ausbringungsmenge der Cobb-Douglas-Funktion für den Fall zweier Produktionsfaktoren wie folgt beschreiben (Küpper, 1977):

Gleichung 4.4

$$r_{ij} = a \cdot r_{1j}^{\alpha} \cdot r_{2j}^{\beta}$$

mit:

r_{ij}	Einsatzmenge	a	Faktor Fortschritt
r_{1j}	Produktionsfaktor	r_{2j}	Produktionsfaktor
α	Produktionselastizität	β	Produktionselastizität

Im Unterschied dazu verfolgt die Gutenberg-Funktion als Vertreter des Typs B einen limitationalen Ansatz, bei dem sich ein Produktionsfaktor nicht mehr durch einen anderen substituieren lässt. Dadurch unterscheidet sie sich in ihrem Aufbau von den bisher diskutierten Funktionen maßgeblich. Gutenberg berücksichtigt mit diesem Ansatz industrielle Produktionsprozesse damit deutlich stärker. Er gibt das Konzept der unmittelbaren Beziehung zwischen Einsatzmenge und Ausbringungsmenge auf und trifft eine Unterscheidung nach Gebrauchs- und Verbrauchsfaktoren. Zu den Gebrauchs Faktoren zählen exemplarisch Maschinen und Ausrüstung, zu den Verbrauchsfaktoren Roh-, Hilfs- und Betriebsstoffe. Der Faktoreinsatz hängt somit nicht mehr direkt vom Faktorsertrag ab, sondern wird von den Gebrauchs Faktoren und deren Eigenschaften bestimmt.

Dazu weist Gutenberg allen Gebrauchs Faktoren eine spezifische sogenannte z-Situation zur Beschreibung zu, die die Eigenschaften des Betriebsmittels beschreibt und kurzfristig konstant ist. Weiterhin berücksichtigt er die Einsatzzeit, die zur Produktion eines Gutes aufgebracht werden muss (Schultmann, 2003). Durch die technische Orientierung ist die empirische Geltung der Gutenberg-Funktion als deutlich höher einzustufen als die der bisher diskutierten Produktionsfunktionen. Anlass zur Kritik bietet die angenommene Konstanz der z-Situation. Die betriebliche Praxis erfordert häufig die gezielte Anpassung von Parametern auf die Produktions- beziehungsweise Umweltverhältnisse (Schultmann, 2003). Die Funktion lässt sich wie folgt beschreiben (Küpper, 1977):

Gleichung 4.5

$$r_{ij} = f_{ij}(d_j) \cdot d_j \cdot t_j$$

mit:

r_{ij}	Einsatzmenge	f_{ij}	Funktionaler Zusammenhang
d_j	Intensität	t_j	Fertigungszeit

Die Produktionsfunktion von Heinen baut auf Typ B auf, berücksichtigt jedoch darüber hinaus verstärkt die Diversifikation von Produktionsprozessen (Fandel, 1996). Heinen unterscheidet in technische und ökonomische Verbrauchsfunktionen und trennt damit technische und ökonomische Leistung. Die Basis ist die Zerlegung eines Produktionssystems in sogenannte Elementarkombinationen (Fandel, 1996). Die auf der Gutenberg-Funktion basierende Produktionsfunktion von Heinen erreicht einen höheren Detaillierungsgrad, setzt sich aber den gleichen Kritikpunkten aus (Rentz, et al., 2006).

Techno-ökonomische Produktionsfunktionen

Während die bisher diskutierten Produktionsfunktionen technische Zusammenhänge eher vernachlässigen, sind sie bei Engineering Production Functions (EPF) Ausgangspunkt der Modellierung. Der Produktionsprozess wird dazu in seine chemisch-physikalischen Prozessschritte zerlegt, um die Abhängigkeiten der mechanischen, thermischen, chemischen und elektrischen Parameter zu analysieren. Dabei kommen sowohl experimentelle als auch analytische Methoden zum Einsatz. Ziel ist die Modellierung des Prozesses aufgrund technischer Größen, den sogenannten Engineering Variables. Eine ökonomische Quantifizierung erfolgt über die Einführung der sogenannten Economic Variables, die den Faktoreinsatz wiedergeben (Fandel, 1996). Der hohe Aufwand zur Entwicklung einer spezifischen EPF und der Bestimmung der benötigten Parameter begründet die im Vergleich zu anderen Produktionsfunktionen eher geringe Verbreitung (vgl. hierzu: Fandel (1996), Penkuhn (1997) und Schultmann (2003)).

4.1.1.2 Input-Output-Analyse

Die Input-Output-Analyse basiert auf den Arbeiten zur Makroökonomie von Leontief (1953), für die er 1973 den Nobelpreis für Wirtschaftswissenschaften erhielt (Putnoki, et al., 2007). Sie wurde von Klock (1969) auf die betriebswirtschaftliche Produktionstheorie übertragen. Im ersten Schritt zerlegt die Input-Output-Analyse das abzubildende Produktionssystem in Teilprozesse beziehungsweise Fertigungsstellen und identifiziert deren Abhängigkeiten. Im zweiten Schritt wird die mengenmäßige Abhängigkeit zwischen Input- und Outputgrößen mit der Hilfe geeigneter Transformationsfunktionen abgebildet.

Das Produktionssystem wird mit Hilfe eines bewerteten Digraphen (D) beschrieben. Beschaffungsstellen, Teilprozesse und Absatzstellen werden als Knoten ($V_1, \dots, V_n$) dargestellt. Knoten ohne Vorgänger beschreiben Beschaffungsstellen, Knoten ohne Nachfolger beschreiben Absatzstellen. Die Verflechtung der Knoten wird mit Hilfe von Kanten beschrieben. Die Kanten werden durch eine Bewertungsfunktion (c) definiert, die den Faktoreinsatz zur Produktion von (j) angibt. Abbildung 4-2 zeigt einen exemplarischen Digraphen. Die Produktionsfaktoren (r_1) und (r_2) stellen dabei die Verbindungen zu den Beschaffungsmärkten, die Endprodukte (x_1) bis (x_3) die Verbindung zu den Absatzmärkten dar (Spengler, 1998).

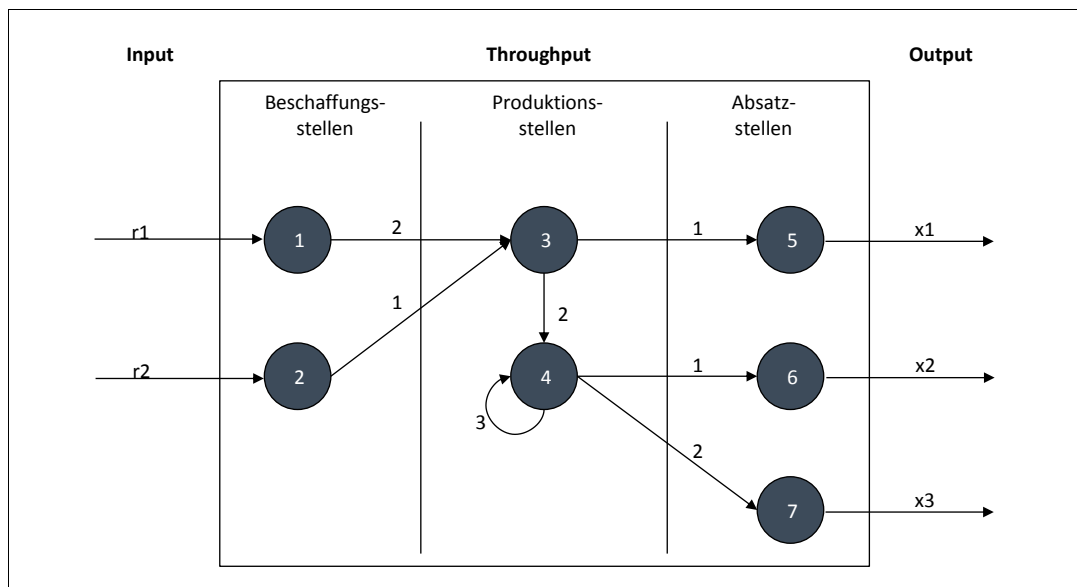


Abbildung 4-2: Veranschaulichung eines Digraphs (in Anlehnung an Steven (1998) und Schultmann (2003))

Aus dem Digraphen des Input-Output-Graphen lassen sich eine Struktur- und eine Input-Output-Matrix ableiten (Kloock, 1969). Dabei gibt die Strukturmatrix (S) den qualitativen Aufbau des Systems wieder und ist definiert als:

$$S = (s_{ij})_{nn} \quad \text{mit} \quad s_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{falls } (i, j) \in E \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

Die Input-Output-Matrix (S') gibt neben der Struktur ebenfalls Auskunft über die Mengenverhältnisse der Verflechtung:

$$S' = (s'_{ij})_{nn}, \text{ mit } s'_{ij} = \begin{cases} c, & \text{falls } (i, j) \in E \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

Für das in Abbildung 4-2 angegebene Beispiel ergeben sich beide Matrizen zu:

$$S = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, S' = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Die Beschreibung der quantitativen Beziehung zweier Knoten erfolgt mit Hilfe von Transformationsfunktionen¹⁷. Die Produktionsfunktion der abzubildenden Produktionssysteme geht somit aus den aggregierten Transformationsfunktionen hervor (Küpper, 1977). Definiert man den Output an der Stelle (j) als (y_j) und den dafür bereitzustellenden Input der Stelle (y_j) als (y_{ij}), ergibt sich mit der Transformationsfunktion (f_{ij}) folgender Zusammenhang (Kloock, 1969):

Gleichung 4.6

$$y_{ij} = f_{ij}(\dots) \cdot y_j$$

mit:

$$\begin{array}{ll} y_{ij} & \text{Einsatzmenge} \\ y_j & \text{Ausbringungsmenge} \end{array} \quad \begin{array}{ll} f_{ij} & \text{Transformationsfunktion} \end{array}$$

Geht man von einem externen Bedarf (x_i) (*Primärbedarf*) aus, ergibt sich die benötigte Menge von Produkt (y_i) zu:

Gleichung 4.7

$$y_i = \sum_{j=1}^n f_{ij}(\dots) \cdot y_j + x_i$$

mit:

$$\begin{array}{ll} y_j & \text{Ausbringungsmenge} \\ x_i & \text{Primärbedarf} \end{array} \quad \begin{array}{ll} f_{ij} & \text{Transformationsfunktion} \end{array}$$

Darauf aufbauend lassen sich der Primärbedarf des gesamten Produktionssystems mit $x^T = (x_1, \dots, x_j, \dots, x_n)^T$ und der dafür bereitzustellende Input mit $y^T = (y_1, \dots, y_j, \dots, y_n)^T$

¹⁷ Transformationsfunktionen bilden wie auch Produktionsfunktionen die funktionale Abhängigkeit zwischen Faktoreinsatz und Faktorsertrag ab (siehe auch Kapitel 4.1.1.1). Sie beziehen sich jedoch auf einzelne Produktionsstufen, nicht auf das gesamte Produktionssystem (vgl. hierzu: Hoitsch (1993) und Küpper (1977)).

ausdrücken. Die Transformationsfunktionen (f_{ij}) lassen sich in die Direktbedarfsmatrix (F) überführen (Schultmann, 2003):

$$F = \begin{bmatrix} f_{11}(\dots) & \cdots & f_{1n}(\dots) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f_{n1}(\dots) & \cdots & f_{nn}(\dots) \end{bmatrix}$$

Unter Zuhilfenahme der Einheitsmatrix (E) gibt die Gesamtbedarfsmatrix (G) den Bedarf von Produkt (i) pro hergestellter Einheit (j) wieder:

Gleichung 4.8

$$\begin{aligned} y &= F \cdot y + x \\ \Leftrightarrow x &= (E - F) \cdot y \\ \Leftrightarrow y &= (E - F)^{-1} \cdot x = G \cdot x \end{aligned}$$

mit:

y	Einsatzmenge	F	Direktbedarfsmatrix
x	Primärbedarf	E	Einheitsmatrix
G	Gesamtbedarfsmatrix		

Der Ansatz der Input-Output-Analyse lässt sich auch auf komplexere Produktionssysteme übertragen. In der Direktbedarfsmatrix (F) werden dazu die Transformationsfunktionen (f_{ij}) durch Matrizen (F_{ij}) ersetzt, die wiederum aus Transformationsfunktionen (f_{ij}^{ij}) aufgebaut sind (Kloock, 1969). Die Abbildung eines untersuchten Produktionssystems erfolgt ausschließlich innerhalb der Spezifikationen der eingesetzten Transformationsfunktionen. Input-Output-Modelle eignen sich daher insbesondere zur Abbildung von Prozessen beziehungsweise Prozessstufen mit hohem Detaillierungs- und Bekanntheitsgrad.

Da der Bekanntheitsgrad der Prozesse in der zu untersuchenden Modellanlage jedoch nur unvollständig anhand von Transformationsfunktionen ausgedrückt werden kann, ist der Einsatz der Input-Output-Analyse für diese Anwendung nicht sinnvoll.

4.1.1.3 Aktivitätsanalytisches Stoffflussmodell

Die Aktivitätsanalyse bietet einen allgemeinen Ansatz zur Beschreibung der Abhängigkeiten von Inputs und Outputs industrieller Produktionsprozesse. Im Gegensatz zum Einsatz der diskutierten Input-Output-Analyse kann auf die Wahl einer formalen Produktionsfunktion verzichtet werden (Spengler, 1998). Die Aktivitätsanalyse bildet Produktionssysteme mit höherem Aggregationsniveau ab. Die Menge der möglichen Produktionsverfahren wird durch Aktivitäten abgebildet, die in Form von Matrizen oder Tabellen vorliegen können (Fandel, 1990; Spengler, 1998). Jede Aktivität kann in Abhängigkeit ihrer Betriebsintensität

betrachtet werden. Die Aktivitätsanalyse erlaubt dadurch eine unkomplizierte Erweiterung des Betrachtungsraumes auf die gesamte Wertschöpfungskette.

Definition von Aktivität

Produktionsprozesse werden als Aktivitäten $(v_1, \dots, v_j)$ in Form von Vektoren dargestellt. Eine Aktivität bildet den quantitativen Zusammenhang zwischen Ressourcen beziehungsweise Inputgrößen $(r_1, \dots, r_k)$ und Produkten beziehungsweise Outputgrößen $(y_1, \dots, y_l)$ für einen Prozess ab. Können in einem Prozess Produkte beziehungsweise Outputgrößen durch unterschiedliche Ressourceninanspruchnahme hergestellt werden, existieren unterschiedliche Aktivitäten. Im Gegensatz zur Input-Output-Analyse ist somit auch Verschwendung beziehungsweise die Abbildung ineffizienter Technologie möglich. Die Gesamtheit aller Aktivitäten bildet alle zur Verfügung stehenden Produktionsmöglichkeiten beziehungsweise die gesamte Technologiemenge ab (Schultmann, 2003).

Die zur Aufstellung einer Aktivität benötigten Input- und Output-Stoffströme können empirisch ermittelt oder mit Hilfe von Flowsheeting-Systemen (siehe auch Kapitel 4.1.1.4) für jeden Betriebspunkt dargestellt werden. Inputgrößen werden mit einem negativen Vorzeichen, Outputgrößen mit einem positiven versehen. Dadurch wird die Aktivitätsanalyse dem Kreislaufcharakter vieler Produktionsprozesse gerecht und bildet auch innerbetriebliche Zyklen ab. Die Summe der Input- und Outputgrößen bestimmt die Dimension des Abbildungsraumes. Mit $(m = k + l)$ Strömen ergibt sich ein m -dimensionaler Güterraum, in dem sich ein Aktivitätsvektor (v_j) wie folgt darstellen lässt (Schultmann, 2003):

$$v_j = \begin{bmatrix} v_{1j} \\ v_{2j} \\ \vdots \\ v_{mj} \end{bmatrix}; \quad v_j^T = [v_{1j} \ v_{2j} \ \dots \ v_{mj}]$$

Stoffstromvektoren

Eine Aktivität (v_j) bildet einen quantitativen Zusammenhang der Stoffflüsse innerhalb eines Prozesses beziehungsweise einer Prozessstufe ab. Jede Aktivität (v_j) wird mit einer Intensität $(\lambda_j \in \mathbb{R}_0^+)$ betrieben, aus der der Stoffstromvektor $(x_j \in \mathbb{R}^m)$ hervorgeht. Der sich ergebene Zusammenhang kann abhängig von der eingesetzten Technologie linear oder nichtlinear sein. Nichtlineare Zusammenhänge sind in der Praxis häufig (Spengler, 1998):

Gleichung 4.9

$$x_j = v_j(\lambda_j) \quad \text{und} \quad x_j = \begin{bmatrix} v_{1j}(\lambda_j) \\ v_{2j}(\lambda_j) \\ \vdots \\ v_{mj}(\lambda_j) \end{bmatrix}$$

mit:

x_j Stoffstromvektor

v_j Aktivitätsvektor

λ_j Intensität

Umweltvektor

Der Umweltvektor ($x^{uw} \in IR^m$) bildet alle Stoffströme ab, die die Systemgrenze passieren. Wird ein System durch nur eine Aktivität (v_j) abgebildet, entspricht der Stoffstromvektor dem Umweltvektor. Die Darstellung der meisten Produktionssysteme erfolgt jedoch in mehreren Aktivitäten ($v_1, \dots, v_j$). Für den Umweltvektor (x^{uw}) gilt damit folgender Zusammenhang (Spengler, 1998):

Gleichung 4.10

$$x^{uw} = \begin{bmatrix} x_1^{uw} \\ x_2^{uw} \\ \vdots \\ x_m^{uw} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1(v_{11}(\lambda_1), \dots, v_{1n}(\lambda_n)) \\ f_2(v_{21}(\lambda_2), \dots, v_{2n}(\lambda_n)) \\ \vdots \\ f_m(v_{m1}(\lambda_m), \dots, v_{mn}(\lambda_n)) \end{bmatrix}$$

mit:

x^{uw} Umweltvektor

f_m Funktionaler Zusammenhang

v_j Aktivitätsvektor

λ_j Intensität

4.1.1.4 Flowsheeting-Systeme

Flowsheeting-Systeme basieren auf der Verknüpfung des oben beschriebenen Konzeptes des aktivitätsanalytischen Stoffflussmodells und den Werkzeugen der Prozesssimulation. Die Basis einer Prozesssimulation ist eine hinreichend genaue mathematische Beschreibung des Prozesses. Flowsheeting-Systeme bilden meist stationäre Zustände ab und eignen sich daher zur Berechnung von Stoff- und Energiebilanzen. Mit ihr lassen sich u.a. die Zusammensetzung, Druck und Temperatur von Stoffströmen berechnen (vgl. hierzu: Spengler (1998), Futterer (1995)). Die Berechnung wird von thermodynamischen Gleichgewichtszuständen bestimmt, die für jeden Prozess simuliert werden. Flowsheeting-Systeme lassen sich daher zur Planung, Entwicklung und Auslegung von Verfahren und Anlagen heranziehen. Es stehen grundsätzlich zwei verschiedene Ansätze zur Verfügung. Sie unterscheiden sich maßgeblich in ihrem Lösungsverfahren beziehungsweise in der Berechnungsreihenfolge.

Sequentiell modularer Ansatz

Im sequentiell modularen Ansatz werden Prozesse mit Hilfe von Stoffumwandlungen modelliert. Beispiele dafür sind die Manipulationen Vereinigen, Trennen, Erwärmen oder Abkühlen. Die daraus resultierenden Module werden in der Prozessreihenfolge des Flussschemas mit Hilfe von Unterprogrammen berechnet und bei Materialkreisläufen gegebenenfalls iterativ gelöst. Hierfür stehen Datenbanken und Berechnungsalgorithmen zur Verfügung, die durch den Benutzer angepasst werden können. Abbildung 4-3 zeigt die Funktionsweise sequentiell modularer Ansätze (Futterer, et al., 1995).

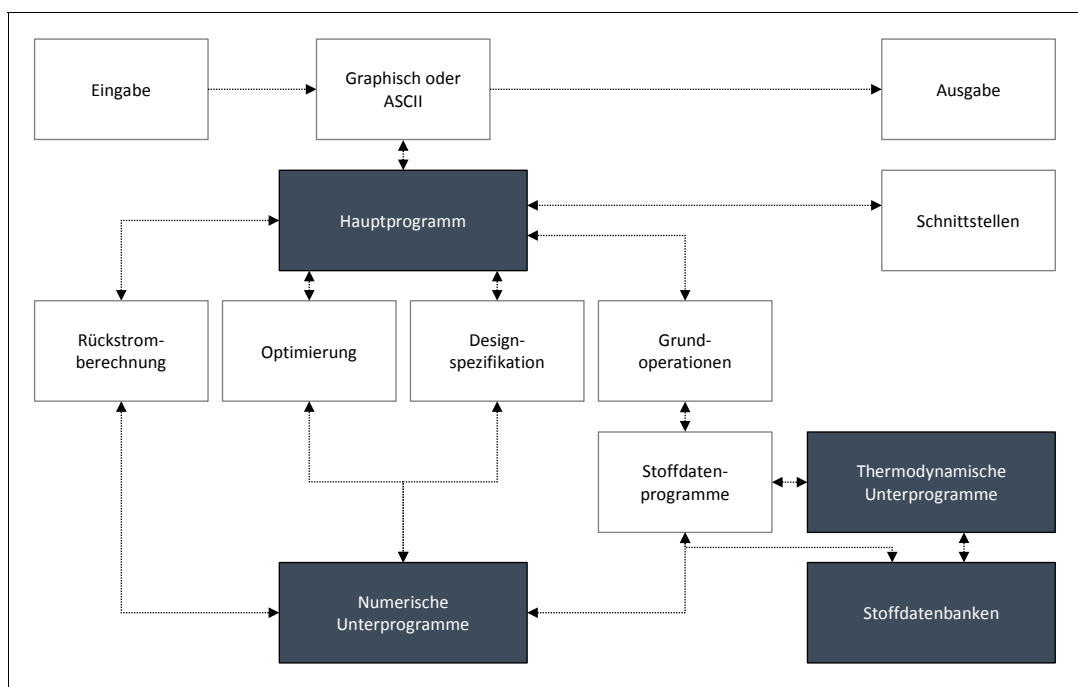


Abbildung 4-3: Struktur sequentiell modularer Systeme in Anlehnung an Lohe (1995)

Simultaner Ansatz

Im simultanen Ansatz werden alle Stoff- und Energiebilanzen sowie Impulsbilanzen in einer Matrix zusammengefasst und anschließend simultan gelöst (Futterer, et al., 1995). Es bestehen Versuche, die Vorteile des sequentiell modularen und des simultanen Ansatzes in simultan-modularen Systemen zu kombinieren. In der Praxis kommen diese jedoch eher selten zum Einsatz (Engels, 2003).

Es steht eine Reihe kommerzieller Programme für Flowsheeting-Simulationen zur Verfügung. Bekannte Vertreter dafür sind unter anderem CHEMCAD, ASPEN Plus und SuperPro Designer. Insbesondere ASPEN wird zunehmend für Anwendungsfelder komplexer Stoffsysteme genutzt (Schultmann, 2003).

Flowsheeting-Systeme eignen sich zur Abbildung der Modellanlage. So liegen bereits einige Flowsheeting-Simulationen für Teile einer n-Butanolanlage vor (vgl. hierzu: Wu et al. (2007), Mansur et al. (2010)). Die Modellierung der Modellanlage mit Hilfe eines Flowsheeting-Ansatzes resultiert im Hinblick auf die Datenlage jedoch in nicht problemadäquatem Aufwand und wird daher in dieser Arbeit nicht weiter verfolgt.

4.1.2 Ableitung des Modellierungsrahmens

Die Modellierung erfordert die Definition des Bilanzraumes, des Aggregationsgrades und des Betrachtungszeitraumes. Alle drei Größen werden in den folgenden Kapiteln diskutiert und für die Modellanlage aus der Aufgabenstellung abgeleitet.

4.1.2.1 Bilanzraum

Das Produktionssystem zur Herstellung von n-Butanol aus Weizenstroh umfasst die Prozessstufen *Produktion von Weizenstroh*, *Transport von Weizenstroh*, *Produktion von n-Butanol in der Modellanlage*, *Transport* und *Einsatz*. Alle Prozessstufen lassen sich in weitere Prozesse und Teilprozesse unterteilen (siehe nachfolgendes Kapitel 4.1.2.2). Die *Produktion von Weizenstroh* wie auch der *Transport* und der *Einsatz* sind für die Auslegung der Modellanlage nicht von Bedeutung. Sie werden in Kapitel 6 zur Ermittlung der Nachhaltigkeit des Einsatzes von n-Butanol herangezogen.

Der Bilanzraum der Modellanlage umfasst daher ausschließlich den Abschnitt *Produktion von n-Butanol in Modellanlage*. Im Bilanzraum enthalten sind die Prozesse *Biomassevorbereitung*, *Fermentation* und *Separation*. Er enthält ebenfalls die *Wasseraufbereitung*, die der Übersicht halber jedoch nicht separat dargestellt wird. Der Bilanzraum entspricht somit der Systemgrenze der Anlage (siehe Abbildung 4-4). Eine detaillierte Betrachtung erfolgt während der Umsetzung der Stoff- und Energieströme in den Kapiteln 4.2 beziehungsweise 4.3.

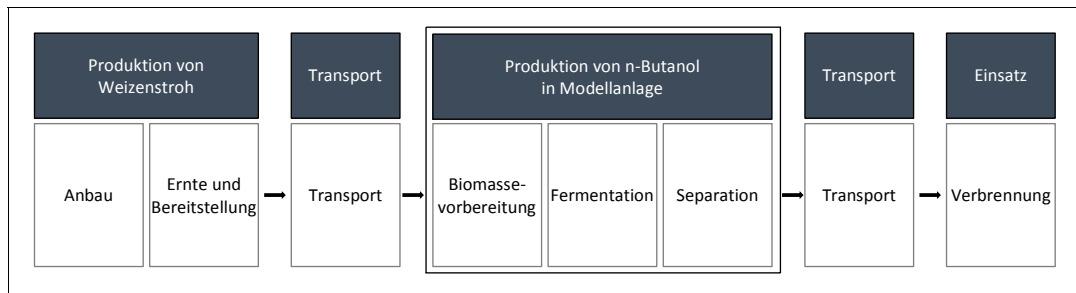


Abbildung 4-4: Prozessstufen in der Produktion von n-Butanol aus Weizenstroh

4.1.2.2 Aggregationsgrad

Für die Modellierung ergeben sich unterhalb der Betriebsebene drei Ansätze, die sich in ihrem Detaillierungsgrad unterscheiden. Dies sind der White-, Grey- und Black-Box-Ansatz. Im White-Box-Ansatz liegen die Prozesse vollständig disaggregiert vor. Er ermöglicht eine hohe Abbildungstiefe, kann jedoch in einem nicht problemadäquaten Lösungsaufwand des Modells resultieren (siehe Kapitel 4.1.1.4). Der Grey-Box-Ansatz beschreibt Abhängigkeiten stärker aggregiert. Er fasst Prozesse zusammen und legt lediglich ausgewählte Teilprozesse disaggregiert dar. Der Grey-Box-Ansatz bildet damit die Abstufung zwischen dem White- und dem Black-Box-Ansatz. Der Black-Box-Ansatz weist die höchste Aggregationsstufe auf und beschreibt keine Teilprozesse mehr. Er bietet eine hohe Übersichtlichkeit, kann jedoch in Abhängigkeit der Anforderungen an den Detaillierungsgrad auch zu einer unzureichenden Verkürzung der Komplexität eines Produktionssystems führen (Penkuhn, 1997; Daenzer, et al., 1999). Abbildung 4-5 verdeutlicht die Unterschiede der Aggregationsebenen in einer Übersicht.

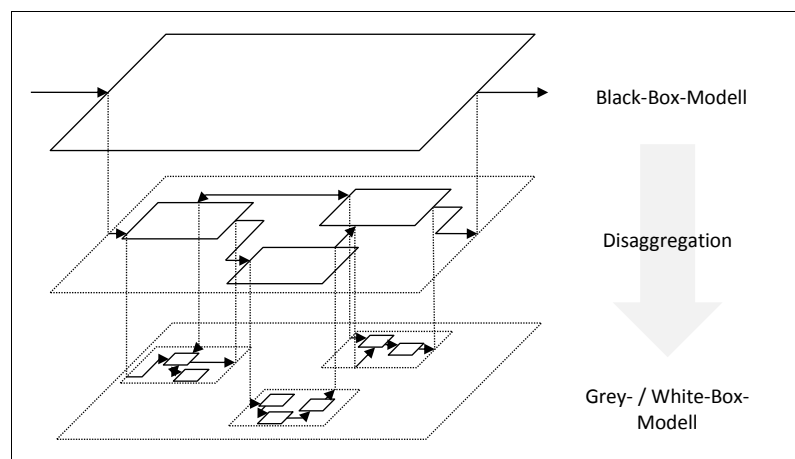


Abbildung 4-5: Aggregationsebenen der Prozessabbildung (in Anlehnung an Dykhoff und Spengler (2010))

Die Wahl der geeigneten Abbildungstiefe ist von den Anforderungen an den Modellierungsansatz abhängig. Die Abbildung der Modellanlage erfolgt mit der Maßgabe, funktionale Zu-

sammenhänge sowie die relevanten Stoff- und Energieströme zwischen den Produktionsstufen transparent darzustellen. Darüber hinaus muss die Anforderung nach einer unkomplizierten Berücksichtigung von technologischem Fortschritt erfüllt sein. Im Folgenden wird daher zur Abbildung der Modellanlage der Grey-Box-Ansatz gewählt.

4.1.2.3 Betrachtungszeitraum

Der übliche Betrachtungszeitraum in der Abbildung prozesstechnischer Anlagen ist eine Stunde. Im Folgenden werden alle Stoff- und Energieströme der Modellanlage auf diesen Zeitraum bezogen. Für die Kapazitätsberechnung der Anlage ist dies jedoch nicht sinnvoll. Denn auch im ordnungsgemäßen Betrieb unterliegt jede prozesstechnische Anlage Wartungs- und Instandhaltungsanforderungen, für die die Anlage herunterzufahren ist. Darüber hinaus können weitere ungeplante Betriebsunterbrechungen durch technische Schwierigkeiten eintreten, die bei nicht etablierten Technologien tendenziell häufiger sind. Für die Kapazitätsberechnung wird daher der Betrachtungszeitraum von einem Jahr gewählt.

4.1.3 Entwicklung eines angepassten aktivitätsanalytischen Ansatzes zur Modellierung des zu untersuchenden Produktionssystems

Wie in Kapitel 4.1.1 herausgestellt, erfüllt die Aktivitätsanalyse die an Modellierungsansätze gestellten Anforderungen und eignet sich insbesondere im Hinblick auf die Einbindung von Flowsheeting-Modellen. Auf Basis des abgeleiteten Modellierungsrahmens wird die Aktivitätsanalyse im Folgenden auf das zu untersuchende Produktionssystem übertragen. Die Definition von Stoff- und Energieströmen basiert auf der in Kapitel 4.1.1 dargestellten Nomenklatur. Die Inputgrößen $(r_1, \dots, r_k)$, die den Rohstoffeinsatz wiedergeben, werden durch die Klasse Hilfs- und Betriebsstoffe $(s_1, \dots, s_n)$ erweitert. Hierunter fallen auch Energieträger und elektrische Energie. In ähnlicher Weise erfolgt eine Erweiterung der Outputgrößen beziehungsweise Produkte $(y_1, \dots, y_l)$ um die Kategorien $(z_1, \dots, z_p)$ für Nebenprodukte sowie $(w_1, \dots, w_o)$ für Zwischenprodukte und Reststoffe. Zwischenprodukte und Reststoffe weisen gemeinsame Eigenschaften auf und werden daher in der gleichen Klasse abgebildet. Werden Zwischenprodukte nicht weiterverwendet und verlassen die Systemgrenze, werden sie zu Reststoffen. Für Zwischenprodukte, die die Systemgrenze nicht überschreiten, nimmt der Umweltvektor den Wert null an. Die ermittelten Aktivitäten des abzubildenden Systems werden im m -dimensionalen Güterraum ($m = k + n + l + p + o$) abgebildet. Alle Aktivitäten (v_j) lassen sich wie folgt darstellen:

Gleichung 4.13

$$v_j = \begin{bmatrix} r_{1j} \\ \cdot \\ \cdot \\ r_{kj} \\ s_{1j} \\ \cdot \\ \cdot \\ s_{nj} \\ y_{1j} \\ \cdot \\ \cdot \\ y_{lj} \\ z_{1j} \\ \cdot \\ \cdot \\ z_{pj} \\ w_{1j} \\ \cdot \\ \cdot \\ w_{oj} \end{bmatrix}$$

Aus der Menge aller Aktivitäten lässt sich der Umweltvektor (x^{uw}) ermitteln (siehe auch Kapitel 4.1.1.1). Dieser bildet alle die Systemgrenze überschreitenden Input- und Outputgrößen ab. Der Umweltvektor wird durch die Intensitäten ($\lambda_1, \dots, \lambda_j$) bedingt, deren Kombination für jeden Betriebspunkt einzigartig ist. Für einen spezifischen Betriebspunkt gilt auch der invertierte Zusammenhang. Die spezifischen Intensitäten ($\lambda_1^*, \dots, \lambda_j^*$) ergeben sich aus dem Nachfragevektor (b). Der Produktstrom der Modellanlage besteht aus den drei Produkten n-Butanol (b_{y1}), Aceton (b_{y2}) und Ethanol (b_{y3}). Für alle anderen Positionen nimmt er den Wert null an:

Gleichung 4.14

$$b = \begin{bmatrix} 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \\ b_{y1} \\ b_{y2} \\ b_{y3} \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{11} & \cdot & \cdot & r_{1j} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ r_{k1} & \cdot & \cdot & r_{kj} \\ s_{11} & \cdot & \cdot & s_{1j} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ s_{n1} & \cdot & \cdot & s_{nj} \\ y_{11} & \cdot & \cdot & y_{1j} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ y_{l1} & \cdot & \cdot & y_{lj} \\ z_{11} & \cdot & \cdot & z_{1j} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ z_{p1} & \cdot & \cdot & z_{pj} \\ w_{11} & \cdot & \cdot & w_{1j} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ w_{o1} & \cdot & \cdot & w_{oj} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \lambda_1^* \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \lambda_j^* \end{bmatrix}$$

Ergebnis aus Gleichung 4.14 ist die Darstellung der Intensitäten $(\lambda_1^*, \dots, \lambda_j^*)$ als Funktion der Nachfrage nach den Produkten $(b_{y1}, \dots, b_{yl})$. Die stündliche Nachfrage nach den Produkten multipliziert mit der Betriebsdauer entspricht im planungsgemäßen Betrieb der Jahreskapazität (Kap). Mit Hilfe der spezifischen Intensitäten $(\lambda_1^*, \dots, \lambda_j^*)$ lassen sich alle weiteren Stoffflüsse des spezifischen Umweltvektors x^{uw*} ableiten:

Gleichung 4.15

$$\sum_{l \in L} b_{yl} \cdot Bh = Kap$$

mit:

$L = \{1; 2; 3\}$		b_{yl}	Nachfragevektor	$t \cdot h^{-1}$
Bh	Betriebsstunden	$h \cdot a^{-1}$	Kap	Kapazität
				$t \cdot a^{-1}$

4.2 Umsetzung der Stoffstrommodellierung

Für das Konzept der n-Butanol-Fermentation auf Basis von Weizenstrohhydrolysat liegt bislang kein detailliertes großtechnisches Umsetzungskonzept vor. Für die Umsetzung des Basisszenarios werden experimentelle Ergebnisse auf den industriellen Maßstab übertragen. Dabei kommen im Basisszenario überwiegend erprobte Technologien zum Einsatz. Das Ziel ist die Modellierung eines technologisch umsetzbaren Vorschlages als Grundlage für die Er-

mittlung der Energieströme und die Erweiterung des Modells um eine wirtschaftliche und ökologische Betrachtung. Die Optimierung der Modellanlage im Hinblick auf die Auswahl der besten zur Verfügung stehenden Technologie ist nicht Gegenstand der Betrachtung. Sie wird in Kapitel 7 in der Identifizierung des Fortschrittsszenarios aufgenommen.

Die folgende Stoffstrommodellierung basiert auf den in Kapitel 2.4 vorgestellten Verfahren zur Herstellung von n-Butanol. Diese werden im Hinblick auf die in Kapitel 4.1.3 entwickelten Bedingungen in den angepassten aktivitätsanalytischen Ansatz überführt. Alle relevanten Prozesse können zu vier Aktivitäten gebündelt werden. Der funktionale Zusammenhang der Aktivitäten wird vorerst qualitativ beschrieben (siehe Abbildung 4-6) und erfolgt in den folgenden Kapiteln detailliert.

Die Auslegung der Anlage basiert auf der Annahme, dass Elektrizität, Frischwasser und Kühlwasser am Standort zur Verfügung stehen und in der benötigten Menge bezogen werden können. Die Modellanlage wird in der Basisversion auf eine Kapazität von 100.000 t a⁻¹ ausgelegt.

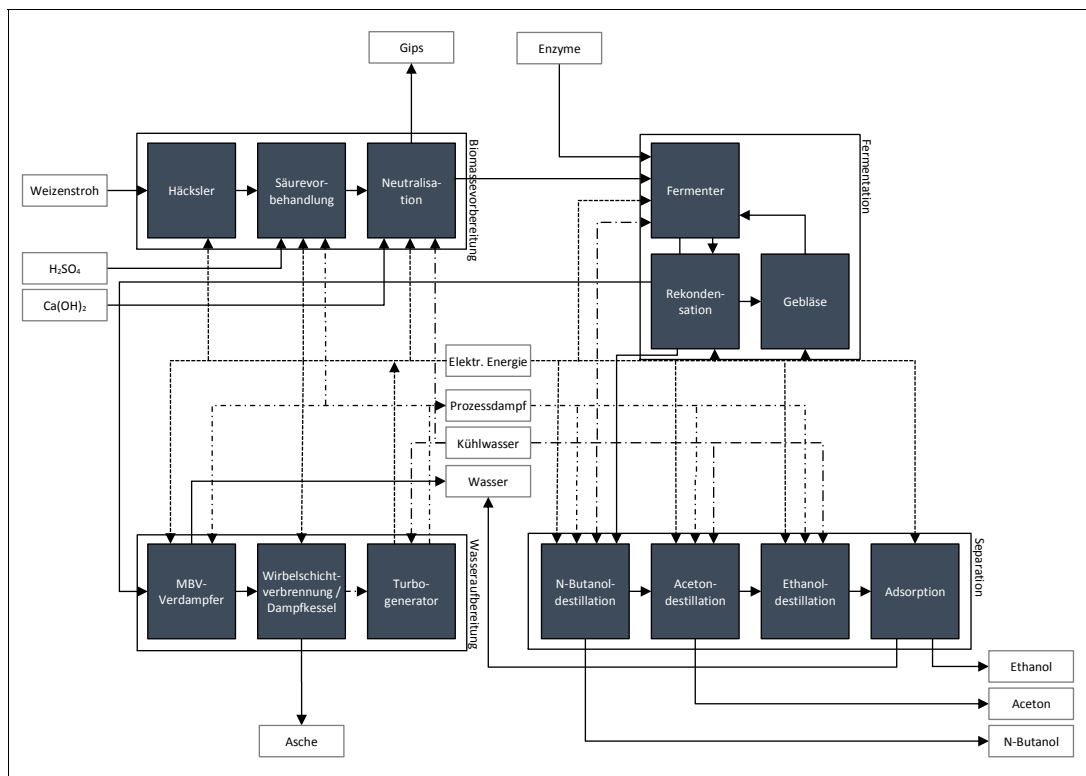


Abbildung 4-6: Prozessstufen sowie Stoff- und Energieströme des Bilanzraums

Biomassevorbereitung (v_1)

In der Rohstoffannahme wird das Weizenstroh kurzzeitig zwischengelagert und anschließend mittels eines Häckslers zerkleinert. Es folgt eine thermische Säurebehandlung mit Schwefelsäure und anschließende Neutralisation mit Calciumhydroxid. Der dabei entstehende Gips wird entfernt. Abschließend wird die Maische in die Fermentation geleitet.

Fermentation (v_2)

Die Maische aus der Biomassevorbereitung gelangt in die Fermenter. Es ist ein Reihe von Fermentern vorgehsehen, die durch zeitversetzten Ansatz einen semi-kontinuierlichen Betrieb ermöglichen. Dort findet eine simultane Verzuckerung und Fermentation statt. Dazu wird das Substrat mit Enzymen versetzt und das Inokulum hinzugegeben. Cellulose und Hemicellulose werden mit der Hilfe von Enzymen zu C₅- und C₆-Zuckern aufgeschlossen. Gleichzeitig setzen Mikroorganismen die freigesetzten Zucker zu den ABE-Produkten Aceton, n-Butanol und Ethanol um.

Die ABE-Produkte werden über kontinuierliche Produktabtrennung in-situ durch Gas-Stripping entfernt. Die Fermenter sind daher als Airlift-Fermenter ausgeführt. Als Stripping-gas wird das entstehende Fermentationsgas genutzt. Es besteht fast ausschließlich aus Kohlenstoffdioxid und entfernt neben den ABE-Produkten auch geringe Anteile Wasser aus der Maische. Der gasförmige Strom wird kondensiert und in die Separation geleitet. Die zurückbleibende Fermentationsbrühe gelangt über einen Pufferbehälter in die Wasseraufbereitung.

Separation (v_3)

Das Kondensat aus der Fermentation gelangt in die erste von drei Kolonnen, die n-Butanol von den übrigen Produkten und Wasser trennt. Analog separiert die zweite Kolonne Aceton und lässt Ethanol und Wasser zurück. Ethanol und Wasser werden in der dritten Kolonne getrennt. Anschließend findet eine Reinigung des Ethanols, das Restbestandteile von Aceton und Wasser enthält, in der Adsorption statt. Die Separation leitet alle Produkte anschließend in das Tanklager. Das abgetrennte Wasser wird im Kreislauf in die Biomassevorbereitung zurückgeführt.

Wasseraufbereitung (v_4)

Die nach der Fermentation zurückbleibende Fermentationsbrühe wird einem Verdampfer zugeführt, der mit einem mechanischen Brüdenverdichter ausgestattet ist. Der dabei verdampfte und rekondensierte Wasserstrom wird erneut in die Biomassevorbereitung geleitet, die Rückstände in eine Wirbelschichtverbrennung geführt. Dort wird mittels eines Dampfkessels Prozessdampf für den Betrieb einer Dampfturbine zur Bereitstellung elektrischer Energie erzeugt. Der für den Betrieb der Modellanlage notwendige Prozessdampf wird der Dampfturbine entnommen, während der übrige durch einen Kondensator vollständig entspannte Dampf als Speisewasser erneut dem Kessel zugeführt wird.

4.2.1 Biomassevorbereitung

Die Biomassevorbereitung, Aktivität v_1 , umfasst die Rohstoffannahme von Weizenstroh, die Zerkleinerung von Weizenstroh, die Säurevorbehandlung, die Neutralisation und das Abkühlen. Das Ziel ist die Bereitstellung von vergärbaren beziehungsweise enzymatisch simultan zur Vergärung aufschließbarer Zucker. Abbildung 4-7 zeigt die Aktivität schematisch in der Übersicht.

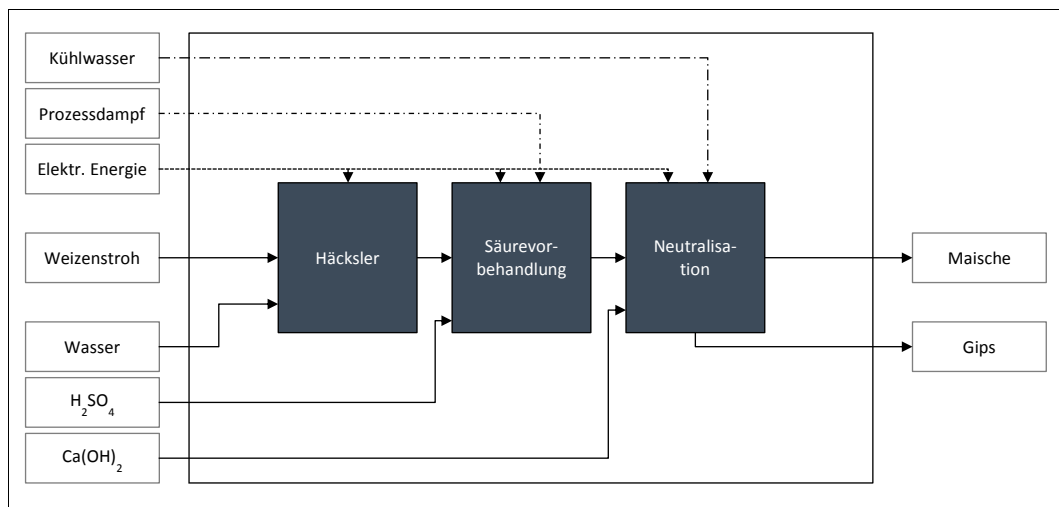


Abbildung 4-7: Prozesse sowie Stoff- und Energieströme der Biomassevorbereitung

Dem Grey-Box-Ansatz folgend werden im vorliegenden Kapitel dazu alle relevanten Stoffströme der Aktivität ermittelt und am Ende in Form eines tabellarischen Aktivitätsvektors dargestellt (siehe Tabelle 4-1).

Tabelle 4-1: Darstellung der Stoffstromvektoren der Aktivität Biomassevorbereitung

Stoffstromvektor	Bezeichnung	Einheit	Input (-)	Output (+)
r_{11}	Weizenstroh	t h^{-1}		
r_{21}	Wasseranteil in feuchtem Weizenstroh	t h^{-1}		
s_{11}	Wasser	t h^{-1}		
s_{21}	Schwefelsäure	t h^{-1}		
s_{31}	Calciumhydroxid	t h^{-1}	zu ermitteln	
w_{11}	Aufschließbares Substrat	t h^{-1}		
w_{21}	Reststoffe in Maische	t h^{-1}		
w_{31}	Wasser in Maische	t h^{-1}		
z_{11}	Gips	t h^{-1}		

Experimentelle Grundlagen

Die Modellierung der Biomassevorbereitung basiert auf dem von Qureshi et al. (2007a) und Qureshi et al. (2007b) im Labormaßstab eingesetzten Vorgehen, das im Folgenden vorgestellt wird. Anschließend erfolgt die Übertragung des experimentellen Aufbaus auf den großtechnischen Maßstab.

Im experimentellen Aufbau zerkleinern Qureshi et al. (2007a) getrocknetes Weizenstroh mit einer Hammermühle. In der anschließenden Säurebehandlung werden Cellulose und Hemicellulose aus dem Stroh herausgelöst. Qureshi et al. nutzen dafür verdünnte Schwefelsäure (1,75 % (m/m) H_2SO_4), die pro Liter mit 86 g zerkleinertem Weizenstroh versetzt

wird. Das entspricht einem Säure/Stroh-Verhältnis ($f_{SAU/STR}^{VRBR}$) von 20,5 % (m/m) und einem Biomasse/Wasser-Verhältnis ($f_{BIO/WAS}^{VRBR}$) von 8,6 % (m/m). Die Hydrolyse erfolgt durch Autoklavieren des Gemisches für 60 min, 121 °C und etwa 2 bar¹⁸. Anschließend wird das Gemisch auf 35 °C abgekühlt und mit Natriumhydroxid neutralisiert.

Aus der Menge von 86 g Weizenstroh können 55 g enzymatisch aufschließbare Zucker gewonnen werden. Das entspricht einem Hydrolysegrad aller Zucker von 83,8 % (m/m)¹⁹. Auf die eingesetzte Biomasse bezogen ergibt sich daraus ein Nutzungsgrad des Weizenstrohs (G_{NUTZG}^{VRBR}) von 64,0 % (m/m). Ein Teil des Zuckers, insbesondere Xylose, liegt zu diesem Zeitpunkt bereits aufgeschlossen vor. Der vollständige Aufschluss erfolgt jedoch in der simultanen Hydrolyse und Fermentation. In der nachfolgenden Fermentation erreichen Qureshi et al. (2007a) einen Hydrolysegrad der hydrolysierten Cellulose und Hemicellulose (G_{HYDR}^{VRBR}) von 95 % (m/m).

Umsetzung

Im Folgenden wird eine großtechnische Umsetzung zur Übertragung des Vorgehens vorgeschlagen. Dazu wird ein Prozess von Kumar et al. (2011) herangezogen und entsprechend modifiziert. Kumar et al. untersuchten den Einsatz von Rohrschwengelstroh zur Herstellung von Ethanol mit Hilfe einer Flowsheeting-Simulation. Die Herangehensweise zur großtechnischen Realisierung lässt sich auf die Verarbeitung von Weizenstroh in der Modellanlage übertragen und wird im Folgenden vorgestellt.

Nach der Rohstoffannahme und dem Transport mittels eines Bandförderers wird das Weizenstroh durch einen Häcksler zerkleinert. Es folgt eine Verdünnung des gehäckselten Strohs mit Wasser. Die Mengenangaben für Weizenstroh beziehen sich daher im Folgenden auf die Trockenmasse (TM). Der im bereitgestellten Weizenstroh enthaltene Wasseranteil ($f_{FM,STR}^{VRBR}$) beträgt für den Raum Deutschland durchschnittlich 14 % (m/m) (Kappler, 2008) und ergibt sich aus Gleichung 4.16:

Gleichung 4.16

$$r_{21} = r_{11} \cdot \frac{f_{FM,STR}^{VRBR}}{1 - f_{FM,STR}^{VRBR}}$$

mit:

r_{21}	Stoffstromvektor Wasser in Weizenstroh	$t \cdot h^{-1}$	r_{11}	Stoffstromvektor Weizenstroh	$t \cdot h^{-1}$
$f_{FM,STR}^{VRBR}$	Faktor Feuchtigkeit Stroh	-			

Die Menge des darüber hinaus eingesetzten Wassers wird durch das Biomasse/Wasser-Verhältnis bestimmt. Qureshi et al. (2007a) führen die Vorbereitung mit einem Biomasse/Wasser-Verhältnis ($f_{BIO/WAS}^{VRBR}$) von 8,6 % (m/m) durch, was zu einem Wasserbedarf von

¹⁸ Druckangabe Autoklav aus Schlegel (1992)

¹⁹ Für die Zusammensetzung des Weizenstrohs verweisen Qureshis et al. (2007a) auf die Ausführungen von Saha et al. (2005)

etwa $11,63 \text{ t t}^{-1}$ Weizenstroh führt. Je höher das Biomasse/Wasser-Verhältnis ist, desto kleiner sind die benötigten Baugrößen. Darüber hinaus nimmt der Energiebedarf für thermische und mechanische Operationen bei gleicher Kapazität ab. Im Hinblick auf einen geringen Rohstoff- und Energiebedarf wird ein möglichst hohes Biomasse/Wasser-Verhältnis angestrebt. In der Biomasseaufbereitung führt eine Erhöhung des von Qureshi et al. (2007a) vorgesehenen Biomasse/Wasser-Verhältnisses von 8,6 % (m/m) auf 15 % (m/m) zu einer annähernden Halbierung der benötigten Wassermenge (s_{11}). Diese wird auf Basis von Literaturangaben im Folgenden auf ihre Umsetzbarkeit überprüft. Die Betrachtung kann nicht nur im Hinblick auf die in diesem Kapitel diskutierte Biomassevorbereitung erfolgen, sondern muss auch auf die folgenden Aktivitäten ausgedehnt werden. Daher wird die Thematik in Kapitel 4.2.2 für die enzymatische Hydrolyse erneut aufgenommen.

Literaturangaben zu einem erhöhten Biomasse/Wasser-Verhältnis in der Biomassevorbereitung liegen zwar für Weizenstroh vor, unterscheiden sich jedoch bezüglich der Prozessparameter und eingesetzten Enzyme vom vorgestellten Vorgehen Qureshis et al. (2007a; 2007b). Eine Abschätzung der Umsetzbarkeit kann mit Hilfe der Ausführungen von Koostra et al. (2009) vorgenommen werden.

Koostra et al. (2009) untersuchten den Aufschluss von Weizenstroh mit einem Biomasse/Wasser-Verhältnis von 20 % (m/m). Im Gegensatz zu Qureshi et al. (2007b) setzten Koostra et al. 35 % weniger Schwefelsäure ein, was einem Säure/Reststroh-Verhältnis ($f_{SAU/STR}^{VRBR}$) von 5,2 % (m/m) entspricht. Darüber hinaus wird eine um 50 % auf 30 Minuten reduzierte Einwirkzeit und eine um 30 °C höhere Temperatur von 150 °C gewählt. Darüber hinaus setzen Koostra et al. für den enzymatischen Aufschluss im Gegensatz zu Qureshi et al. ausschließlich Cellulase, keine β -Glukosidase und keine Xylanase ein. Der von Koostra et al. erreichte Hydrolysegrad nach einer Enzymbehandlung beträgt dennoch über 90 % (m/m) Glukose und über 80 % (m/m) Xylose. Gleichwohl lassen sich die Versuche von Qureshi et al. und Koostra et al. aufgrund ihrer unterschiedlichen Parameter nicht direkt vergleichen.

Für den Aufschluss von Strohhydrolysaten ist bekannt, dass neben der absoluten Enzymkonzentration insbesondere die optimale Zusammenstellung von Enzymen eine große Rolle für den Hydrolysegrad spielt (Rosgaard, et al., 2007b). Der Vergleich zeigt vielmehr, dass hohe Aufschlussgrade auch mit einem deutlich höheren Biomasse/Wasser-Verhältnis von 20 % (m/m) als dem von Qureshi et al. (2007b) untersuchten von 8,6 % (m/m) möglich sind. Außerdem zeigt sich, dass diese auch durch ein deutlich geringeres Säure/Reststroh-Verhältnis erzielt werden können. Für die geplante großtechnische Umsetzung des Experimentes von Qureshi et al. liegen daher keine Anhaltspunkte vor, die gegen die geplante Modifikation sprechen. Im Vergleich zu Koostra et al. (2009) ist das geplante Biomasse/Wasser-Verhältnis von 15 % (m/m) deutlich geringer und das Säure/Reststroh-Verhältnis von 10,3 % (m/m) bei einer unveränderter Säurekonzentration von 1,8 % (m/m) deutlich höher. Qureshi et al. erreichen in der von ihnen vorgenommenen Biomassevorbereitung einen Aufschlussgrad (G_{AFSCH}^{VRBR}) von 64,0 % (m/m).

Im Folgenden wird angenommen, dass dieses Ergebnis bei einem konstanten Enzym/Biomasse-Verhältnis auch für ein Biomasse/Wasser-Verhältnis von 15 % (m/m) zu erreichen ist. Der Wasserbedarf ergibt sich ausgehend davon durch die nachfolgende Gleichung.

Gleichung 4.17

$$s_{11} = \frac{r_{11}}{f_{BIO/WAS}^{VRBR}} - r_{21}$$

mit:

s_{11}	Stoffstromvektor Wasser	$t\ h^{-1}$	r_{11}	Stoffstromvektor Weizenstroh	$t\ h^{-1}$
$f_{BIO/WAS}^{VRBR}$	Faktor Biomasse/Wasser	-	r_{21}	Stoffstromvektor Wasser in Weizenstroh	$t\ h^{-1}$

Die Suspension wird bis zum Säure/Stroh-Verhältnis ($f_{SÄU/STR}^{VRBR}$) von 10,3 % (m/m) mit Schwefelsäure versetzt und in einen Reaktor gepumpt. Dort wird sie für 60 Minuten bei 121 °C und etwa 2 bar²⁰ bei ständiger Agitation durch ein Rührwerk vorbehandelt. Der Stoffstromvektor für Schwefelsäure (s_{21}) lässt sich nach folgender Gleichung abschätzen:

Gleichung 4.18

$$s_{21} = r_{11} \cdot f_{SÄU/STR}^{VRBR}$$

mit:

s_{21}	Stoffstromvektor Schwefelsäure	$t\ h^{-1}$	r_{11}	Stoffstromvektor Weizenstroh	$t\ h^{-1}$
$f_{SÄU/STR}^{VRBR}$	Faktor Säure/Stroh	-			

Der Stoffstromvektor des aufschließbaren Substrates (w_{11}) ergibt sich damit zu:

Gleichung 4.19

$$w_{11} = r_{11} \cdot G_{NUTZG}^{VRBR}$$

mit:

w_{11}	Aufschließbares Substrat	$t\ h^{-1}$	r_{11}	Stoffstromvektor Weizenstroh	$t\ h^{-1}$
G_{NUTZG}^{VRBR}	Nutzungsgrad Weizenstroh	$t\ t^{-1}$			

Gerade in höheren Konzentrationen können sich Salze auf die anschließende Fermentation inhibitorisch auswirken (Qureshi, et al., 2008a). Im Gegensatz zu Qureshi et al. (2007a) wird

²⁰ Druckangabe Autoklav aus Schlegel (1992)

in der anschließenden Neutralisation Calciumhydroxid anstatt Natriumhydroxid zugegeben. Als Reaktionsprodukt entsteht daher Calciumsulfat anstelle von Natriumsulfat. Calciumsulfat weist mit 2 g L^{-1} (IFA, 2012a) eine geringere Wasserlöslichkeit als Natriumsulfat mit 170 g L^{-1} auf (IFA, 2012b) und fällt daher anteilig aus. Calciumhydroxid wird dem Gemisch im stöchiometrischen Verhältnis ($f_{\text{Ca(OH)}_2/\text{H}_2\text{SO}_4}^{\text{VRBR}}$) 0,76 zu Schwefelsäure zugegeben. Der Stoffstromvektor an Calciumhydroxid (s_{31}) lässt sich wie folgt abschätzen:

Gleichung 4.20

$$s_{31} = s_{21} \cdot f_{\text{Ca(OH)}_2/\text{H}_2\text{SO}_4}^{\text{VRBR}}$$

mit:

s_{31}	Stoffstromvektor Calciumhydroxid	t h^{-1}	s_{21}	Stoffstromvektor Schwefelsäure	t h^{-1}
$f_{\text{Ca(OH)}_2/\text{H}_2\text{SO}_4}^{\text{VRBR}}$	Verhältnis Calciumhydroxid/Schwefelsäure	-			

Dabei entsteht im Massenverhältnis ($f_{\text{GIPS}/\text{H}_2\text{SO}_4}^{\text{VRBR}}$) 1,39 Calciumsulfat beziehungsweise Gips. Ausgehend von der maximalen Gipskonzentration ($c_{\text{GIPS MAX}}^{\text{VRBR}}$) von 2 g L^{-1} fallen von den $2,43 \text{ g L}^{-1}$ Gips im neutralisierten Gemisch $0,43 \text{ g L}^{-1}$ aus. Höhere Biomasse/Wasser-Verhältnisse, wie in später untersuchten Szenarien, führen jedoch zu deutlich höheren Gips-übersättigungen. Der Gips lässt sich mittels eines Hydrozyklons und einer Vakuumfiltration abfiltrieren (Kumar, et al., 2011). Da dabei feste zellulosehaltige Bestandteile gemeinsam mit dem Gips entfernt würden, werden vor der Neutralisierung alle festen Bestandteile abgetrennt und nach der Filtration wieder hinzugefügt.

Kumar et al. geben für die abgetrennte Menge einen Wassergehalt von 15 % (m/m) an. Es wird angenommen, dass analog 15 % (m/m) der eingesetzten Schwefelsäure im abgetrennten Anteil enthalten sind, deren Neutralisierung nach der Filtration erfolgt. Die eingesetzte Menge Calciumhydroxid ändert sich dadurch nicht. Jedoch vermindert sich die abtrennbare Menge an Gips beziehungsweise der Abtrennungsgrad ($G_{\text{GIPS}}^{\text{VRBR}}$) auf 85 % (m/m). Der nach der Rückführung der Feststoffe entstehende Gips kann nicht mehr abgetrennt werden. Eine Ablagerung in Maschinenteilen ist auf dem Weg zur Wasseraufbereitung jedoch nicht zu erwarten. Der sich aus der Neutralisation ergebene Stoffstromvektor von Gips (z_{11}) ergibt sich aus Gleichung 4.21:

Gleichung 4.21

$$z_{11} = \left(s_{21} \cdot f_{GIPS/H_2SO_4}^{VRBR} - c_{GIPSMAX}^{VRBR} \cdot (s_{11} + r_{21}) \right) \cdot G_{GIPS}^{VRBR}$$

mit:

z_{11}	Stoffstromvektor Gips	$t\ h^{-1}$	s_{21}	Stoffstromvektor Schwefelsäure	$t\ h^{-1}$
$f_{GIPS/H_2SO_4}^{VRBR}$	Verhältnis Gips/Schwefelsäure	-	$c_{GIPSMAX}^{VRBR}$	Maximale Gipskonzentration	$g\ L^{-1}$
s_{11}	Stoffstromvektor Wasser	$t\ h^{-1}$	r_{21}	Stoffstromvektor Wasser in Weizenstroh	$t\ h^{-1}$
G_{GIPS}^{VRBR}	Abtrennungsgrad Gips	$t\ t^{-1}$			

Bei der thermischen Behandlung mit Schwefelsäure entstehen unter anderem Furfural und Hydroxymethylfurfural (HMF). Diese gelten allgemein als Inhibitoren. Ezeji et al. (2007) und Qureshi et al. (2011) konnten dahingegen zeigen, dass sich Zugaben von Furfural und HMF positiv auf die Fermentationsgeschwindigkeiten von *C. beijerinckii* BA101 beziehungsweise *C. beijerinckii* P260 auswirken. Es wird daher auch in der großtechnischen Umsetzung keine Entgiftung des thermisch behandelten Weizenstrohsubstrats vorgenommen.

Neben dem aufschließbaren Substrat enthält die Maische weitere Bestandteile, die in die Kategorien Wasser und Reststoffe unterteilt werden. Das in der Maische enthaltene Wasser (w_{31}) enthält zwar das bei der Bildung von Gips frei werdende Wasser, jedoch erhöht sich durch die Hydrolyse das Molgewicht der aufschließbaren Zucker gegenüber den polymerisierten Ausgangsstoffen um einen Faktor (f_{HYDR}^{VRBR}) von etwa 10,5²¹ % (m/m). Unter dieser Berücksichtigung ergibt sich der Stoffstromvektor zu:

Gleichung 4.22

$$w_{31} = r_{21} + s_{11} + s_{31} + s_{21} \cdot (1 - f_{GIPS/H_2SO_4}^{VRBR}) - w_{11} \cdot f_{HYDR}^{VRBR}$$

mit:

w_{31}	Stoffstromvektor Wasser in Maische	$t\ h^{-1}$	r_{21}	Stoffstromvektor Wasser in Weizenstroh	$t\ h^{-1}$
s_{11}	Stoffstromvektor Wasser	$t\ h^{-1}$	s_{31}	Stoffstromvektor Calciumhydroxid	$t\ h^{-1}$
s_{21}	Stoffstromvektor Schwefelsäure	$t\ h^{-1}$	$f_{GIPS/H_2SO_4}^{VRBR}$	Faktor Gips	-
w_{11}	Aufschließbares Substrat	$t\ h^{-1}$	f_{HYDR}^{VRBR}	Faktor Wasserbedarf Hydrolyse	-

Nicht aufgeschlossenes Substrat, Lignin, gelöster Gips, Asche und weitere Stoffe werden im Stoffstromvektor der Reststoffe (w_{21}) zusammengefasst. Unter Berücksichtigung des Was-

²¹ Wie oben beschrieben, liegt vor der enzymatischen Hydrolyse nur ein Teil der Monomere hydrolysiert vor. Auf eine Differenzierung diesbezüglich und die Berücksichtigung einzelnen Monomeranteile wird im Hinblick auf die Zielsetzung der Arbeit verzichtet.

serbedarfes für die Hydrolyse (f_{HYDR}^{VRBR}) lässt sich die Höhe des Reststoffaufkommens wie folgt abschätzen:

Gleichung 4.23

$$w_{21} = r_{11} - w_{11} \cdot (1 - f_{HYDR}^{VRBR}) + s_{21} \cdot f_{GIPS/H2SO4}^{VRBR} - z_{11}$$

mit:

w_{21}	Stoffstromvektor Reststoffe in Maische	$t\ h^{-1}$	r_{11}	Stoffstromvektor Weizenstroh	$t\ h^{-1}$
w_{11}	Stoffstromvektor Aufschließbares Substrat	$t\ h^{-1}$	f_{HYDR}^{VRBR}	Faktor Wasserbedarf Hydrolyse	-
s_{21}	Stoffstromvektor Schwefelsäure	$t\ h^{-1}$	$f_{GIPS/H2SO4}^{VRBR}$	Faktor Gips	-
z_{11}	Stoffstromvektor Gips	$t\ h^{-1}$			

Wie in der Einleitung erläutert, werden die Anteile des Weizenstrohs, die nicht zur Erzeugung von ABE-Produkten eingesetzt werden können, zur Bereitstellung von Prozessdampf beziehungsweise elektrischer Energie herangezogen. Dafür stehen in den Reststoffen der Maische nicht aufschließbare Cellulose beziehungsweise Hemicellulose, Lignin und weitere Bestandteile zur Verfügung. Im Folgenden werden die Anteile dieser Bestandteile in den Reststoffen der Maische auf Basis der Zusammensetzung von Weizenstroh abgeschätzt.

In Abbildung 4-8 sind die Weizenstrohbestandteile dargestellt. Der Anteil Cellulose und Hemicellulose ($c_{WZ_CLL}^{VRBR}$) beträgt 76,3 % (m/m), der von Lignin ($c_{WZ_LGN}^{VRBR}$) und sonstigen Bestandteilen ($c_{WZ_SNST}^{VRBR}$) 8,2 beziehungsweise 8,9 % (m/m). Die Ermittlung der nutzbaren Energie erfolgt in Kapitel 4.3.4.

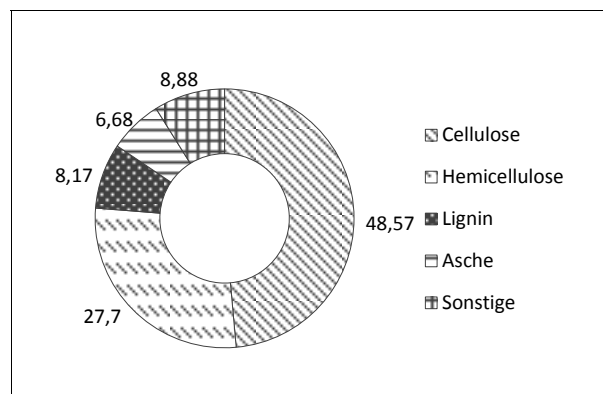


Abbildung 4-8: Zusammensetzung von Weizenstroh.
Darstellung auf Basis von Saha et al. (2005)

Der Anteil von Cellulose und Hemicellulose im eingehenden Weizenstroh ($c_{CLL_HCLL}^{VRBR}$) beträgt 76,3 % (m/m). Da Cellulose und Hemicellulose nicht vollständig in aufschließbare Zucker umgewandelt werden können, entspricht der in den Reststoffen der Maische zurückbleibende Anteil ($c_{RS_CLL}^{VRBR}$) der Differenz.

Gleichung 4.24

$$c_{CLL}^{VRBR} = \frac{c_{CLL_HCLL}^{VRBR} \cdot r_{11} - \frac{w_{11}}{1 + f_{HYDR}^{VRBR}}}{w_{21}}$$

mit:

c_{CLL}^{VRBR}	Konz. Cellulose / Hemicellulose in Maischereststoffen	$t \cdot t^{-1}$	$c_{CLL_HCLL}^{VRBR}$	Konz. Cellulose / Hemicellulose in Weizenstroh	
r_{11}	Stoffstromvektor Weizenstroh	$t \cdot h^{-1}$	w_{11}	Stoffstromvektor Aufschließbares Substrat	$t \cdot h^{-1}$
f_{HYDR}^{VRBR}	Faktor Wasserbedarf Hydrolyse	-	w_{21}	Stoffstromvektor Reststoffe in Maische	$t \cdot h^{-1}$

Der Anteil von Lignin ($c_{RS_LGN}^{VRBR}$) und sonstigen Bestandteilen ($c_{RS_SNST}^{VRBR}$) in den Reststoffen der Maische lassen sich auf der gleichen Basis wie folgt abschätzen.

Gleichung 4.25

$$c_{RS_l}^{VRBR} = c_{WZ_l}^{VRBR} \cdot \frac{w_{21}}{r_{11}} \quad \forall l \in L$$

mit:

$c_{RS_l}^{VRBR}$	Konzentration Lignin / Sonstige in Maischereststoffen	$t \cdot t^{-1}$	$c_{WZ_l}^{VRBR}$	Konzentration Lignin / Sonstige in Weizenstroh	$t \cdot t^{-1}$
w_{21}	Stoffstromvektor Reststoffe in Maische	$t \cdot h^{-1}$	r_{11}	Stoffstromvektor Weizenstroh	$t \cdot h^{-1}$

$$L = \{LGN; SNST\}$$

Ergebnis der Umsetzung

Die resultierenden Stoffströme der beschriebenen Umsetzung werden auf die Menge von einer t Weizenstroh (r_{11}) bezogen. Sie lassen sich wie folgt darstellen.

Tabelle 4-2: Stoffstromvektoren der Aktivität Biomassevorbereitung

Stoffstromvektor	Bezeichnung	Einheit	Input (-)	Output (+)
r_{11}	Weizenstroh	t h ⁻¹	-1	
r_{21}	Wasseranteil in feuchtem Weizenstroh	t h ⁻¹	-0,16	
s_{11}	Wasser	t h ⁻¹	-6,50	
s_{21}	Schwefelsäure	t h ⁻¹	-0,10	
s_{31}	Calciumhydroxid	t h ⁻¹	-0,08	
w_{11}	Aufschließbares Substrat	t h ⁻¹		0,64
w_{21}	Reststoffe in Maische	t h ⁻¹		0,46
w_{31}	Wasser in Maische	t h ⁻¹		6,64
z_{11}	Gips	t h ⁻¹		0,11

4.2.2 Fermentation

In der Batch-Fermentation (v_2) finden drei Prozessschritte statt, die, wie auch im vorherigen Kapitel, abschließend in Form eines tabellarischen Aktivitätsvektors dargestellt werden. Zuerst wird die vorbehandelte Stroh suspension aus der Biomassevorbereitung durch die Zugabe von Enzymen hydrolysiert. Anschließend erfolgt die Fermentation zu ABE-Produkten, die in-situ abgeführt werden. Dazu verfügen die Fermenter über eine Produktabtrennung mittels kreislaufgeführter Fermentationsgase (Gas-Stripping). Die in den Fermentern durch das Durchströmen des kreislaufgeführten Fermentationsgases erzeugte Agitation ersetzt dabei das Rührwerk. Abbildung 4-9 zeigt den Prozess in der Übersicht. Für die experimentelle Grundlage der Fermentation wird auf eine Versuchsreihe von Qureshi et al. (2007a) zurückgegriffen, die bereits zur Darstellung der Biomassevorbereitung herangezogen wurde. Das Vorgehen und die Ergebnisse Qureshis et al. zur Fermentation werden im Folgenden vorgestellt. Aufbauend darauf erfolgt die Übertragung auf die großtechnische Realisierung.

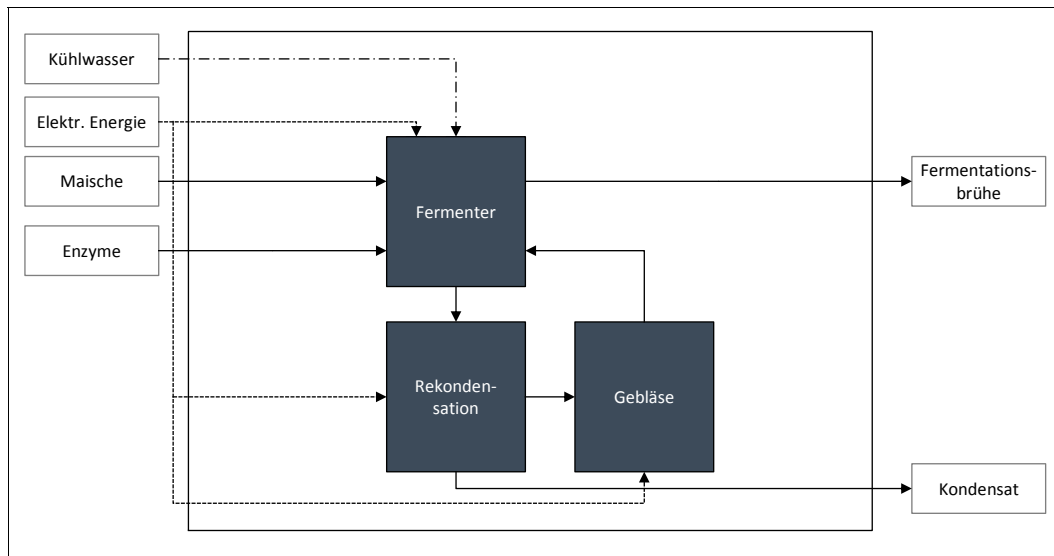


Abbildung 4-9: Prozesse sowie Stoff- und Energieströme der Fermentation

Experimentelle Grundlagen

Qureshi et al. (2007a) setzen der vorbehandelten Weizenstrohsuspension das Inokulum, Nährstoffe und Enzyme zu. Auf 55 g L^{-1} in der Suspension enthaltene aufschließbare Zucker²² werden 6 ml der Enzymlösungen Celluclast 1.5L, Novozyme 188 und Viscostar 150L hinzugefügt. Zu Beginn der Fermentation liegen $26,1 \text{ g L}^{-1}$ Zucker vor, die bereits während der Biomassevorbereitung freigesetzt wurden und für die Fermentation von Beginn an zur Verfügung stehen. Zeitgleich zur Fermentation werden weitere Zucker enzymatisch aufgeschlossen. Der Hydrolysegrad (G_{HYDR}^{FRMT}) des aufschließbaren Substrates beträgt 95 % (m/m). Der Fermenter wird ab der 23. Betriebsstunde mit den aufgefangenen Fermentationsgasen durchströmt und verringert den ABE-Gehalt bis zum Ende der Fermentation bei 72 h von etwa 10 auf unter 2 g L^{-1} . Dabei wird das aufgeschlossene Substrat mit einem ABE-Umsetzungsgrad (G_{ABE}^{FRMT}) von $0,41^{23} \text{ g}$ zu ABE-Produkten umgewandelt. Die Fermentationsrate der ABE-Produkte (R_{FRMT}^{FRMT}) beträgt dabei $0,31 \text{ g L}^{-1} \text{ h}^{-1}$.

Nachfolgend wird eine großtechnische Umsetzung des Versuches vorgeschlagen. Zunächst wird jedoch eine Abschätzung zur Einsetzbarkeit der Weizenstrohsuspension mit erhöhtem Biomasse/Wasser-Verhältnis von 15 % (m/m) vorgenommen (siehe Kapitel 4.2.1). Dabei wird zum einen die technische Verarbeitbarkeit der Suspension anhand der Viskositätsänderung untersucht, zum anderen die Auswirkung eines erhöhten Gehaltes an Inhibitoren auf die Fermentation betrachtet.

²² Für die Ausbeute an aufschließbaren Zuckern verweisen Qureshi et al. (2007a) auf eine andere Veröffentlichung (Qureshi, et al., 2007c)

²³ Pro kg Substrat wird die Zusammensetzung der ABE-Produkte mit 0,33 kg Aceton, 0,63 kg n-Butanol und 0,04 kg Ethanol angegeben (Qureshi, 2012b).

Rosgaard et al. (2007a) führten Versuche zum Viskositätsverhalten von Roggenstrohsuspensionen in Abhängigkeit des Biomasse/Wasser-Verhältnisses während einer enzymatischen Hydrolyse durch. Für die Hydrolyse werden die Enzyme Celluclast und Novozyme 188 mit einer im Vergleich zu Qureshi et al. (2007a) geänderten Zusammensetzung (Verzicht auf Viscostar 50 L), jedoch fast identischer Menge, eingesetzt. Dabei wurden unter anderem Proben mit den Biomasse/Wasser-Verhältnissen von 5, 10 und 15 % (m/m) untersucht. Erwartungsgemäß übertrifft die Viskosität der Proben mit einem Biomasse/Wasser-Verhältnis von 15 % (m/m) die der beiden anderen zu Beginn um ein Vielfaches. Innerhalb der ersten 6 h sind die Unterschiede am größten. Nach 24 h liegt die Viskosität der 15 % (m/m)-Probe noch etwa 30 % höher als die 5 % (m/m)-Probe zu Beginn. Nach 48 h weisen alle Proben sehr geringe Viskositäten von 20 – 54 mPa s⁻¹ auf.

Man kann davon ausgehen, dass die Ergebnisse Rosgaards et al. (2007a) in Bezug auf die Viskosität grundsätzlich auf das Verhalten von Weizenstroh übertragbar sind. Dies gilt insbesondere für die von Qureshi et al. (2007a) durchgeführte zusätzliche Zugabe des Enzyms Viscostar 50 L, durch das eine deutlich schnellere Verringerung des Viskosität erwartet werden kann. Für die Modellanlage wird daher angenommen, dass bei einem Biomasse/Wasser-Verhältnis von 15 % (m/m) eine Störung der Fermentation beziehungsweise des Gas-Strippings durch eine Verlängerung der Hydrolysedauer um weitere 24 h ausgeschlossen werden kann. Da die Fermentationsrate höher als die Verzuckerungsrate ist, besteht das Risiko der Verringerung des Hydrolysegrades durch Produkthemmung nicht.

Die Überprüfung einer möglichen Inhibierung kann nach einem ähnlichen Vorgehen vorgenommen werden. Ezeji et al. (2007) berichten, dass die für viele Mikroorganismen inhibitorisch wirkenden Bestandteile Furfural und Hydroxymethylfurfural (HMF) auf *Clostridium beijerinckii* BA101 stimulierend wirken. Das gleiche Ergebnis konnte auch von Qureshi et al. (2012a) für *Clostridium beijerinckii* P260 nachgewiesen werden. Es liegen drüber hinaus jedoch weitere Inhibitoren im Weizenstrohhydrolysat vor. Grundsätzlich besteht die Möglichkeit einer Entgiftung des Hydrolysats (vgl. hierzu: Cho et al. (2009), Purwadi et al. (2004), Jurardo et al. (2009)). Es ist jedoch nicht bekannt, inwieweit dabei auch die stimulierenden Bestandteile des Weizenstrohhydrolysats entfernt werden. Im Folgenden wird daher die Realisierung ohne eine Entgiftung überprüft.

Der Einfluss von Inhibitoren auf die Fermentation des Stammes *Clostridium beijerinckii* P260 wurde bislang nicht detailliert untersucht. Hingegen liegen zum Stamm *Clostridium beijerinckii* BA101 detaillierte Angaben vor (Ezeji, et al., 2007). Beide Stämme verhalten sich diesbezüglich so ähnlich, dass Qureshi et al. (2007b) zur Darstellung der Inhibitortoleranz von *Clostridium beijerinckii* P260 auf die Ergebnisse Ezejis et al. (2007) zu *Clostridium beijerinckii* BA101 zurückgreifen. Im Folgenden werden daher die Toleranzen von *Clostridium beijerinckii* BA101 ebenfalls für *Clostridium beijerinckii* P260 angenommen. Ferulasäure und Syringaldehyd weisen dabei die stärkste Wirkung auf und verringern den Umsetzungsgrad bereits ab einer Konzentration von 0,3 g L⁻¹ um etwa 90 % (Ezeji, et al., 2007).

Für andere Stämme der Clostridiaceae liegt jedoch bereits eine Reihe erfolgreicher Berichte über deutlich höhere Toleranzen durch zielgerichtete Mutation vor. Guo et al. (2012) untersuchten dahingehend den Stamm *Clostridium beijerinckii* NCIMB 8052, der wie *Clostridium beijerinckii* P260 eine Inhibierung gegenüber 0,5 g L⁻¹ Syringaldehyd und 0,5 g L⁻¹ Ferulasäure aufweist. Auf dieser Basis wurde durch zielgerichtete Mutation der Stamm *Clostridium beijerinckii* IB4 erzeugt. Im Gegensatz zum Ursprungsstamm weist er weder gegenüber Ferulasäure (0,5 g L⁻¹) noch Syringaldehyd (0,5 g L⁻¹) eine Inhibierung auf. Ähnliche Ergebnisse werden von Richmond (2010) berichtet. Er wies mit Hilfe einer weiteren Mutation aus *Clostridium beijerinckii* NCIMB 8052 nach, dass auch noch höhere Konzentration von Ferulasäure (0,75 g L⁻¹) und Syringaldehyd (1,0 g L⁻¹) ohne beziehungsweise mit nur geringer Einschränkung von 20 % toleriert werden.

Da Qureshi et al. (2007a) im Experiment den Gehalt an Ferulasäure und Syringaldehyd nicht bestimmen, kann diesbezüglich keine Aussage zu einem erhöhten Biomasse/Wasser-Verhältnisses gemacht werden. Im Folgenden wird daher eine Abschätzung vorgenommen.

Weizenstroh enthält etwa 2 mg g⁻¹ Ferulasäure. Davon werden in Abhängigkeit der Vorbehandlung²⁴ jedoch nur 0,4 mg g⁻¹ Ferulasäure im Hydrolysat freigesetzt (Tapin, et al., 2006). Die durchschnittliche Freisetzung entspräche beim von Qureshi et al. (2007a) eingesetzten Biomasse/Wasser-Verhältnis von 8,6 % (m/m) einem Gehalt von 0,03 g L⁻¹ Ferulasäure. Die vollständige Freisetzung würde ein Gehalt von 0,17 g L⁻¹ Ferulasäure bedeuten. Analog²⁵ enthält das Hydrolysat bei einem Biomasse/Wasser-Verhältnis von 15 % (m/m) durchschnittlich 0,06 g L⁻¹ und maximal 0,34 g L⁻¹ Ferulasäure.

Basierend auf den Ergebnissen Ezejis et al. (2007) würde die Produktivität von *Clostridium beijerinckii* P260 bei maximaler Freisetzung auf etwa 10 % sinken. Wie die Versuchsreihen zur intendierten Freisetzung Tapins et al. (2006) zeigen, kann eine vollständige Freisetzen jedoch praktisch ausgeschlossen werden. Bei durchschnittlicher Freisetzung von 0,06 g L⁻¹ Ferulasäure ist die Inhibierung von *Clostridium beijerinckii* P260 daher auch ohne eine gerichtete Mutation unwahrscheinlich. Mit einem mutierten Stamm kann sie sicher vermieden werden.

Eine ähnliche Abschätzung lässt sich für Syringaldehyd durchführen. Lawther et al. (1996) behandeln Weizenstroh unter deutlich härteren Bedingungen²⁶ als Qureshi et al. (2007a). Sie lösen damit 0,99 % (m/m) des enthaltenen Syringaldehyds aus dem Weizenstroh heraus. Bezogen darauf beträgt die maximale Syringaldehydkonzentration bei einem Biomasse/Wasser-Verhältnis von 8,6 % (m/m) 0,85 g L⁻¹ Syringaldehyd. Qureshi et al. berichten jedoch von keiner Inhibierung. Da jedoch bereits unterhalb von 0,3 g L⁻¹ Syringaldehyd eine Inhibierung um 90 % auftritt, kann davon ausgegangen werden, dass im Experiment weit weniger Syringaldehyd freigesetzt wurde. Nimmt man dennoch an, dass der tatsächliche Ge-

²⁴ Vorbehandlung mit 20 % (m/m) Natriumhydroxid bei 100 °C für 60 Minuten (Tapin, et al., 2006)

²⁵ Andere Quellen geben geringere Gehalte an freigesetzter Ferulasäure von 0,14 mg g⁻¹ (Kaparaju, et al., 2009) und 0,115 mg g⁻¹ (Thomsen, et al., 2009) an

²⁶ Vorbehandlung mit 4,9 % (m/m), Säure/Stroh-Verhältnis von 196 % (m/m) bei 99 °C für 120 Minuten (Lawther, et al., 1996)

halt im Experiment knapp unterhalb der Inhibierungsgrenze bei $0,28 \text{ g L}^{-1}$ Syringaldehyd gelegen hat, so beträgt die Konzentration für ein Biomasse/Wasser-Verhältnis von 15 % (m/m) maximal $0,49 \text{ g L}^{-1}$ Syringaldehyd.

Wie oben gezeigt, wurde prinzipiell nachgewiesen, dass eine gerichtete Mutation hinsichtlich einer erhöhten Inhibitortoleranz für *Clostridium beijerinckii* möglich ist. Der Typ *Clostridium beijerinckii* P260 stammt aus der ehemaligen südafrikanischen n-Butanolproduktion (Qureshi, 2010b). Er ist bislang nicht auf die Erfordernisse der Fermentation von Lignocellulosehydrolysaten optimiert worden. Wie von Guo et al. (2012) und Richmond (2010) zeigen, liegen bereits Stämme vor, die auch bei maximaler Freisetzung ($0,3 \text{ g L}^{-1}$ Ferulasäure; $0,49 \text{ g L}^{-1}$ Syringaldehyd) keine Einschränkungen aufweisen. Selbst wenn der Originalstamm *Clostridium beijerinckii* P260 durch Syringaldehyd bei einem Biomasse/Wasser-Verhältnis von 15 % (m/m) inhibiert würde, kann eine vollständige Inhibitortoleranz durch gerichtete Mutation erzeugt werden.

Für die im Folgenden betrachtete Fermentation wird daher ein Biomasse/Wasser-Verhältnis von 15 % (m/m) und eine um 24 h verlängerte Hydrolysedauer beziehungsweise Fermentationsdauer angenommen. Zur Realisierung höherer Verhältnisse besteht jedoch weiterer Forschungsbedarf.

Umsetzung

Im Folgenden wird eine großtechnische Umsetzung des Versuches von Qureshis et al. (2007a) umgesetzt. Das für die simultane Hydrolyse und Fermentation bereitzustellende Gesamtvolumen (V^{FRMT}) ist von der Menge des aufschließbaren Substrates (w_{12}) und den Umsatzraten der Hydrolyse (R_{HYDR}^{FRMT}) und Fermentation (R_{FRMT}^{FRMT}) abhängig. Die Hydrolyserate (R_{HYDR}^{FRMT}) wird definiert als die Menge Zucker, die in einem Zeitraum von einer Stunde umgesetzt werden kann. Die Fermentationsrate (R_{FRMT}^{FRMT}) entspricht der auf das Substrat bezogenen Produktivität. Sie gibt die Menge Zucker an, die im Zeitraum einer Stunde zu ABE-Produkten umgesetzt werden kann. Die Fermentergröße ist am kleinsten, wenn die Umsatzraten der Hydrolyse (R_{HYDR}^{FRMT}) und der Fermentation (R_{FRMT}^{FRMT}) identisch sind. Für das insgesamt zur Verfügung zu stellende Fermentationsvolumen (V^{FRMT}) gilt in Abhängigkeit der Dichte der Maische (ρ^{FRMT}) der in Gleichung 4.26 dargestellte Zusammenhang. Qureshi et al. (2007a) geben eine Fermentationsrate (R_{FRMT}^{FRMT}) von $0,76^{27} \text{ g L}^{-1} \text{ h}^{-1}$ Zucker an.

Aus anderen Versuchsreihen mit Weizenstrohhydrolysaten und Glukosezusatz die einem ähnlichen Gesamtzuckergehalt entsprechen, sind deutlich höhere Fermentationsraten von $1,43^{28} \text{ g L}^{-1} \text{ h}^{-1}$ Zucker bekannt. Die für die Modellanlage angenommene Fermentationsrate von $0,76 \text{ g L}^{-1} \text{ h}^{-1}$ Zucker ist daher als eher konservativ einzustufen.

Als Voraussetzung für die Erhöhung des Biomasse/Wasser-Verhältnisses auf 15 % (m/m) wurde eine um 20 h erhöhte Hydrolysedauer identifiziert. Da bei einem erhöhtem Biomasse-

²⁷ Qureshi et al. (2007a) geben eine Menge von $0,31 \text{ g L}^{-1} \text{ h}^{-1}$ ABE-Produkte bei einem Zuckernutzungsgrad von $0,41 \text{ g g}^{-1}$ an, was einer Fermentationsrate von $0,756 \text{ g L}^{-1} \text{ h}^{-1}$ Zucker entspricht

²⁸ Qureshi et al. (2007c) geben eine Menge von $0,60 \text{ g L}^{-1} \text{ h}^{-1}$ ABE-Produkte bei einem Zuckernutzungsgrad von $0,42 \text{ g g}^{-1}$ an, was einer Fermentationsrate von $1,429 \text{ g L}^{-1} \text{ h}^{-1}$ Zucker entspricht

se/Wasser-Verhältnis jedoch mehr Substrat pro Volumen aufgeschlossen wird, kann im Vergleich zu Qureshi et al. (2007a) eine erhöhte Hydrolyserate (R_{HYDR}^{FRMT}) von $0,99^{29} \text{ g L}^{-1} \text{ h}^{-1}$ Zucker erwartet werden. Qureshi et al. berichten im Experiment, dass eine geringe Hydrolyserate die Fermentationsrate und damit das Wachstum der Mikroorganismen limitiert. Durch die erhöhte Hydrolyserate bei einem gesteigerten Biomasse/Wasser-Verhältnis ist daher eine erhöhte Fermentationsrate zu vermuten. Diese wird jedoch nicht weiter betrachtet.

Gleichung 4.26

$$V^{FRMT} = \max\{V_{HYDR}^{FRMT}; V_{FRMT}^{FRMT}\} = \max\left\{\frac{w_{12}}{R_{HYDR}^{FRMT}}; \frac{w_{12}}{R_{FRMT}^{FRMT}}\right\} \cdot \frac{1.000 \text{ g} \cdot \text{m}^3}{\text{t} \cdot \text{L}}$$

mit:

V^{FRMT}	Volumen simultane Fermentation	m^3	V_{HYDR}^{FRMT}	Minimum Hydrolysevolumen	m^3
V_{FRMT}^{FRMT}	Minimum Fermentationsvolumen	m^3	w_{12}	Stoffstromvektor Aufschließbares Substrat	t h^{-1}
R_{HYDR}^{FRMT}	Hydrolyserate	$\text{g L}^{-1} \text{ h}^{-1}$	R_{FRMT}^{FRMT}	Fermentationsrate	$\text{g L}^{-1} \text{ h}^{-1}$

Der Stoffstromvektor an Enzymen (s_{42}) ergibt sich aus der Menge des aufschließbaren Substrates und dem Zuschlagsfaktor an Enzymen (f_{ENZY}^{FRMT}) (siehe Gleichung 4.27). Qureshi et al. (2007a) setzen jeweils 6 g der Enzymlösungen Celluclast 1.5L, Novozyme 188 und Viscostar 150L für 55 g aufschließbares Substrat ein. Qureshi et al. geben zwar die Menge der eingesetzten Enzymlösung an, jedoch ist der Gehalt an enthaltenen Enzymen unbekannt.

Zur Ermittlung des tatsächlichen Enzymbedarfs wird daher eine Abschätzung vorgenommen, indem die Enzymgehalte auf Basis einer Reihe wissenschaftlicher Publikationen untersucht werden (vgl. hierzu: Arantes et al. (2011), Kabel et al. (2006), Nieves et al. (1998)). Da die Angaben schwanken, wird nur das jeweils höchste Ergebnis für eine Maximalabschätzung herangezogen. Nieves et al. geben für Celluclast 1.5L einen Enzymgehalt von 166 mg ml^{-1} an. Der Enzymgehalt von Novozyme 188 beträgt laut Arantes et al. (2011) 233 mg ml^{-1} . Viscostar 150L enthält 163 mg ml^{-1} (Kabel, et al., 2006). Auf dieser Basis beträgt der Zuschlagsfaktor der Enzyme (f_{ENZY}^{FRMT}) $0,06 \text{ t t}^{-1}$.

²⁹ Qureshi et al. (2007a) geben eine Menge von 52,4 g aufschließbaren Zuckern an, die in 72 h hydrolysiert werden. Bei zusätzlichen 20 h Hydrolysedauer entspricht jedoch einer Menge von 91,40 g aufschließbarer Zucker entspricht das einer Hydrolyserate von $0,993 \text{ g L}^{-1} \text{ h}^{-1}$ Zucker

Gleichung 4.27

$$s_{42} = w_{12} \cdot f_{ENZY}^{FRMT}$$

mit:

s_{42}	Stoffstromvektor Enzyme	$t \, h^{-1}$	w_{12}	Stoffstromvektor Aufschließbares Substrat	$t \, h^{-1}$
f_{ENZY}^{FRMT}	Faktor Enzyme	$t \, t^{-1}$			

Durch die erhöhte Hydrolysedauer wird die Durchmischung des Fermenters verbessert. Es wird zwar mehr Biomasse hydrolysiert, jedoch steht deutlich mehr Zeit zur Verfügung. Darüber hinaus ist die absolute Enzymkonzentration im Vergleich zur Versuchsanordnung deutlich höher. Qureshi et al. (2007b) zeigen in einem weiteren Experiment, dass eine verlängerte Hydrolysedauer zu einem vollständigen Aufschluss der Weizenstrohsuspension führt. Dieses Ergebnis lässt sich zwar nicht unmittelbar auf die Hydrolyse der Modellanlage übertragen. Es kann jedoch davon ausgegangen werden, dass sich der im Experiment gezeigte Hydrolysegrad (G_{HYDR}^{FRMT}) von 95 % (m/m) nicht verringert.

Für die Übertragung der experimentellen Ergebnisse Qureshis et al. (2007a) auf die Modellanlagen ist keine Verringerung des ABE-Umsetzungsgrades (G_{ABE}^{FRMT}) von $0,41 \, g \, g^{-1}$ zu erwarten. Die ABE-Produkte werden mit Hilfe von Gas-Stripping aus der Fermentationsbrühe entfernt und kondensiert. Die abführbare Menge an ABE-Produkte (w_{42}) muss jedoch um Verluste durch nicht entfernte ABE-Produkten (w_{42}^{VRLST}) korrigiert werden. Der Stoffstromvektor der tatsächlich entfernbaren ABE-Produkte beträgt demnach:

Gleichung 4.28

$$w_{42} = w_{12} \cdot G_{HYDR}^{FRMT} \cdot G_{ABE}^{FRMT} - w_{42}^{VRLST}$$

mit:

w_{42}	Stoffstromvektor ABE-Produkte	$t \, h^{-1}$	w_{12}	Stoffstromvektor Aufschließbares Substrat	$t \, h^{-1}$
G_{HYDR}^{FRMT}	Hydrolysegrad	$t \, t^{-1}$	G_{ABE}^{FRMT}	ABE-Umsetzungsgrad	$t \, t^{-1}$
w_{42}^{VRLST}	Stoffstromvektor Verlust ABE-Produkte	$t \, h^{-1}$			

Durch das Gas-Stripping werden nicht nur ABE-Produkte, sondern auch Wasser entfernt. Im Hinblick auf den Energieaufwand der Separation sollte der Wassergehalt im Kondensat möglichst gering gehalten werden. Dieser wird maßgeblich von der Kondensationstemperatur bestimmt (Lu, 2011). Wu et al. (2007) gehen von einer Kondensationstemperatur von $2 \, ^\circ C$ aus, für die die Konzentration von Wasser im Kondensat (c_{H2O}^{FRMT}) etwa 25 % (m/m) beträgt. Das im Kondensat enthaltene Wasser (w_{52}) ergibt sich damit zu:

Gleichung 4.29

$$w_{52} = w_{42} \cdot \frac{c_{H_2O}^{FRMT}}{1 - c_{H_2O}^{FRMT}}$$

mit:

w_{52}	Stoffstromvektor Wasser in Kondensat	$t\ h^{-1}$	w_{42}	Stoffstromvektor ABE-Produkte	$t\ h^{-1}$
$c_{H_2O}^{FRMT}$	Konzentration Wasser in Kondensat	$t\ t^{-1}$			

Das in der Fermentationsbrühe zurückbleibende Wasser (w_{72}) entspricht der Differenz des Wassers in der Maische (w_{32}) und dem abgeführten Wasserstrom im Kondensat (w_{52}). Es lässt sich wie folgt darstellen:

Gleichung 4.30

$$w_{72} = w_{32} - w_{52}$$

mit:

w_{72}	Stoffstromvektor Wasser Fermentationsbrühe	$t\ h^{-1}$	w_{32}	Stoffstromvektor Wasser in Maische	$t\ h^{-1}$
w_{52}	Stoffstromvektor Wasser in Kondensat	$t\ h^{-1}$			

Auf Basis des Wassers in der Fermentationsbrühe (w_{72}) kann die Abschätzung der nicht zu entfernenden ABE-Produkte durchgeführt werden. Aus Qureshi et al. (2007a) geht hervor, dass die Strippingrate höher als die Fermentationsrate ist. Die ABE-Konzentration sinkt daher nach Inbetriebnahme des Gas-Strippings (nach 23 h) von $10\ g\ L^{-1}$ auf $1,5\ g\ L^{-1}$ nach 72 h. Um dem Aufbau einer vergleichbar hohen ABE-Konzentration in der Modellanlage vorzubeugen und eine ausreichende Agitation zu bewirken, ist der Gas-Stripping-Betrieb für die Modellanlage bereits zu einem früheren Zeitpunkt vorgesehen. Für die Modellanlage wird eine ABE-Verlustkonzentration (c_{RABE}^{FRMT}) von $0,5\ g\ L^{-1}$ beziehungsweise $0,0005\ t\ m^{-3}$ angenommen³⁰. Für eine Dichte der Fermentationsbrühe von $1.000\ kg\ m^{-3}$ beträgt der Verlust an ABE-Produkten (w_{42}^{VRLST}) $0,0005\ t\ t^{-1}$ und lässt sich demnach wie folgt abschätzen:

³⁰ Aceton und Ethanol werden während der Eindampfung der Fermentationsbrühe in der Wasseraufbereitung durch ihre geringen Siedepunkte von 56 bzw. 78 °C gemeinsam mit Wasser annähernd vollständig abgetrennt. Sie werden somit im Kreislauf geführt und gehen nicht verloren. Eine Differenzierung der Verluste nach Aceton, n-Butanol und Ethanol wird im Folgenden jedoch nicht vorgenommen.

Gleichung 4.31

$$w_{42}^{VRLST} = w_{72} \cdot c_{RABE}^{FRMT}$$

mit:

w_{42}^{VRLST}	Stoffstromvektor Verlust ABE-Produkte	$t\ h^{-1}$	w_{72}	Stoffstromvektor Wasser in Fermentationsbrühe	$t\ h^{-1}$
c_{RABE}^{FRMT}	Verlustkonzentration ABE	$t\ t^{-1}$			

Für das Aufkommen von Kohlenstoffdioxid (CO_2) und Wasserstoff (H_2) während der Fermentation liefert die Literatur für das Substrat Weizenstroh keine einheitlichen Angaben. Grundsätzlich ist deren Menge abhängig von der Menge gebildeter Syntheseprodukte. Da unterschiedliche Synthesepfade zur Verfügung stehen, lässt sich jedoch kein direkter stöchiometrisch eindeutiger Zusammenhang herstellen (Jones, et al., 1986).

Die Angaben schwanken zwischen 0,48 g (Lenz, et al., 1980) und 0,57 g (Beesch, 1952) CO_2 pro g Substrat. Für die Bildung von Kohlenstoffdioxid wird im Folgenden ein Umwandlungsfaktor ($f_{CO_2}^{FRMT}$) von 0,5 angenommen. Für die Bildung von Wasserstoff sind in der Literatur folgende Werte bekannt: 0,012 g (Lenz, et al., 1980), 0,015 g (Beesch, 1952) und 0,021 g (Liu, et al., 2009) H_2 pro g Substrat. Es wird im Folgenden angenommen, dass der Faktor zur Bildung von Wasserstoff ($f_{H_2}^{FRMT}$) durchschnittlich 0,016 beträgt. Die Menge gasförmiger Emissionen (z_{22}) ergibt sich damit zu:

Gleichung 4.32

$$z_{22} = w_{12} \cdot (f_{CO_2}^{FRMT} + f_{H_2}^{FRMT})$$

mit:

z_{22}	Stoffstromvektor Gasförmige Emissionen	$t\ h^{-1}$	w_{12}	Stoffstromvektor Aufschließbares Substrat	$t\ h^{-1}$
$f_{CO_2}^{FRMT}$	Faktor CO_2 -Bildung	-	$f_{H_2}^{FRMT}$	Faktor H_2 -Bildung	-

Die Reststoffe in der Fermentationsbrühe bestehen aus den Reststoffen in der Maische, den Enzymen, ungenutztem Substrat und Zellmasse. Die abschließende Zellkonzentration (c_{ZELL}^{FRMT}) der Fermentationsbrühe kann von Qureshi et al. (2007a) aufgrund der durch Weizenstrohydrolysat verursachte Trübung nicht ermittelt werden. Sie ist jedoch aus anderen Versuchen mit gefiltertem Weizenstrohydrolysat bekannt und beträgt $1,15\ g\ L^{-1}$ beziehungsweise $0,00115\ kg\ m^{-3}$ (Qureshi, et al., 2007c). Vereinfachend wird der Stoffstromvektor der Reststoffe (w_{62}) auf Basis der eingehenden Stoffströme dargestellt:

Gleichung 4.33

$$w_{62} = w_{22} + s_{42} + w_{12} - w_{42} - z_{22}$$

mit:

w_{62}	Stoffstromvektor Reststoffe in Fermentationsbrühe	$t \cdot h^{-1}$	w_{22}	Stoffstromvektor Reststoffe in Maische	$t \cdot h^{-1}$
s_{42}	Stoffstromvektor Enzyme	$t \cdot h^{-1}$	w_{12}	Stoffstromvektor Aufschließbares Substrat	$t \cdot h^{-1}$
w_{42}	Stoffstromvektor ABE-Produkte	$t \cdot h^{-1}$	z_{22}	Stoffstromvektor Gasförmige Emissionen	$t \cdot h^{-1}$

Für die Erzeugung von Prozessdampf und elektrischer Energie stehen somit folgende Stoffströme zur Verfügung: Nicht hydrolysierbare Cellulose und Hemicellulose, Lignin und sonstige Strohbestandteile (siehe Kapitel 4.2.1), Zellmasse, nicht umgesetzte Zucker, Enzyme und ABE-Verluste. Im Folgenden wird deren Gehalt in den Reststoffen der Fermentationsbrühe abgeschätzt. Die Konzentrationen nicht hydrolysierbarer Cellulose und Hemicellulose ($c_{RS_CLL}^{FRMT}$), von Lignin ($c_{RS_LGN}^{FRMT}$) und sonstigen Strohbestandteilen ($c_{RS_SNST}^{FRMT}$) ergeben sich wie folgt.

Gleichung 4.34

$$c_{RS_l}^{FRMT} = c_{RS_l}^{FRMT} \cdot \frac{w_{21}}{r_{11}} \quad \forall l \in L$$

mit:

$c_{RS_l}^{VRBR}$	Konzentration in Maische-reststoffen	$t \cdot t^{-1}$	$c_{WZ_l}^{VRBR}$	Konzentration in Weizenstroh	$t \cdot t^{-1}$
w_{21}	Stoffstromvektor Reststoffe in Maische	$t \cdot h^{-1}$	r_{11}	Stoffstromvektor Weizenstroh	$t \cdot h^{-1}$

$$L = \{CLL; LGN; SNST\}$$

Die Enzymkonzentration (c_{ENZY}^{FRMT}) entspricht dem Quotienten aus Enzymen und Wasser in der Maische. Die Konzentration an Zellmasse in der Fermentationsbrühe (c_{ZELL}^{FRMT}) wurde ebenso wie die der nicht abgetrennten ABE-Produkte³¹ (c_{RABE}^{FRMT}) bereits oben ermittelt. Der Anteil der Enzyme ($c_{RS_ENZY}^{FRMT}$), der Zellmasse ($c_{RS_ZELL}^{FRMT}$) und ABE-Produkte ($c_{RS_RABE}^{FRMT}$) in den Reststoffen der Fermentationsbrühe kann demnach wie folgt abgeschätzt werden.

³¹ Aceton und Ethanol werden während der Eindampfung der Fermentationsbrühe in der Wasseraufbereitung durch ihre geringen Siedepunkte von 56 bzw. 78 °C gemeinsam mit Wasser annähernd vollständig abgetrennt. Für n-Butanol trifft das in diesem Maße nicht zu. Der tatsächlich zur Verfügung stehende Anteil ist Gegenstand der Wasseraufbereitung.

Gleichung 4.35

$$c_{RS_l}^{FRMT} = c_l^{FRMT} \cdot \frac{w_{21}}{w_{27}} \quad \forall l \in L$$

mit:

$c_{RS_l}^{FRMT}$	Konzentration in Maischereststoffen	$t \cdot t^{-1}$	c_l^{FRMT}	Konzentration in Wasser in Fermentationsbrühe	$t \cdot t^{-1}$
w_{21}	Stoffstromvektor Reststoffe in Maische	$t \cdot h^{-1}$	w_{27}	Stoffstromvektor Wasser in Fermentationsbrühe	$t \cdot h^{-1}$

$L = \{ENZY; ZELL; RABE\}$

Der Anteil zwar aufgeschlossener jedoch nicht umgesetzter Zucker in den Reststoffen der Fermentationsbrühe ($c_{RS_ZCKR}^{FRMT}$) ergibt sich wie folgt.

Gleichung 4.36

$$c_{RS_ZCKR}^{FRMT} = w_{12} \cdot (1 - G_{HYDR}^{FRMT})$$

mit:

$c_{RS_ZCKR}^{FRMT}$	Konzentration Zucker in Maischereststoffen	$t \cdot t^{-1}$	w_{12}	Stoffstromvektor Auf- schließbares Substrat	$t \cdot h^{-1}$
G_{HYDR}^{FRMT}	Hydrolysegrad	$t \cdot t^{-1}$			

Ergebnis der Umsetzung

In der Modellierung werden unvergorene Zucker, Zellmasse und sonstige Restbestandteile den Reststoffen in der Maische zugeordnet. Sie enthält ebenfalls das aus der Lignocellulose herausgelöste Lignin. Die resultierenden Stoffstromvektoren der Fermentation werden auf die Menge von einer t Substrat (w_{12}) bezogen. Tabelle 4-3 fasst die Stoffstromvektoren zusammen.

Tabelle 4-3: Stoffstromvektoren der Aktivität Fermentation

Stoffstromvektor	Bezeichnung	Einheit	Input (-)	Output (+)
w_{12}	Aufschließbares Substrat	$t\ h^{-1}$	-1	
w_{22}	Reststoffe in Maische	$t\ h^{-1}$	-0,72	
w_{32}	Wasser in Maische	$t\ h^{-1}$	-10,38	
s_{42}	Enzyme	$t\ h^{-1}$	-0,06	
w_{42}	ABE-Produkte in Kondensat	$t\ h^{-1}$		0,39
w_{52}	Wasser in Kondensat	$t\ h^{-1}$		0,13
z_{22}	Gasförmige Emissionen	$t\ h^{-1}$		0,52
w_{62}	Reststoffe in Brühe	$t\ h^{-1}$		0,87
w_{72}	Wasser in Brühe	$t\ h^{-1}$		10,25

4.2.3 Separation

In der Separation (v_3) werden die in der Fermentation kondensierten ABE-Produkte und Wasser getrennt. Das Wasser wird im Kreislauf der Biomasseaufbereitung zugeführt und die separierten ABE-Produkte in das Tanklager geleitet (siehe Abbildung 4-10).

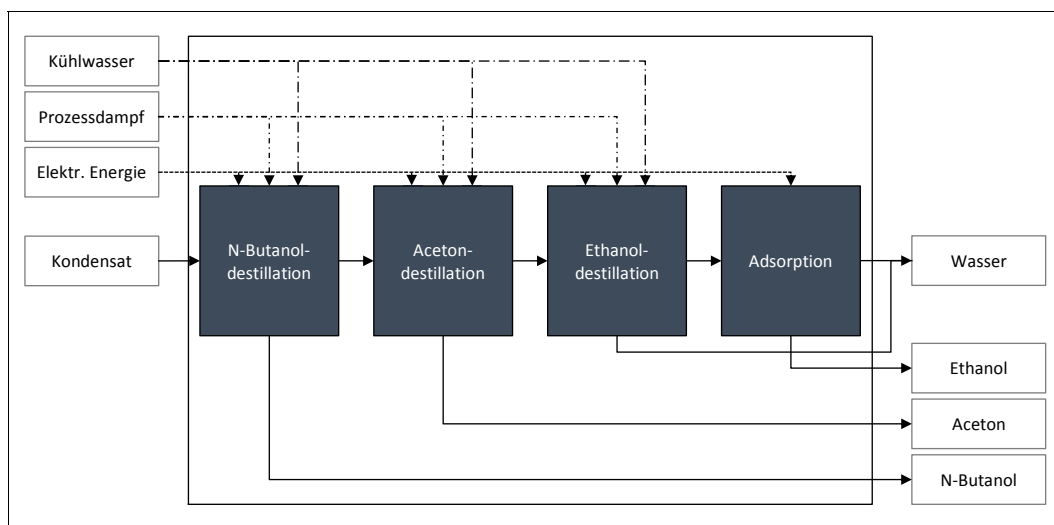


Abbildung 4-10: Prozesse sowie Stoff- und Energieströme der Separation

Experimentelle Grundlagen

Für die Trennung kommen verschiedene Destillationskolonnen und Adsorber zum Einsatz. Es existiert eine Reihe neuartiger Konzepte zur Produktabtrennung (vgl. hierzu: Kraemer et al. (2011), Mariano et al. (2011), Oudshoorn et al. (2009)), deren Einsatz im Vergleich zur Destillation energieeffizienter ist. Bislang liegen in der Literatur jedoch keine Hinweise auf die erfolgreiche industrielle Umsetzung dieser Verfahren vor (siehe Kapitel 2.4.3). Die Destillation gilt als ein robustes Trennungungsverfahren und wurde bereits über Jahre erfolgreich in der n-Butanolherstellung eingesetzt (Jones, et al., 1986). Wu et al. (2007) modellierten die Destillation von kondensierten ABE-Produkten mittels einer Flowsheeting-Software. Die folgende Auslegung basiert auf diesen Ergebnissen.

Umsetzung

Wu et al. (2007) legen die Destillation auf den gleichen Wasseranteil im Kondensat (25 % (m/m)) aus, wie er auch für die Modellanlage angenommen wird (siehe 4.2.2). In der Separation werden die ABE-Produkte und Wasser mittels fraktionierter Destillation getrennt (siehe Abbildung 4-10). Die ABE-Produkte Aceton, n-Butanol und Ethanol liegen in den Konzentrationen (c_{ACTN}^{SPRT}) 33 % (m/m), (c_{NBTL}^{SPRT}) 63 % (m/m) und (c_{ETHN}^{SPRT}) 4 % (m/m) vor (siehe Kapitel 4.2.2). Die erste Destillationskolonne trennt die Kopfprodukte Aceton, Ethanol und Wasser vom Sumpfprodukt n-Butanol. N-Butanol liegt danach mit einer Reinheit von 99,5 % (m/m) vor. Für die Modellbildung wird angenommen, dass darin 0,5 % (m/m) Wasser enthalten sind. Der Stoffstrom von n-Butanol (y_{13}) ergibt sich wie folgt:

Gleichung 4.37

$$y_{13} = c_{NBTL}^{SPRT} \cdot w_{43}$$

mit:

y_{13}	Stoffstromvektor n-Butanol	$t \cdot h^{-1}$	c_{NBTL}^{SPRT}	Konzentration n-Butanol in ABE-Produkten	$t \cdot t^{-1}$
w_{43}	Stoffstromvektor ABE-Produkte	$t \cdot h^{-1}$			

In der zweiten Destillationskolonne wird das Kopfprodukt Aceton (99,5 % (m/m)) abgezogen. Auch hier wird angenommen, dass der Strom 0,5 % (m/m) Wasser enthält. Im Sumpf verbleiben Wasser und Ethanol. Der Stoffstrom von Aceton (y_{23}) ergibt sich damit zu:

Gleichung 4.38

$$y_{23} = w_{43} \cdot c_{ACTN}^{SPRT}$$

mit:

y_{23}	Stoffstromvektor Aceton	$t \ h^{-1}$	w_{43}	Stoffstromvektor ABE-Produkte	$t \ h^{-1}$
c_{ACTN}^{SPRT}	Konzentration Aceton in ABE-Produkten	$t \ t^{-1}$			

In einer dritten Destillationskolonne wird die Konzentration des Ethanol (c_{AZTR}^{SPRT}) auf 94,4 % (m/m) erhöht. Ethanol, Wasser und geringe Restbestandteile Aceton bilden ein azeotropes Gemisch, das sich destillativ nicht trennen lässt. Über eine anschließende Adsorptionseinheit wird Ethanol mit der Hilfe von Molekularsieben auf 99,5 % (m/m) Reinheit aufbereitet. Dafür stehen zwei Adsorbereinheiten zur wechselnden Benutzung zur Verfügung. Der jeweils nicht in Betrieb befindliche wird thermisch regeneriert. Es wird angenommen, dass der Ethanolstrom (y_{23}) 0,5 % (m/m) Wasser enthält:

Gleichung 4.39

$$y_{33} = w_{43} \cdot c_{ETNL}^{SPRT}$$

mit:

y_{33}	Stoffstromvektor Ethanol	$t \ h^{-1}$	w_{43}	Stoffstromvektor ABE-Produkte	$t \ h^{-1}$
c_{ETNL}^{SPRT}	Konzentration Ethanol in ABE-Produkten	$t \ t^{-1}$			

Das bei der Destillation und Adsorption abgetrennte Wasser wird erneut der Biomassevorbereitung zugeführt. Der Stoffstromvektor (s_{13}) ergibt sich aus dem eingehenden Wasser im Kondensat und der Differenz der eingehenden und separierten ABE-Produkte:

Gleichung 4.40

$$s_{13} = w_{53} + w_{43} - y_{13} - y_{23} - y_{33}$$

mit:

s_{13}	Stoffstromvektor Wasser	$t \ h^{-1}$	w_{53}	Stoffstromvektor Wasser in Kondensat	$t \ h^{-1}$
w_{43}	Stoffstromvektor ABE-Produkte	$t \ h^{-1}$	y_{13}	Stoffstromvektor n-Butanol	$t \ h^{-1}$
y_{23}	Stoffstromvektor Aceton	$t \ h^{-1}$	y_{33}	Stoffstromvektor Ethanol	$t \ h^{-1}$

Ergebnis der Umsetzung

Die resultierenden Stoffstromvektoren der Separation werden auf die Menge von einer t ABE-Produkte (w_{43}) bezogen. Tabelle 4-4 fasst die Stoffstromvektoren zusammen.

Tabelle 4-4: Stoffstromvektoren der Aktivität Separation

Stoffstromvektor	Bezeichnung	Einheit	Input (-)	Output (+)
w_{43}	ABE-Produkte in Kondensat	$t\ h^{-1}$	-1	
w_{53}	Wasser in Kondensat	$t\ h^{-1}$	-0,33	
y_{13}	n-Butanol, 99,5 % (m/m)	$t\ h^{-1}$		0,63
y_{23}	Aceton, 99,5 % (m/m)	$t\ h^{-1}$		0,33
y_{33}	Ethanol, 99,5 % (m/m)	$t\ h^{-1}$		0,04
s_{13}	Wasser	$t\ h^{-1}$		0,33

4.2.4 Wasseraufbereitung

Aktivität v_4 umfasst die Wasseraufbereitung der Fermentationsbrühe und die damit verbundene Erzeugung von Prozesswärme. Der größte Teil des aufbereiteten Wassers verbleibt im Kreislauf und wird erneut der Biomassevorbereitung zugeführt. Zur Bereitstellung von Prozessdampf werden alle bei der Aufbereitung abgetrennten oder entstehenden Rückstände herangezogen.

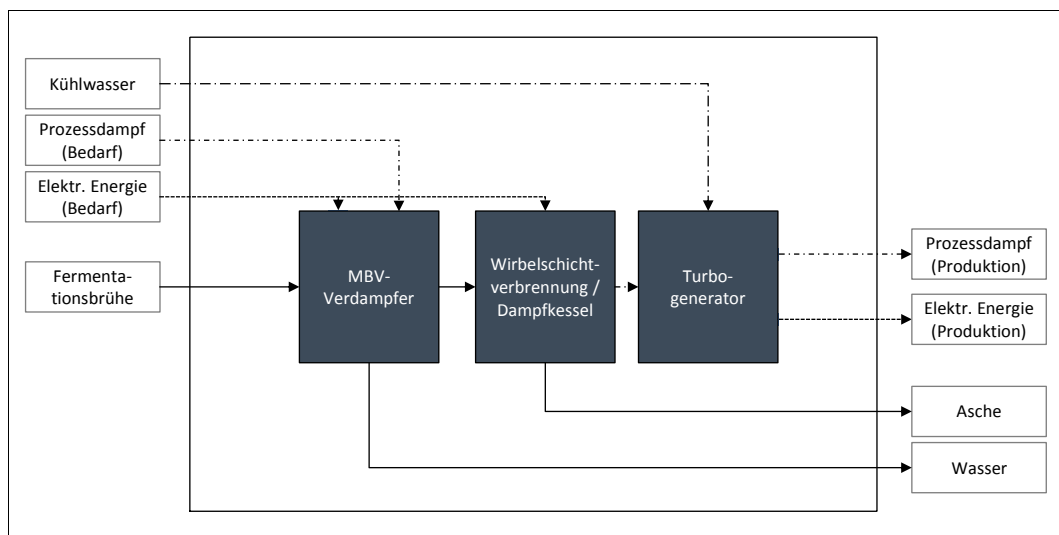


Abbildung 4-11: Prozesse sowie Stoff- und Energieströme der Wasseraufbereitung

Experimentelle Grundlagen

Wie in Kapitel 4.2.4 diskutiert, enthält die Fermentationsbrühe eine Reihe von Inhibitoren. Der zu identifizierende Recyclingprozess muss daher in der Lage sein, alle Inhibitoren vollständig abzutrennen oder in ungiftige Substanzen umzuwandeln. Eine unvollständige Ent-

fernung führt zu einer Akkumulierung der Inhibitoren im System, die sich einschränkend auf die Fermentation auswirkt oder diese vollständig inhibiert. In der Literatur werden zur Aufbereitung von Fermentationsabwässern häufig anaerobe und aerobe Gärung eingesetzt. Es liegt jedoch kein Nachweis einer vollständigen Entfernung aller Inhibitoren durch diese Methode vor. Darüber hinaus ist unklar, ob die bei diesen Prozessen eingesetzte Mikroflora durch die abzubauenen Inhibitoren beeinträchtigt wird. Wie auch zur in-situ-Abtrennung von n-Butanol eignen sich prinzipiell Membranverfahren, jedoch liegen in der Literatur keine Angaben zur Membranverschmutzung (*Fouling*) und anderen technischen Hindernissen vor (vgl. hierzu: Wu et al. (2012)).

Im Folgenden wird daher ein Verdampfer mit mechanischer Brüdenverdichtung eingesetzt. Dabei wird, ähnlich dem Prinzip einer Wärmepumpe, die thermische Energie der Brüden konzentriert und zur Verdampfung eingesetzt. Eine umfassende energetische Betrachtung erfolgt in Kapitel 4.3.4.

Umsetzung

Der Verdampfer mit mechanischer Brüdenverdichtung reduziert den Wassergehalt der eingehenden Fermentationsbrühe (c_{WSSR}^{AFBR}) auf 40 % (m/m). Das verdampfte Wasser ist anschließend frei von Inhibitoren und wird als Prozesswasser in der Biomassevorbereitung (Aktivität v_1) wieder eingesetzt. Die Menge Wasser (s_{14}) ergibt sich damit aus folgender Gleichung.

Gleichung 4.41

$$s_{14} = w_{74} - c_{WSSR}^{AFBR} \cdot w_{64}$$

mit:

s_{14}	Stoffstromvektor Wasser	$t \cdot h^{-1}$	w_{74}	Stoffstromvektor Wasser in Brühe	$t \cdot h^{-1}$
c_{WSSR}^{AFBR}	Konzentration Wasser in Reststoffen	$t \cdot t^{-1}$	w_{64}	Stoffstromvektor Reststoffe in Fermentationsbrühe	$t \cdot h^{-1}$

Der Verdampfungsrückstand wird der Verbrennung zur Bereitstellung von Prozessdampf zugeführt. Der überschüssige Prozessdampf wird durch eine Dampfturbine zur Bereitstellung elektrischer Energie eingesetzt (vgl. energetische Betrachtung in Kapitel 4.3.4). Die Menge der zurückbleibenden Asche ist dabei abhängig von der Zusammensetzung des Substrates. Der Gehalt von Asche in Weizenstroh (c_{ASCH}^{AFBR}) beträgt etwa 6,7 % (m/m) (Saha, et al., 2005). Die durch die Enzyme zusätzlich eingebrachte Asche wird in dieser Betrachtung vernachlässigt. Die Asche wird unverändert von der Biomassevorbereitung an die Fermentation im Verhältnis w_{21}/w_{21} weitergegeben. Von dort gelangt sie im Verhältnis w_{64}/w_{62} in die Wasseraufbereitung. Es kann davon ausgegangen werden, dass der zum Teil in Lösung befindliche Gips aus der Biomassevorbereitung ebenfalls in der Asche verbleibt. Das Aufkommen von Asche (z_{54}) kann demnach wie folgt dargestellt werden:

Gleichung 4.42

$$z_{44} = \left(r_{11} \cdot c_{ASCH}^{AFBR} + s_{21} \cdot f_{GIPS/H_2SO_4}^{VRBR} - z_{11} \right) \cdot \frac{w_{22}}{w_{21}} \cdot \frac{w_{64}}{w_{62}}$$

mit:

z_{44}	Stoffstromvektor Asche	$t \cdot h^{-1}$	r_{11}	Stoffstromvektor Weizenstroh	$t \cdot h^{-1}$
c_{ASCH}^{AFBR}	Aschegehalt in Weizenstroh	$t \cdot t^{-1}$	s_{21}	Stoffstromvektor Schwefelsäure	$t \cdot h^{-1}$
$f_{GIPS/H_2SO_4}^{VRBR}$	Verhältnis Gips/Schwefelsäure	-	z_{11}	Stoffstromvektor Gips	$t \cdot h^{-1}$
w_{22}	Stoffstromvektor Reststoffe in Maische	$t \cdot h^{-1}$	w_{21}	Stoffstromvektor Reststoffe in Maische	$t \cdot h^{-1}$
w_{64}	Stoffstromvektor Reststoffe in Fermentationsbrühe	$t \cdot h^{-1}$	w_{62}	Stoffstromvektor Reststoffe in Fermentationsbrühe	$t \cdot h^{-1}$

In der Wirbelschichtfeuerung gelangt das in den Rückständen enthaltene Wasser gemeinsam mit den Verbrennungsgasen als gasförmige Emission (z_{24}) in die Atmosphäre. Die gasförmigen Emissionen ergeben sich aus der Differenz der eingehenden und ausgehenden Stoffströme (keine Berücksichtigung der Verbrennungsluft) und lassen sich wie folgt abschätzen:

Gleichung 4.43

$$z_{24} = w_{64} + w_{74} - s_{14} - z_{44}$$

mit:

z_{24}	Stoffstromvektor gasförmige Emissionen	$t \cdot h^{-1}$	w_{64}	Stoffstromvektor Reststoffe in Fermentationsbrühe	$t \cdot h^{-1}$
w_{74}	Stoffstromvektor Wasser in Fermentationsbrühe	$t \cdot h^{-1}$	s_{14}	Stoffstromvektor Wasser	$t \cdot h^{-1}$
z_{44}	Stoffstromvektor Asche	$t \cdot h^{-1}$			

Ergebnis der Umsetzung

Die Stoffstromvektoren der Wasseraufbereitung werden auf die Menge von einer t Fermentationsbrühe ($w_{64}; w_{74}$) bezogen. Tabelle 4-5 fasst die Stoffstromvektoren zusammen.

Tabelle 4-5: Stoffstromvektoren der Aktivität Wasseraufbereitung

Stoffstromvektor	Bezeichnung	Einheit	Input (-)	Output (+)
w_{64}	Reststoffe in Brühe	$t \cdot h^{-1}$	-0,08	
w_{74}	Wasser in Brühe	$t \cdot h^{-1}$	-0,92	
s_{14}	Wasser	$t \cdot h^{-1}$		0,88
z_{24}	Gasförmige Emissionen	$t \cdot h^{-1}$		0,10
z_{44}	Asche	$t \cdot h^{-1}$		0,01

4.3 Umsetzung der Energiestrommodellierung

Die Umsetzung der Energiestrommodellierung basiert auf den in Kapitel 4.2. ermittelten Stoffströmen. Der Energiebedarf wird ebenfalls nach dem Grey-Box-Ansatz für jede Aktivität ermittelt. Zur Abschätzung des Energiebedarfs lassen sich verschiedene Flowsheet-Simulationen heranziehen (vgl. hierzu: Kumar et al. (2011), Mansur et al. (2010), Wu et al. (2007)). Der im Folgenden angegebene Energiebedarf basiert auf einer Prozessauslegung unter Berücksichtigung von Energieintegrationsmöglichkeiten über Wärmetauschernetzwerke.

Zwar entstehen durch den Einsatz unterschiedlicher Quellen diesbezüglich Unschärfen, jedoch werden diese im Vergleich zum Gesamtenergiebedarf als vernachlässigbar bewertet. Der aus der Literatur entnommene Energiebedarf wird im Folgenden auf die in den jeweiligen Aktivitäten auftretenden Stoffströme bezogen. Die Abschätzung des Bedarfs an elektrischer Energie erfolgt für jede Aktivität auf Basis der Hauptverbraucher. Für die Anlagensteuerung und Verbraucher geringer Leistung werden in Abhängigkeit der abgebildeten Anlagenstruktur jeder Aktivität Zuschlagsfaktoren definiert. Die jeweils zu Beginn der Kapitel eingefügten Abbildungen dienen der Übersicht und unterscheiden sich bis auf die orange Einfärbung der Energieströme nicht von den bereits dargestellten in der Umsetzung der Stoffstrommodellierung.

4.3.1 Biomassevorbereitung

Die Umsetzung der Energiestrommodellierung der Biomassevorbereitung (v_1) basiert auf dem in Kapitel 4.2.1 diskutierten Vorgehen (siehe Abbildung 4-12). Für die Abschätzung des Energiebedarfes werden die Ergebnisse einer Flowsheeting-Simulation Kumars et al. (2011) herangezogen. Diese wurde bereits zur Abbildung der Stoffströme der Biomassevorbereitung eingesetzt. Kumar et al. modellierten die Biomassevorbereitung des halmgutartigen Substrates Rohrschwengelstroh. Zwar unterscheidet dieses sich in der Zusammensetzung von Weizenstroh, es kann jedoch aufgrund der ähnlichen Beschaffenheit davon ausgegangen werden, dass der Energiebedarf zur Verarbeitung von Weizenstroh nicht maßgeblich vom Energiebedarf für Rohrschwengelstroh abweicht. Nachfolgend wird der Bedarf an elektrischer Energie, Prozesswärme und Kühlung nach dem Grey-Box-Ansatz zunächst für die betreffenden Teilstoffströme abgeschätzt. Dieser wird auf Basis der identifizierten Stoffströme abschließend auf eine t Weizenstroh bezogen.

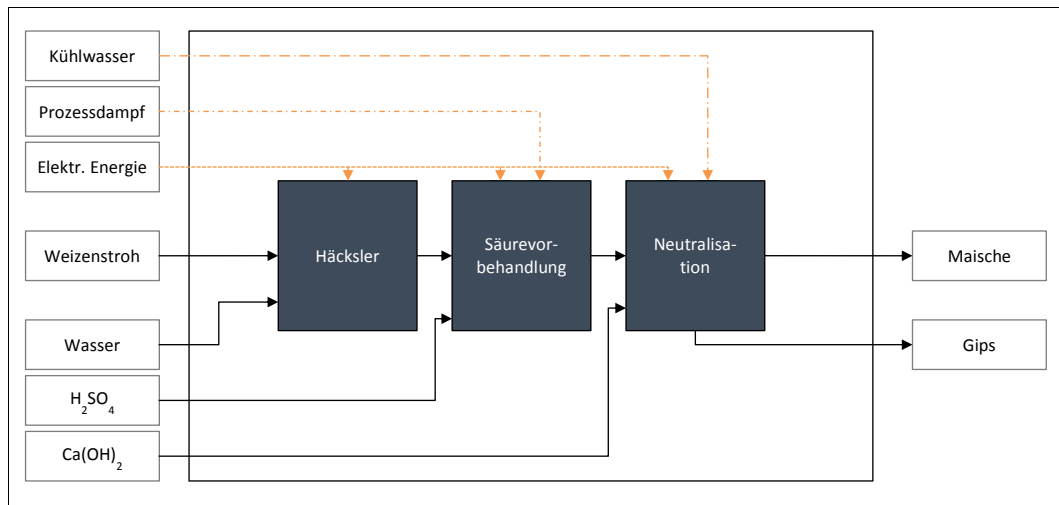


Abbildung 4-12: Prozesse sowie Stoff- und Energieströme der Biomassevorbereitung

Prozesswärmebedarf

Der einzige Verbraucher für Prozesswärme in der Biomassevorbereitung ist der Reaktor der Säurevorbehandlung. Sein Energiebedarf ($E_{th,RKTR}^{VRBR}$) ist abhängig von den Eingangsströmen Weizenstroh, Wasser und Schwefelsäure. Der Energiebedarf wird mit $37,50 \text{ MJ t}^{-1}$ angenommen (Kumar, et al., 2011). Darin ist die Rückführung der Prozesswärme über einen Wärmetauschernetzwerk bereits berücksichtigt. Der Bedarfsvektor an Prozesswärme in der Biomassevorbereitung (s_{61}) ergibt sich aus dem Produkt des Energiebedarfs ($E_{th,k}^{VRBR}$) und dem korrespondierenden Stofffluss (V_{RKTR}^{VRBR}) in folgender Form:

Gleichung 4.44

$$s_{61} = E_{th,RKTR}^{VRBR} \cdot V_{RKTR}^{VRBR}$$

mit:

s_{61}	Energiestromvektor Wärmebedarf	MJ t^{-1}	$E_{th,WT2}^{VRBR}$	Energiebedarf Reaktor	MJ t^{-1}
V_{WT2}^{VRBR}	$= \{ \text{Weizenstroh } (r_{11}); \text{ Wasser } (s_{11}); \text{ Schwefelsäure } (s_{21}) \}$				t t^{-1}

Bedarf an elektrischer Energie

Die Rohstoffzuführung erfolgt durch einen Bandförderer. Der Energiebedarf ($E_{el,BND}^{VRBR}$) ist abhängig von der geförderten Stoffmenge Weizenstroh. Der anschließend zur Zerkleinerung genutzte Häcksler verarbeitet das Stroh zu einer Suspension aus Wasser und Weizenstroh und weist einen Trockenmasseanteil von etwa 59 % (m/m) auf. Der Energiebedarf des Häckslers ($E_{el,HCKS}^{VRBR}$) wird ebenfalls in Abhängigkeit der Weizenstrohmenge modelliert. Weiterer Energiebedarf ($E_{el,PMP}^{VRBR}$) entsteht durch den Einsatz einer Pumpe zur Beschickung der Säurevorbehandlung. Er ist abhängig von den Stoffströmen von Weizenstroh, Wasser und der verdünnten Schwefelsäure. Weitere Verbraucher sind der vor der Neutralisation genutzt-

te Bandfilter ($E_{el,BFLTR}^{VRBR}$), das Rührwerk ($E_{el,RHR}^{VRBR}$), der Hydrozyklon ($E_{el,ZYKL}^{VRBR}$) und der Vakuumfilter ($E_{el,VFLTR}^{VRBR}$). Basis dieser Verbraucher ist der um die bei den Feststoffen verbleibenden Anteile von Wasser und Schwefelsäure korrigierte Stoffstrom, der mit Hilfe des Faktors (G_{GIPS}^{VRBR}) abgebildet wird. Im Folgenden zeigt Tabelle 4-6 die Energiebedarfe auf Basis der Biomassevorbereitung Kumars et al. (2011) in einer Übersicht.

Tabelle 4-6: Bedarf elektrischer Energie von Anlagenkomponenten in der Biomassevorbereitung

Komponente	Stoffstromvektoren	Energiebedarf	Einheit
Bandförderer	$V_{BND}^{VRBR} = \{ \text{Weizenstroh } (r_{11}) \}$	$E_{el,BND}^{VRBR} = 1,19$	kWh t ⁻¹
Häcksler	$V_{HCKS}^{VRBR} = \{ \text{Weizenstroh } (r_{11}) \}$	$E_{el,HCKS}^{VRBR} = 25,42$	kWh t ⁻¹
Pumpe	$V_{PMP}^{VRBR} = \{ \text{Weizenstroh } (r_{11}); \text{Wasser } (s_{11}); \text{Schwefelsäure } (s_{21}) \}$	$E_{el,PMP1}^{VRBR} = 0,40$	kWh t ⁻¹
Bandfilter	$V_{BFLTR}^{VRBR} = \{ \text{Weizenstroh } (r_{11}); \text{Wasser } (s_{11}); \text{Schwefelsäure } (s_{21}) \}$	$E_{el,BFLTR}^{VRBR} = 0,03$	kWh t ⁻¹
Rührwerk Neutralisation	$V_{RHR}^{VRBR} = \{ \text{Wasser } (s_{11}) \cdot G_{GIPS}^{VRBR}; \text{Schwefelsäure } (s_{21}) \cdot G_{GIPS}^{VRBR}; \text{Calciumhydroxid } (s_{31}) \}$	$E_{el,RHR}^{VRBR} = 0,10$	kWh t ⁻¹
Hydrozyklon	$V_{ZYKL}^{VRBR} = \{ \text{Wasser } (s_{11}) \cdot G_{GIPS}^{VRBR}; \text{Schwefelsäure } (s_{21}) \cdot G_{GIPS}^{VRBR}; \text{Calciumhydroxid } (s_{31}) \}$	$E_{el,ZYKL}^{VRBR} = 0,03$	kWh t ⁻¹
Vakuum- filtration	$V_{VFLTR}^{VRBR} = \{ \text{Wasser } (s_{11}) \cdot G_{GIPS}^{VRBR}; \text{Schwefelsäure } (s_{21}) \cdot G_{GIPS}^{VRBR}; \text{Calciumhydroxid } (s_{31}) \}$	$E_{el,VFLTR}^{VRBR} = 0,08$	kWh t ⁻¹

Über den Bedarf der oben aufgeführten Komponenten hinaus existieren weitere Verbraucher, die nicht aufgeführt sind. Dazu gehören beispielsweise die Mess-, Steuer- und Regelungstechnik, Beleuchtung und der anteilige Bedarf für Verwaltungsaufgaben. Um diese ebenfalls zu erfassen wird der Korrekturfaktor ($f_{KOR,el}^{VRBR}$) eingeführt, dessen Höhe mit 1,2 angenommen wird. Der Bedarfsvektor elektrischer Energie der Biomassevorbereitung (s_{51}) ergibt sich demnach zu:

Gleichung 4.45

$$s_{51} = f_{KOR,el}^{VRBR} \sum_{k \in K} \sum_{v \in V_k^{VRBR}} E_{el,k}^{VRBR} \cdot |v|$$

mit:

$$K = \{BND; HCKS; PMP; BFLTR; RHR; ZYKL; VFLTR\} \quad t \, t^{-1} \quad s_{51} \quad \begin{array}{l} \text{Energiestromvektor} \\ \text{elektrische Energie} \end{array} \quad kWh \, t^{-1}$$

Kühlbedarf

Durch die thermische Säurebehandlung und die exotherme Neutralisierung muss die Weizenstrosuspension vor Eintritt in die Fermenter gekühlt werden. Der Kühlbedarf ($E_{kh,WT2}^{VRBR}$) beträgt $56,40 \, MJ \, t^{-1}$ (Kumar, et al., 2011). Er ist abhängig von den zu kühlenden Massenströmen (V_{WT2}^{VRBR}). Der über den Bedarfsvektor (s_{71}) abgebildete Kühlbedarf der Biomassevorbereitung wird wie folgt dargestellt:

Gleichung 4.46

$$s_{71} = E_{kh,WT2}^{VRBR} \cdot V_{WT2}^{VRBR}$$

mit:

$$\begin{array}{llllll} s_{71} & \begin{array}{l} \text{Energiestromvektor} \\ \text{Kühlbedarf} \end{array} & MJ \, t^{-1} & E_{kh,WT2}^{VRBR} & \begin{array}{l} \text{Kühlbedarf} \\ \text{Wärmetauscher} \end{array} & MJ \, t^{-1} \\ V_{WT2}^{VRBR} = \{ \text{Weizenstroh } (r_{11}); & & t \, t^{-1} & & & \\ \text{Wasser } (s_{11}) \} & & & & & \end{array}$$

Ergebnis der Umsetzung

Tabelle 4-7 zeigt das Ergebnis der Umsetzung und die Bedarfe der Biomassevorbereitung. Alle Angaben beziehen sich auf eine t Weizenstroh.

Tabelle 4-7: Energiestromvektoren der Biomassevorbereitung, Basis 1 t Weizenstroh

Energiestromvektor	Bezeichnung	Einheit	Input (-)	Output (+)
s_{51}	Bedarf an elektrischer Energie	$kW \, t^{-1}$	-37,43	
s_{61}	Dampfbedarf	$MJ \, t^{-1}$	-291,37	
s_{71}	Kühlwasserbedarf	$MJ \, t^{-1}$	-438,22	

4.3.2 Fermentation

Wie in Kapitel 4.2.2 definiert, umfasst die Fermentation (v_2) neben der mikrobiellen Umwandlung von Weizenstrohhydrolysaten auch die Produktentfernung mittels Gas Stripping und anschließender Rekondensation (siehe Abbildung 4-13). Die Ermittlung des Energiebedarfs basiert auf Ausführungen von Kumar et al. (2011), Wu et al. (2007) sowie eigener Auslegung. Alle Bedarfe werden nach dem Grey-Box-Ansatz zunächst für die betreffenden Stoffströme abgeschätzt. Wie auch im vorhergehenden Kapitel erfolgt abschließend der Bezug aller Energieströme auf eine t aufschließbarer Zucker.

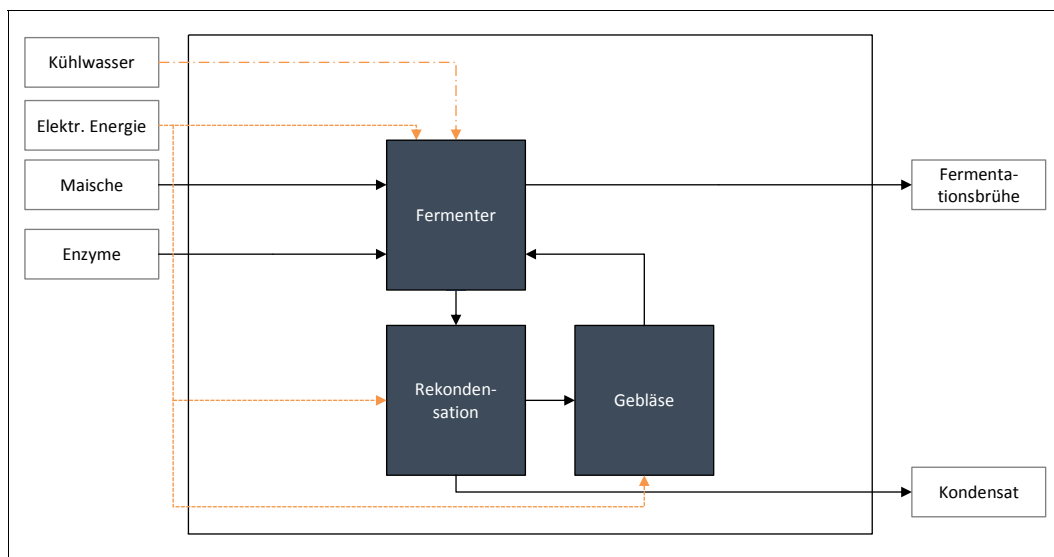


Abbildung 4-13: Prozesse sowie Stoff- und Energieströme der Fermentation

Bedarf an elektrischer Energie

Der Energiebedarf des Gebläses ($E_{el,GBLS}^{FRMT}$) ist abhängig von der Menge des einzusetzenden Fermentationsgases. Qureshi et al. (2007b) geben an anderer Stelle eine Zirkulationsrate des Fermentationsgases für einen Liter Fermenterfüllung von $4 \text{ L L}^{-1} \text{ min}^{-1}$ an. Das Gas erfüllt dabei zwei Funktionen. Zum einen werden mit ihm ABE-Produkte ausgetragen, zum anderen verursacht es beim Durchströmen des Fermenters Turbulenzen, die eine Agitation bewirken und daher erwünscht sind. Bei der Übertragung vom Labormaßstab auf die großtechnische Realisierung verändern sich einige Eigenschaften des Gas Strippings.

Nimmt man an, dass das Fermentationsgas annähernd vollständig aus Kohlenstoffdioxid besteht, lässt sich zur Abschätzung der benötigten Menge an Fermentationsgas eine Flowsheet-Simulation von van der Merwe (2010) heranziehen. Van der Merwe geht von einer Konzentration von ABE-Produkten von 5 g L^{-1} aus, was etwa der durchschnittlichen Konzentration in den Fermentern der Modellanlage entspricht. Zum Austragen einer Tonne ABE-Produkte setzt er 102,90 t Kohlenstoffdioxid im Kreislauf ein. Unter Berücksichtigung einer unvollständigen Kondensation (G_{KNDS}^{FRMT}) von ABE-Produkten und zusätzlich benötigtem Gas durch

partiell unvollständige Sättigung der Gasphase von 3 % ergibt sich daraus ein Gasvolumen (Vol_{GBLS}^{FRMT}) von etwa $52.41 \text{ m}^3 \text{ t}^{-1}$ ABE-Produkte³².

Während im Labormaßstab lediglich ein Liter Fermentationsbrühe durchströmt wird (Qureshi, et al., 2007b), steigt in der großtechnischen Realisierung mit dem Volumen der Fermenter die vom Fermentationsgas durchströmte Fluidsäule. Die gleiche Menge Fermentationsgas verursacht in einem höheren Fermenter daher eine höhere Durchmischung. Bezogen auf das Fermentervolumen der Modellanlage entspricht das einer Zirkulationsrate in einem Liter Fermentationsbrühe von etwa $10,8^{33} \text{ L L}^{-1} \text{ min}^{-1}$. Es kann daher davon ausgegangen werden, dass die erforderliche Durchmischung durch den angenommenen Gasstrom sichergestellt ist.

Für die Abschätzung des Energiebedarfs, der bei der Umwälzung des Gases entsteht, ist die aufzubringende Druckdifferenz von zentraler Bedeutung. Nimmt man eine zu belüftende Flüssigkeitssäule in den Fermentern in Höhe von 5 m an, hängt der zu überwindende hydrostatische Druck in erster Linie von der Dichte der Fermentationsbrühe ab. Diese weist zwar einen höheren Betrag als Wasser auf, kann jedoch unter Berücksichtigung des in die Fluidsäule durch das Gebläse eingebrachte Gas mit 1.000 kg m^{-3} angenommen werden. Der beim Einblasen des Fermentationsgases zu überwindende Druckunterschied beträgt damit etwa 50.000 Pa beziehungsweise $0,5 \text{ bar}$. Es wird angenommen, dass der zusätzliche Druckverlust durch Verrohrung und den Kondensator etwa 5.000 Pa beziehungsweise $0,05 \text{ bar}$ beträgt³⁴.

Unter Berücksichtigung eines Sicherheitsaufschlags der gleichen Höhe kann der vom Gebläse bereitzustellende Betriebsdruck (Δp_{GBLS}^{FRMT}) daher mit 60.000 Pa beziehungsweise $0,6 \text{ bar}$ angegeben werden. Die Abschätzung des Energiebedarfs erfolgt mittels Gleichung 4.47. Bei den erforderlichen hohen Antriebsleistungen wird der Wirkungsgrad des Gebläses mit 74 % (Frey, 2012), der des Motors mit 98 % angenommen, was zu einem kombinierten Wirkungsgrad (η_{GBLS}) von 72,5 % führt.

Gleichung 4.47

$$E_{el,GBLS}^{FRMT} = \frac{Vol_{GBLS}^{FRMT} \cdot \Delta p_{GBLS}^{FRMT}}{3600 \cdot 1000 \cdot \eta_{GBLS}}$$

mit:

$E_{el,GBLS}^{FRMT}$	Energiebedarf Gebläse	kWh t^{-1}	V_{GBLS}^{FRMT}	Gasvolumen	$\text{m}^3 \text{ t}^{-1}$
Δp_{GBLS}^{FRMT}	Druckdifferenz	Pa	η_{GBLS}	Wirkungsgrad Gebläse/Motor	

Der Energiebedarf für die Entfernung von einer t ABE-Produkten ($E_{el,RKND}^{FRMT}$) liegt damit bei $1.178,99 \text{ kWh t}^{-1}$. Die abgeführten ABE-Produkte werden in der anschließenden Rekonden-

³² Annahme: Kohlenstoffdioxid als ideales Gas; keine Berücksichtigung von Wasserstoff im Fermentationsgas

³³ Der von Qureshi et al. (2007b) betriebene 2 L-Fermenter ist mit einem Liter Fermentationsbrühe befüllt. Annahme: Die Füllhöhe im Fermenter beträgt 10 cm. Die Komprimierung der Fermentationsgase wird vernachlässigt.

³⁴ Annäherung mit Hilfe der Software SF Pressure Drop 7.2, Annahmen für jeden einzelnen Fermenter: Gesamtrohrlänge von 30 m; Durchmesser von 0,8 m; vier Bögen von 1 m; Berücksichtigung des Kondensators über vier serielle Gitterrahmen

sation verflüssigt. Der Energiebedarf der Kondensation ($E_{el,RKND}^{FRMT}$) wird durch die Höhe der kondensierten Stoffströme der ABE-Produkte (w_{42}) und des Wassers im Kondensat (w_{52}) bedingt und beträgt $101,03 \text{ kWh t}^{-1}$ (Wu, et al., 2007). Tabelle 4-8 fasst die Bedarfe an elektrischer Energie für die wichtigsten Komponenten der Fermentation zusammen.

Tabelle 4-8: Bedarf elektrischer Energie von Anlagenkomponenten in der Fermentation

Komponente	Stoffstromvektoren	Energiebedarf	Einheit
Gebläse	$V_{GBLS}^{FRMT} = \{ABE - \text{Produkte } (w_{42})\}$	$E_{el,GBLS}^{FRMT} = 1.178,99$	kWh t^{-1}
Rekondensation	$V_{RKND}^{FRMT} = \{ABE - \text{Produkte } (w_{42}); \text{Wasser in Kondensat } (w_{52})\}$	$E_{el,RKND}^{FRMT} = 101,03$	kWh t^{-1}

Neben den oben aufgeführten Komponenten besteht weiterer Energiebedarf durch Mess-, Steuer- und Regelungstechnik, Beleuchtung und weitere Verbraucher. Über den Korrekturfaktor ($f_{KOR,el}^{FRMT}$) von 1,005 ist dieser Bedarf im Bedarfsvektor elektrischer Energie der Fermentation (s_{52}) berücksichtigt:

Gleichung 4.48

$$s_{52} = f_{KOR,el}^{FRMT} \sum_{k \in K} \sum_{v \in V_k^{FRMT}} E_{el,k}^{FRMT} \cdot |v|$$

mit:

$$K = \{GBLS; RKND\}$$

Kühlbedarf

In der Fermentationsstufe besteht Kühlbedarf durch die Kühlung der Fermenter ($E_{kh,FRMT}^{FRMT}$). Bei der mikrobiellen Umsetzung des Substrates im Fermenter wird Wärme freigesetzt, die zur Aufrechterhaltung optimaler Bedingungen abgeführt werden muss. Für die Auslegung wird als Vergleichsprozess eine Ethanolfermentation von Kumar et al. (2011) herangezogen. Ausgehend davon beträgt die abzuführende Energiemenge $25,92 \text{ MJ t}^{-1}$. Der über den Bedarfsvektor (s_{72}) dargestellte Kühlbedarf der Fermentation kann wie folgt dargestellt werden:

Gleichung 4.49

$$s_{72} = E_{kh,FRMT}^{FRMT} \cdot V_{FRMT}^{FRMT}$$

mit:

$$E_{kh,FRMT}^{FRMT} \quad \text{Kühlbedarf Fermenter} \quad \text{MJ t}^{-1}$$

$$V_{FRMT}^{FRMT} = \{ \text{Aufschließbares Substrat } (w_{12}); \text{Reststoffe in Maische } (w_{22}); \text{Wasser in Maische } (w_{32}); \text{Enzyme } (s_{42}) \} \quad \text{t t}^{-1}$$

Ergebnis der Umsetzung

Der Bedarf an elektrischer Energie, Prozesswärme und Kühlung wird auf die Verarbeitung von einer t aufschließbaren Substrats bezogen. Tabelle 4-9 fasst die Ergebnisse zusammen.

Tabelle 4-9: Energiestromvektoren der Fermentation, Basis 1 t aufschließbares Substrat

Energiestromvektor	Bezeichnung	Einheit	Input (-)	Output (+)
s_{52}	Bedarf an elektrischer Energie	kW t^{-1}	- 413,00	
s_{72}	Kühlbedarf	MJ t^{-1}	-315,14	

4.3.3 Separation

Die Separation (v_3) trennt das in der Fermentation verflüssigte Kondensat in ABE-Produkte und Wasser (siehe Kapitel 4.2.3). Für die Abtrennung wird eine fraktionierte Destillation vorgesehen. Die Produkte n-Butanol und Aceton verfügen anschließend über eine marktfähige Qualität, während Ethanol zuvor in einem weiteren Schritt durch Adsorption aufkonzentriert werden muss (siehe Abbildung 4-14).

Die gesamte Separation wurde von Wu et al. (2007) für einen Wasseranteil im Kondensat von 25 % (m/m) modelliert und der Bedarf an Prozesswärme abgeschätzt. Die von Wu et al. angenommene Zusammensetzung der ABE-Produkte unterscheidet sich geringfügig von der der Modellanlage. Pro kg ABE-Produkte erhalten Wu et al. 0,334 kg Aceton, 0,652 kg n-Butanol und 0,015 kg Ethanol, während für die Modellanlage 0,33 kg Aceton, 0,63 kg n-Butanol und 0,04 kg Ethanol angenommen werden (siehe Kapitel 4.2.2). Die Abschätzung des Energiebedarfs erfolgt daher getrennt für jedes Produkt. Die dennoch entstehenden Unschärfen können im Hinblick auf die geforderte Genauigkeit vernachlässigt werden. Da Wu et al. keine vollständigen Angaben zum Bedarf von Kühlung und elektrischer Energie machen, werden diese Mansur et al. (2010) entnommen.

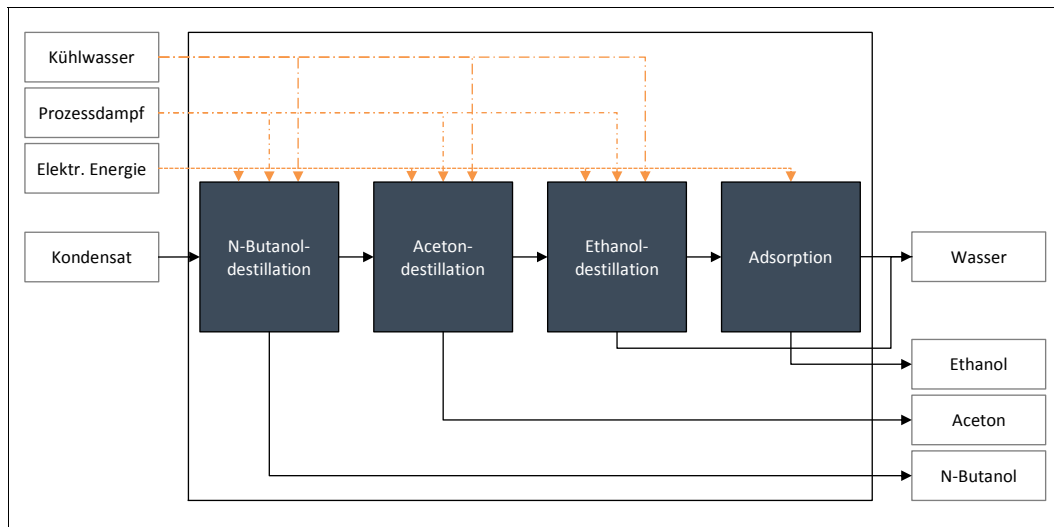


Abbildung 4-14: Prozesse sowie Stoff- und Energieströme der Separation

Prozesswärmebedarf

Der Bedarf an Prozesswärme für die Verdampfer in den Kolonnen für n-Butanol ($E_{th,VRDM,NBTL}^{SPRT}$), Aceton ($E_{th,VRDM,ACTN}^{SPRT}$) und Ethanol ($E_{th,VRDM,ETHN}^{SPRT}$) ergibt sich aus dem Durchsatz. Durch die Regeneration des Adsorbers mittels elektrischer Energie entsteht Wärme. Diese gelangt in das Wärmeaustauschsystem der Separation und wird mit einem Verlust von 10 % berücksichtigt. Tabelle 4-10 zeigt alle Verbraucher in der Übersicht.

Tabelle 4-10: Bedarf Prozesswärme von Anlagenkomponenten in der Separation

Komponente	Stoffstromvektoren	Energiebedarf	Einheit
n-Butanolkolonne	$V_{NBTL}^{SPRT} = \{ ABE - \text{Produkte } (w_{43}); \text{Wasser in Kondensat } (w_{53}) \}$	$E_{th,VRDM,NBTL}^{SPRT} = 1.135,9$	MJ t^{-1}
Acetonkolonne	$V_{ACTN}^{SPRT} = \{ \text{Aceton } (y_{23}); \text{Ethanol } (y_{33}); \text{Wasser } (s_{13}) \}$	$E_{th,VRDM,ACTN}^{SPRT} = 3.184,5$	MJ t^{-1}
Ethanolkolonne	$V_{ETHN}^{SPRT} = \{ \text{Ethanol } (y_{33}); \text{Wasser } (s_{13}) \}$	$E_{th,VRDM,ETHN}^{SPRT} = 612,2$	MJ t^{-1}
Adsorber-regeneration	$V_{ADSR}^{SPRT} = \{ \text{Ethanol } (y_{33}) \}$	$E_{th,ADSR}^{SPRT} = -164,2$	MJ t^{-1}

Der Bedarfsvektor Prozesswärme der Separation (s_{63}) ergibt sich demnach zu:

Gleichung 4.50

$$s_{63} = \sum_{k \in K} \sum_{v \in V_k^{SPRT}} E_{th,k}^{SPRT} \cdot |v|$$

mit:

$$K = \{NBTL; ACTN; ETHN; ADSR\}$$

Bedarf an elektrischer Energie

Der Bedarf an elektrischer Energie der Separation entsteht zum einen durch Pumpen zur Beschickung der Kolonnen, zum anderen durch die Regeneration des Adsorbers. Der Bedarf der Pumpe der n-Butanolkolonne ($E_{el,PMP,NBTL}^{SPRT}$) ist abhängig von der geförderten Stoffmenge an ABE-Produkten und Wasser im Kondensat. Analog bedingt die Menge von Aceton, Ethanol und Wasser den Bedarf der Pumpe der Acetonkolonne ($E_{el,PMP,ACTN}^{SPRT}$) und die Menge an Ethanol und Wasser der Pumpe der Ethanolkolonne ($E_{el,PMP,ETHN}^{SPRT}$). Im Adsorber wird das Azeotrop von Ethanol, Wasser und Acetonspuren getrennt. Der Bedarf an elektrischer Energie für die Regeneration ($E_{el,ADSR}^{SPRT}$) wird auf die aufkonzentrierte Menge an Ethanol bezogen (siehe Tabelle 4-11).

Tabelle 4-11: Bedarf elektrischer Energie von Anlagenkomponenten in der Separation

Komponente	Stoffstromvektoren	Energiebedarf	Einheit
Pumpe n-Butanolkol.	$V_{NBTL}^{SPRT} = \{ABE - \text{Produkte } (w_{43}); \text{Wasser in Kondensat } (w_{53})\}$	$E_{el,PMP,NBTL}^{SPRT} = 0,94$	kWh t ⁻¹
Pumpe Acetonkol.	$V_{ACTN}^{SPRT} = \{Aceton (y_{23}); Ethanol (y_{33}); Wasser (s_{13})\}$	$E_{el,PMP,ACTN}^{SPRT} = 1,53$	kWh t ⁻¹
Pumpe Ethanolkol.	$V_{ETHN}^{SPRT} = \{Ethanol (y_{33}); Wasser (s_{13})\}$	$E_{el,PMP,ETHN}^{SPRT} = 1,53$	kWh t ⁻¹
Adsorber- regeneration	$V_{ADSR}^{SPRT} = \{Ethanol (y_{33})\}$	$E_{el,ADSR}^{SPRT} = 50,60$	kWh t ⁻¹
Tanklager	$V_{TNK}^{SPRT} = \{ABE - \text{Produkte } (w_{43})\}$	$E_{el,TNK}^{SPRT} = 0$	kWh t ⁻¹

Mess-, Steuer- und Regelungstechnik, Beleuchtung und andere kleinere Verbraucher werden durch den Zuschlagsfaktor ($f_{KOR,el}^{SPRT}$) von 1,2 berücksichtigt. Der Bedarfsvektor elektrischer Energie der Separation (s_{53}) ergibt sich demnach zu:

Gleichung 4.51

$$s_{53} = f_{KOR,el}^{SPRT} \sum_{k \in K} \sum_{v \in V_k^{SPRT}} E_{el,k}^{SPRT} \cdot |v|$$

mit:

$$K = \{NBTL; ACTN; ETHN; ADSR; TNK\}$$

Kühlbedarf

Wie auch beim Bedarf an elektrischer Energie und Prozesswärme hängt der Kühlbedarf der Wärmetauscher der Kolonnen von der Durchflussmenge ab (siehe Tabelle 4-12).

Tabelle 4-12: Kühlwasserbedarf von Anlagenkomponenten in der Separation

Komponente	Stoffstromvektoren	Energiebedarf	Einheit
Butanolkolonne	$V_{NBTL}^{SPRT} = \{ ABE - \text{Produkte } (w_{43}); \text{Wasser in Kondensat } (w_{53}) \}$	$E_{kh,WT,NBTL}^{SPRT} = 585,0$	MJ t^{-1}
Acetonkolonne	$V_{ACTN}^{SPRT} = \{ \text{Aceton } (y_{23}); \text{Ethanol } (y_{33}); \text{Wasser } (s_{13}) \}$	$E_{kh,WT,ACTN}^{SPRT} = 2.739,7$	MJ t^{-1}
Ethanolkolonne	$V_{ETHN}^{SPRT} = \{ \text{Ethanol } (y_{33}); \text{Wasser } (s_{13}) \}$	$E_{kh,WT,ETHN}^{SPRT} = 501,8$	MJ t^{-1}

Der Bedarfsvektor an Kühlung der Separation (s_{73}) lässt sich wie folgt darstellen:

Gleichung 4.52

$$s_{73} = \sum_{k \in K} \sum_{v \in V_k^{SPRT}} E_{kh,k}^{SPRT} \cdot |v|$$

mit:

$$K = \{NBTL; ACTN; ETHN\}$$

Ergebnis der Umsetzung

Tabelle 4-13 zeigt die Ergebnisse der Umsetzung bezogen auf jeweils eine t ABE-Produkte.

Tabelle 4-13: Energiestromvektoren der Separation, Basis 1 t ABE-Produkte

Energiestromvektor	Bezeichnung	Einheit	Input (-)	Output (+)
s_{53}	Bedarf an elektrischer Energie	kW t^{-1}	-6,42	
s_{63}	Dampfbedarf / Dampfüberschuss	MJ t^{-1}	-3.982,32	
s_{73}	Kühlbedarf	MJ t^{-1}	-2.899,49	

4.3.4 Wasseraufbereitung

Aktivität (v_4) reinigt das Wasser aus der Fermentationsbrühe und stellt Prozesswärme und elektrische Energie bereit (siehe Abbildung 4-15). Eine umfassende Beschreibung des Aufbaus findet sich in Kapitel 4.2.4. Die Ermittlung der Energiebedarfe beziehungsweise der Energiebereitstellung erfolgt auf Basis von Herstellerangaben (vgl. hierzu: GIG Karasek (2012)) und der Abschätzung über Näherungen.

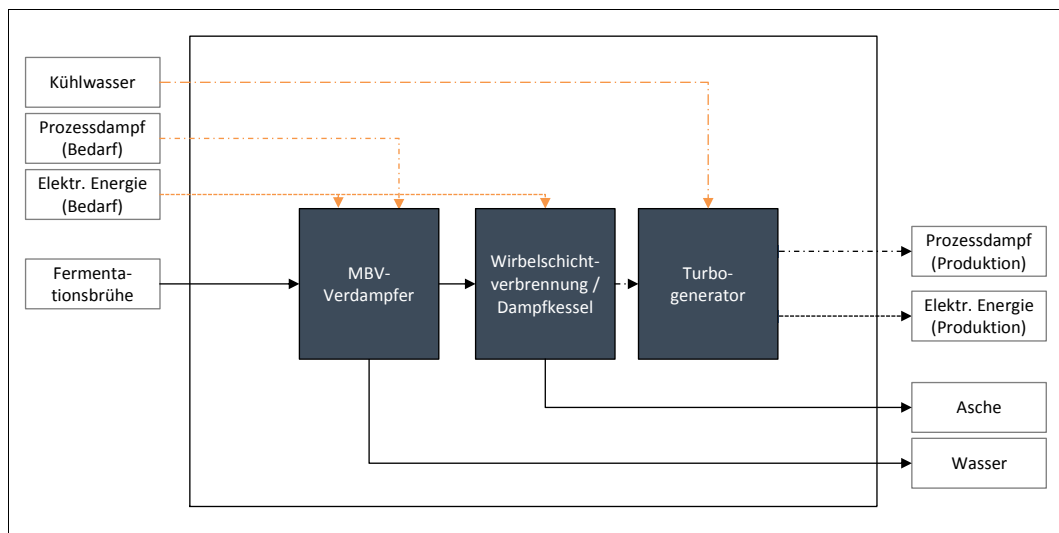


Abbildung 4-15: Prozesse sowie Stoff- und Energieströme der Wasseraufbereitung

Prozesswärmebedarf / -Bereitstellung

Der mechanische Brüdenverdichter im Verdampfer wird mit elektrischer Energie betrieben. Die durch die Verdichtung eingetragene thermische Energie ist groß genug, die Verdampfungsenergie des Prozesses bereitzustellen. Zusätzlicher Prozessdampf ist daher nur in sehr geringen Mengen für das Anfahren erforderlich und wird im Folgenden nicht berücksichtigt.

Zum Energiegehalt des Rückstandes einer ABE-Fermentation aus Weizenstrohhydrolysat liegen in der Literatur keine Angaben vor. Im Folgenden wird daher eine Abschätzung des Heizwertes des brennbaren Rückstandes auf Basis seiner Bestandteile vorgenommen. Im Rückstand der Fermentationsbrühe liegen nicht hydrolysierte Cellulose und Hemicellulose, Lignin, sonstige Strohbestandteile, nicht umgesetzte Zucker, Zellmasse, Enzyme und ABE-Verluste vor. Die Konzentrationen dieser Bestandteile in den Reststoffen der Fermentationsbrühe wurden bereits in Kapitel 4.2.2 abgeschätzt, im Folgenden werden die entsprechenden Heizwerte quantifiziert.

Zum enzymatisch nicht aufschließbaren Rest von Cellulose und Hemicellulose liegen keine Angaben vor. Es wird daher angenommen, dass beide jeweils gleich stark verzuckert werden und der Heizwert in Form eines gewichteten Durchschnittes vorliegt. Ausgehend von den Heizwerten für Cellulose und Hemicellulose von 17,3 und 16,2 MJ kg⁻¹ beträgt deren durchschnittlicher Heizwert³⁵ ($H_{i,CLL}$) 16,9 MJ kg⁻¹. Der Heizwert von Lignin ($H_{i,LGN}$) wird mit 28,8 MJ kg⁻¹ angegeben (Piechota, 2011). Zur Ermittlung des Energiegehaltes der sonstigen Bestandteile, Enzyme und Zellmasse wird ein Heizwert ($H_{i,SNST}$) in einer Höhe von 17 MJ kg⁻¹ angenommen. Der Heizwert der nicht umgesetzten Zucker ($H_{i,ZCKR}$) beträgt 15,6 MJ kg⁻¹.

³⁵ Gewichtung nach Anteilen in Weizenstroh von 48,57 und 27,7 % (m/m) für Cellulose bzw. Hemicellulose (Saha, et al., 2005)

Für die Betrachtung der ABE-Verluste ist zunächst zu ermitteln, welche Bestandteile nach dem Verdampfungsprozess noch für die Verbrennung herangezogen werden können. Aceton und Ethanol weisen einen geringeren Siedepunkt von 56 beziehungsweise 78 °C auf als Wasser. Es kann daher davon ausgegangen werden, dass diese während der Eindampfung gemeinsam mit dem Wasser der Fermentationsbrühe vollständig abgetrennt werden. Für n-Butanol mit einem Siedepunkt von 118 °C trifft das nur teilweise zu. Der Heizwert ist daher kein gewichteter Durchschnitt der Produkte, sondern entspricht dem von n-Butanol ($H_{i,RABE}$) mit 33,1 MJ kg⁻¹.

Im Folgenden wird angenommen, dass 70 % des enthaltenen n-Butanols der Verbrennung zugeführt werden. Aus den Produkten von Konzentration und Heizwert ergibt sich der gewichtete durchschnittliche Heizwert des Rückstandes. Es wird angenommen, dass ein Teil der genannten Bestandteile während der Fermentation durch Nebenreaktionen in weniger energiereiche Produkte zersetzt wird. Zur Berücksichtigung des Verlustes wird der Heizwert mit dem Korrekturfaktor ($f_{RS\ korrr}^{AFBR}$) 0,98 verringert.

Gleichung 4.53

$$H_{i,RS} = \left(\sum_{i \in L} H_{i,l} \cdot c_{RS,l} + H_{i,RABE} \cdot c_{RS\ RABE} \cdot 0,7 \right) \cdot f_{RS\ korrr}^{AFBR}$$

mit:

$H_{i,RS}$	Heizwert Verdampfungs- rückstand	MJ t ⁻¹	$H_{i,l}$	Heizwerte einzelner Rück- standsbestandteile	MJ t ⁻¹
$c_{RS,l}$	Konzentration einzelner Rückstandsbestandteile	t t ⁻¹	$H_{i,RABE}$	Heizwert ABE-Produkte	MJ t ⁻¹
$c_{RS\ RABE}$	Konzentration ABE- Produkte im Rückstand	t t ⁻¹	$f_{RS\ korrr}^{AFBR}$	Korrekturfaktor Heizwert	-

$$L = \{CLL; LGN; SNST; ZCKR; ZELL; ENZY\}$$

Der aus der Verdampfung in die Verbrennung geführte Rückstand weist einen Wassergehalt (c_{WSSR}^{AFBR}) von 50 % (m/m) auf. Die zur Verdampfung dieser Menge bereitzustellende Wärme ($E_{th,WSSR}^{AFBR}$) steht daher nicht mehr für die Erzeugung von Prozessdampf zur Verfügung. Sie wird im Folgenden abgeschätzt. Dabei wird davon ausgegangen, dass die Temperatur des Rückstands durch eine Vorwärmung mit der Hilfe von Rauchgas 70 °C beträgt. Unter annähernd atmosphärischen Bedingungen beträgt die Temperaturdifferenz (ΔT_{VRDM}) somit 30 K. Für die Abschätzung der zur Verdampfung notwendige Wärmemenge wird eine Wärmekapazität (γ_p) von 4,190 kJ kg⁻¹ K⁻¹ und eine Verdampfungsenthalpie (Δh_v) von 2.257 kJ kg⁻¹ angenommen. Die aufzubringende Wärme ($E_{th,WSSR}^{AFBR}$) ergibt sich damit wie folgt.

Gleichung 4.54

$$E_{th,WSSR}^{AFBR} = \frac{\gamma_p \cdot \Delta T_{VRDM} + \Delta h_v}{1.000}$$

mit:

$E_{th,WSSR}^{AFBR}$	Wärmebedarf	MJ t^{-1}	γ_p	Spezifische Wärmekapazität	$\text{kJ t}^{-1} \text{K}^{-1}$
ΔT_{VRDM}	Temperaturdifferenz	K	Δh_v	Verdampfungsenthalpie Wasser	kJ t^{-1}

Der Wirkungsgrad (G_{VERB}^{AFBR}) des Kessels wird mit 95 % angenommen. Die durch den Kessel bereitgestellte Prozesswärme wird für die Bereitstellung von Prozessdampf und elektrischer Energie herangezogen. Der dafür potentiell zur Verfügung stehende Bedarfs- beziehungsweise Bereitstellungsvektor der Wasseraufbereitung ($s_{64\ pot}$) ergibt sich demnach zu:

Gleichung 4.55

$$s_{64\ pot} = V_{VERB}^{AFBR} \cdot (E_{th,WSSR}^{AFBR} - H_{i,RS}) \cdot G_{VERB}^{AFBR}$$

mit:

$s_{64\ pot}$	Energiestromvektor potentielle Prozesswärmebereitstellung	MJ t^{-1}	$V_{VERB}^{AFBR} = \{\text{Reststoffe in Brühe } (w_{64})\}$
$E_{th,WSSR}^{AFBR}$	Verdampfung Wasser in Rückständen	MJ t^{-1}	$H_{i,RS}$ Heizwert Verdampfungsrückstand MJ t^{-1}
G_{VERB}^{AFBR}	Wirkungsgrad des Kessels	-	

Ausgehend vom Energiestromvektor ($s_{64\ pot}$) kann der Bedarf anderer Aktivitäten an Prozesswärme³⁶ ($s_{64\ BDRF}$) gedeckt werden. Der gegebenenfalls vorliegende Überschuss ($s_{64\ el}$) steht zur Erzeugung von Elektrizität zur Verfügung. Der resultierende Energiestromvektor (s_{64}) kann damit wie folgt dargestellt werden.

Gleichung 4.56

$$s_{64} = \begin{cases} s_{64\ pot}, & s_{64\ pot} < s_{64\ BDRF} \\ s_{64\ BDRF}, & s_{64\ pot} \geq s_{64\ BDRF} \end{cases}$$

mit:

s_{64}	Energiestromvektor Prozesswärmebereitstellung	MJ h^{-1}	$s_{64\ pot}$	Energiestromvektor potentielle Prozesswärmebereitstellung	MJ h^{-1}
$s_{64\ BDRF}$	Energiestromvektor Prozesswärmebedarf	MJ h^{-1}			

³⁶ Der gewählte aktivitätsanalytische Ansatz lässt an diesem Punkt jedoch noch keinen quantitativen Vergleich von Energiebereitstellung und Energiebedarf zu.

Daraus ergibt sich der zur Bereitstellung von elektrischer Energie einsetzbare Energiestromvektor ($s_{64\,el}$) wie folgt:

Gleichung 4.57

$$s_{64\,el} = \begin{cases} 0, & s_{64\,pot} < s_{64\,BDRF} \\ s_{64\,pot} - s_{64\,BDRF}, & s_{64\,pot} \geq s_{64\,BDRF} \end{cases}$$

mit:

$s_{64\,el}$	Energiestromvektor Prozesswärme für elektrische Energie	MJ h^{-1}	$s_{64\,pot}$	Energiestromvektor potentielle Prozesswärmebereitstellung	MJ h^{-1}
$s_{64\,BDRF}$	Energiestromvektor Prozesswärmebedarf	MJ h^{-1}			

Bereitstellung und Bedarf an elektrischer Energie

Der in Form des Energiestromvektors ($s_{64\,el}$) vorliegende Dampf wird mittels einer Dampfturbine und eines Generators zur Bereitstellung von elektrischer Energie eingesetzt. Für die Umwandlung wird ein Gesamtwirkungsgrad (G_{el}^{AFBR}) von 35 % (m/m) angenommen. Die bereitgestellte elektrische Energie steht abzüglich des Bedarfs der Wasseraufbereitung für andere Aktivitäten zur Verfügung.

In der Wasseraufbereitung ist der mechanische Brüdenverdichter im Verdampfer Hauptverbraucher elektrischer Energie. Der Bedarf des Verdichters ist von der verdampften beziehungsweise recycelten Wassermenge (V_{VRDM}^{AFBR}) abhängig. Dieser entspricht dem Stoffstromvektor (w_{14}). Der Energiebedarf ($E_{el,VRDM}^{AFBR}$) wird auf Basis von Herstellerangaben mit 17 kWh t^{-1} abgeschätzt (GIG Karasek, 2012).

Über den Bedarf der oben aufgeführten Komponenten hinaus umfasst die Wasseraufbereitung weitere Verbraucher. Dazu zählen neben Mess-, Steuer- und Regelungstechnik beispielsweise der anteilige Bedarf für Verwaltungsaufgaben. Diese Verbraucher werden pauschal mit Hilfe des Zuschlagsfaktors ($f_{KOR,el}^{AFBR}$) von 1,1 abgedeckt. Unter Berücksichtigung der Bereitstellung elektrischer Energie ergibt sich der Bedarfs- beziehungsweise Bereitstellungsvektor der Wasseraufbereitung (s_{54}) demnach zu:

Gleichung 4.58

$$S_{54} = f_{KOR,el}^{AFBR} \cdot E_{el,VRDM}^{AFBR} \cdot w_{14} - S_{64\ ELKTR} \cdot G_{el}^{AFBR}$$

mit:

S_{54}	Energiestromvektor elektrische Energie	MJ h^{-1}	$f_{KOR,el}^{AFBR}$	Zuschlagsfaktor Wasseraufbereitung
$E_{el,VRDM}^{AFBR}$	Bedarf elektrische Energie Verdampfer	MJ t^{-1}	w_{14}	Stoffstromvektor Wasser t h^{-1}
$S_{64\ el}$	Energiestromvektor Prozesswärme für elektrische Energie	MJ h^{-1}	G_{el}^{AFBR}	Wirkungsgrad elektrische Energie

Die elektrische Leistung der Turbine und des Generators entspricht damit dem Bereitstellungsvektor (S_{54}). Dieser bildet die Grundlage der in Kapitel 5 folgenden Investitionskosten-schätzung. Um eine einheitliche Nomenklatur zu gewährleisten, wird die Leistung der Turbine im Folgenden mit (V_{TRBN}^{AFBR}) angegeben.

Kühlbedarf

Der Kühlbedarf der Modellanlage wird mit Hilfe von Kühlwasser gedeckt. Das Kühlwasser erwärmt sich dabei von 25 auf 30 °C. Bedarf an Kühlwasser besteht in der Wasseraufbereitung durch den Kondensator der Dampfturbine. Der Anteil des Energiestromvektors ($S_{64\ el}$), der nicht in elektrische Energie umgewandelt wird, muss über den Kondensator abgeführt werden oder tritt als Übertragungs- oder Abstrahlverlust (G_{VRLST}^{AFBR}) auf. Übertragungs- und Abstrahlverluste werden pauschal mit 1 % angenommen. Der Kühlbedarf der Wasseraufbereitung (S_{74}) ergibt sich demnach zu:

Gleichung 4.59

$$S_{74} = S_{64\ el} \cdot (1 - G_{el}^{AFBR}) \cdot (1 - G_{VRLST}^{AFBR})$$

mit:

S_{74}	Energiestromvektor Kühlbedarf	MJ h^{-1}	$S_{64\ el}$	Energiestromvektor Prozesswärme für elektrische Energie	MJ h^{-1}
G_{el}^{AFBR}	Wirkungsgrad elektrische Energie	%	G_{VRLST}^{AFBR}	Verlust	%

Ergebnis der Umsetzung

Der erzeugte Prozessdampf reicht aus, den eigenen Bedarf zu decken und darüber hinaus Prozesswärme für die anderen Aktivitäten bereitzustellen. Darüber hinaus kann ein erheblicher Anteil des Gesamtbedarfes elektrischer Energie aus dem Dampfüberschuss erzeugt werden (Tabelle 4-14).

Tabelle 4-14: Energiestromvektoren der Fermentation, Basis 1 t aufschließbares Substrat

Energiestromvektor	Bezeichnung	Einheit	Input (-)	Output (+)
s_{54}	Bedarf an elektrischer Energie	kW t^{-1}		63,88
s_{64}	Dampfbedarf / Dampf-überschuss	MJ t^{-1}		180,41
s_{74}	Kühlbedarf	MJ t^{-1}	-522,93	

4.4 Ergebnisse des Stoff- und Energiestrommodells

Für die Modellierung der Stoff- und Energieströme wird der Ansatz der linearen Aktivitätsanalyse gewählt und auf die Problemstellung übertragen. Das Ergebnis ist eine Einteilung in vier Prozessstufen beziehungsweise Aktivitäten, die mit Hilfe eines Gleichungssystems beschrieben werden. Die betrachteten Aktivitäten v_1, v_2, v_3 und v_4 bilden die zur Verfügung stehende Technologiemenge ab. Dabei bestimmen die dargestellten Einsatzstoffe und Produkte der jeweiligen Aktivitäten den $m = 22$ -dimensionalen Güterraum. Die Grundform jedes Aktivitätsvektors kann somit wie folgt dargestellt werden:

$$v_j = \begin{bmatrix} r_{1j} \\ r_{2j} \\ s_{1j} \\ s_{2j} \\ s_{3j} \\ w_{1j} \\ w_{2j} \\ w_{3j} \\ z_{1j} \\ s_{4j} \\ w_{4j} \\ w_{5j} \\ z_{2j} \\ w_{6j} \\ w_{7j} \\ y_{1j} \\ y_{2j} \\ y_{3j} \\ z_{4j} \\ s_{5j} \\ s_{6j} \\ s_{7j} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{Weizenstroh, Anteil Trockenmasse} \\ \text{Weizenstroh, Anteil Wasser} \\ \text{Wasser} \\ \text{Schwefelsäure} \\ \text{Calciumhydroxid} \\ \text{Aufschließbare Zucker} \\ \text{Reststoffe in Maische} \\ \text{Wasser in Maische} \\ \text{Gips} \\ \text{Enzyme} \\ \text{ABE – Produkte in Kondensat} \\ \text{Wasser in Kondensat} \\ \text{Gasförmige Emissionen} \\ \text{Reststoffe in Fermentationsbrühe} \\ \text{Wasser in Fermentationsbrühe} \\ n - \text{Butanol} \\ \text{Aceton} \\ \text{Ethanol} \\ \text{Asche} \\ \text{elektrische Energie} \\ \text{Prozesswärme} \\ \text{Kühlbedarf} \end{bmatrix}$$

Aktivitätsvektoren

Die Aktivitätsvektoren der Biomassevorbereitung (v_1), Fermentation (v_2), Separation (v_3) und Wasseraufbereitung (v_4) folgen aus der Umsetzung in den Kapiteln 4.2 und 4.3. Sie lassen sich wie folgt abbilden:

$$\begin{aligned}
v_1 = & \begin{bmatrix} -1 \\ -0,16 \\ -6,50 \\ -0,10 \\ -0,08 \\ 0,64 \\ 0,46 \\ 6,64 \\ 0,11 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -37,43 \\ -291,37 \\ -438,22 \end{bmatrix}, v_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \\ -0,72 \\ -10,38 \\ 0 \\ -0,06 \\ 0,39 \\ 0,13 \\ 0,52 \\ 0,87 \\ 10,25 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -514,68 \\ 0 \\ -315,14 \end{bmatrix}, v_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0,33 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \\ -0,33 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0,63 \\ 0,33 \\ 0,04 \\ 0 \\ -6,42 \\ -3982,32 \\ -2899,49 \end{bmatrix}, v_4 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0,83 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0,10 \\ -0,08 \\ -0,92 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0,01 \\ 63,88 \\ 180,40 \\ -522,97 \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

Umweltvektor

Die Modellierung der Massenströme erfolgt ausgehend von Gleichung 4.15, der geplanten Kapazität (Kap) von 100.000 t a⁻¹ ABE-Produkte und der Produktionsdauer (Bh) von 8.000 h a⁻¹. Durch Auflösen erhält man für die Intensitäten $\lambda_1^* = 399.440$, $\lambda_2^* = 255.456$, $\lambda_3^* = 99.500$ und $\lambda_4^* = 2.841.696$. Der Umweltvektor (x^{uw*}) ergibt sich damit wie folgt:

$$x^{uw*} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ -0,16 & 0 & 0 & 0 \\ -6,50 & 0 & 0,33 & 0,83 \\ -0,10 & 0 & 0 & 0 \\ -0,08 & 0 & 0 & 0 \\ 0,64 & -1 & 0 & 0 \\ 0,46 & -0,72 & 0 & 0 \\ 6,64 & -10,38 & 0 & 0 \\ 0,11 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0,06 & 0 & 0 \\ 0 & 0,39 & -1 & 0 \\ 0 & 0,13 & -0,33 & 0 \\ 0 & 0,52 & 0 & 0,10 \\ 0 & 0,87 & 0 & -0,08 \\ 0 & 10,25 & 0 & -0,92 \\ 0 & 0 & 0,63 & 0 \\ 0 & 0 & 0,33 & 0 \\ 0 & 0 & 0,04 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,01 \\ -37,43 & -514,68 & -6,42 & 63,88 \\ -291,37 & 0 & -3982,32 & 180,40 \\ -438,22 & -315,14 & -2899,49 & -522,97 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 399.440 \\ 255.456 \\ 99.500 \\ 2.841.696 \end{bmatrix}$$

Stoff- und Energieströme der Modellanlage

Bezogen auf eine Produktionsdauer (Bh) von 8.000 h a^{-1} lässt sich aus den oben aufgeführten jährlichen Massen die jährliche Massenbilanz ermitteln. Sie ist die Basis für die Erweiterung des Modells um eine wirtschaftliche und ökologische Betrachtung.

Tabelle 4-15: Stoff- und Energieströme der Modellanlage des Basisszenarios

Bezeichnung	Einheit	Vektor	Betrag a^{-1}	Betrag h^{-1}
Weizenstroh (FM)	t	$x_{r1}^{uw} + x_{r2}^{uw}$	-464.465	-58,1
Wasser	t	x_{s1}^{uw}	-57.060	-7,1
Schwefelsäure	t	x_{s2}^{uw}	-41.142	-5,1
Calciumhydroxid	t	x_{s3}^{uw}	-31.083	-3,9
Gips	t	x_{z1}^{uw}	44.002	5,5
Enzyme	t	x_{s4}^{uw}	-15.583	-1,9
Gasförmige Emissionen	t	x_{z2}^{uw}	425.558	53,2
n-Butanol (99,5%)	t	x_{y1}^{uw}	63.000	7,9
Aceton (99,5%)	t	x_{y2}^{uw}	33.000	4,1
Ethanol (99,5%)	t	x_{y3}^{uw}	4.000	0,5
Asche	t	x_{z5}^{uw}	39.774	5,0
Elektrische Energie	kWh	x_{s5}^{uw}	60.432.528	4.321
Prozesswärme	MJ	x_{s6}^{uw}	0	0
Kühlbedarf	MJ	x_{s7}^{uw}	-2.030.044.690	-253.755

Zusammenfassung

Im vorliegenden Kapitel wurde ein Stoff- und Energiestrommodell einer Modellanlage zur Herstellung von n-Butanol entwickelt. In diesem Rahmen wurde ein Basisszenario definiert. Als Grundlage für die Erweiterung des Modells um eine wirtschaftliche und ökonomische Betrachtung liegt eine aggregierte Form aller Stoff- und Energieströme vor, die die Grenzen der Anlage überschreiten. Darüber hinaus ermöglicht das entwickelte Modell die Berücksichtigung technischer und technologischer Modifikationen. In Kapitel 7 wird ein Fortschrittsszenario unter Berücksichtigung möglicher technologischer Entwicklungen vorgestellt. Im Gegensatz zum Basisszenario kommen in diesem Szenario auch Konzepte zum Einsatz, die großtechnisch nicht etabliert sind.

5 Erweiterung des Modells um eine Wirtschaftlichkeitsbetrachtung

Die gerätetechnische Einsetzbarkeit von n-Butanol als Biokomponente wird in Kapitel 3 grundsätzlich nachgewiesen. Darüber hinaus wird ein Modell zur Produktion von n-Butanol aus Weizenstroh in Form einer Stoff- und Energiestrommodellierung in Kapitel 4 vorgelegt. Das Ziel dieses Kapitels ist die Erweiterung des Modells um eine Wirtschaftlichkeitsbetrachtung. Dabei wird das entwickelte Stoff- und Energiestrommodell zunächst um eine Investitionskostenschätzung der Modellanlage zur Produktion von n-Butanol aus Reststroh erweitert. Basierend darauf erfolgt im zweiten Schritt die Abbildung der Zahlungsströme der Modellanlage. Alle Annahmen der folgenden Umsetzung basieren dabei auf dem Preisniveau des Jahres 2012. Den Abschluss bildet die Darstellung der Ergebnisse.

5.1 Investitionskostenabschätzung der Modellanlage

In der angelsächsischen Literatur werden die Begriffe Kostenschätzung (*cost estimating*) und Kostenkalkulation (*cost calculation*) klar getrennt. Die Betriebswirtschaft und das betrieblichen Controlling bezeichnen Kostenschätzung im deutschen Sprachraum dennoch häufig als Kalkulation. Im Folgenden wird unter Kostenkalkulation eine Aufsummierung ex post aller tatsächlichen Kosten auf Basis von Einzelpreisen zu einer Gesamtposition verstanden. Die Kostenschätzung beschreibt ex ante eine Näherung auf Basis der zur Verfügung stehenden Angaben und Annahmen (Strauch, 2008).

Im Folgenden werden einleitend die Kapitalbedarfspositionen einer prozesstechnischen Anlage dargestellt sowie bestehende Ansätze zur Kostenschätzung diskutiert. Nach der Identifikation eines geeigneten Verfahrens folgt die Umsetzung der Investitionskostenschätzung auf Basis der in Kapitel 4 identifizierten Stoff- und Energieströme. Das Kapitel schließt mit der Auswertung der Ergebnisse.

5.1.1 Methodisches Vorgehen der Investitionskostenabschätzung einer Modellanlage zur Herstellung von n-Butanol

5.1.1.1 Kostenstruktur prozesstechnischer Anlagen

In der Literatur existieren verschiedene Strukturen zur Erfassung der Kapitalbedarfspositionen. Sie unterscheiden sich hinsichtlich der Klassifizierung der einzelnen Positionen (vgl. hierzu: (Remmers, 1991; Peters, et al., 2004; Dysert, 2003)). Exemplarisch wird im Folgenden das Vorgehen von Peters et al. vorgestellt.

Die Gesamtinvestition (*Total Capital Investment*, TCI) setzt sich aus den fixen Investition (*Fixed Capital Investment*, FCI) und dem Umlaufvermögen (*Working Capital*, WC) zusammen. Um der im Anlagenbau verwendeten Nomenklatur gerecht zu werden, werden die Begriffe im Folgenden in englischer Sprache verwendet.

Gleichung 5.1

$$TCI = FCI + WC$$

mit:

<i>TCI</i>	Total Capital Investment	€	<i>FCI</i>	Fixed Capital Investment	€
<i>WC</i>	Working Capital	€			

Das Fixed Capital Investment enthält alle Kosten, die im direkten Zusammenhang mit der Errichtung der Anlage stehen. Dazu zählen direkte Kosten (*Direct Cost*, DC) und indirekte Kosten (*Indirect Cost*, IC).

Gleichung 5.2

$$FCI = DC + IC$$

mit:

<i>FCI</i>	Fixed Capital Investment	€	<i>DC</i>	Direct Cost	€
<i>IC</i>	Indirect Cost	€			

Direct Cost umfassen die Komponenten der Anlage und alle Positionen, die unmittelbar der Herstellung der Funktionalität zugeordnet werden können. Indirect Cost umfassen alle weiteren Kosten, die beispielsweise für die Planung und Errichtung, zu deren Kontrolle und Genehmigung anfallen. Die Zusammensetzung der Kapitalbedarfspositionen einer Anlage variieren mit ihrer Art. Tabelle 5-1 zeigt eine Aufstellung des Fixed Capital Investment.

**Tabelle 5-1: Fixed Capital Investment prozesstechnischer Anlagen
(in Anlehnung an Peters (2004))**

Fixed Capital Investment (FCI)		
Direct Cost		Anteil der FCI
1.	Apparate und Maschinen inkl. Ersatzteile, Transport etc.	15-40 %
2.	Montage	6-14 %
3.	Mess-, Steuer- und Regelungstechnik	2-12 %
4.	Rohrleitungen	4-17 %
5.	Elektrische Ausrüstung	2-10 %
6.	Gebäude und Stahlbau	2-18 %
7.	Grundstückerschließung und Infrastruktur	2-5 %
8.	Nebenanlagen und –Einrichtungen	8-30 %
9.	Grundstück	1-2 %
Indirect Cost		Anteil der FCI
1.	Ingenieurleistungen und Überwachung	4-20 %
2.	Genehmigung und Rechtskosten	4-17 %
3.	Kosten für Baustelleneinrichtung und –betrieb	1-3 %
4.	Unternehmergewinn	2-6 %
5.	Unvorhergesehenes	5-15 %

Das Working Capital beinhaltet alle Positionen zur Erstinbetriebnahme und zum Betrieb der Anlage. Es umfasst den Lagerbestand an Roh-, Hilfs- und Betriebsstoffen sowie Fertig- und Halbfertigerzeugnissen zur Erstinbetriebnahme. Darüber hinaus sind Forderungen, Steuerzahlungen und sonstige Verbindlichkeiten enthalten. Abhängig von den Zahlungsmodalitäten für Forderungen und Verbindlichkeiten beträgt die Höhe des Working Capital üblicherweise die Summe der Produktionskosten von 1-2 Monaten.

5.1.1.2 Ansätze zur Investitionskostenabschätzung

5.1.1.2.1 Summarische Verfahren

Bei summarischen Verfahren erfolgt die Investitionskostenabschätzung auf Basis des Umsatzes, der Kapazität oder der Zahl von Teilsystemen. Bauliche und/oder technische Besonderheiten werden nicht berücksichtigt. Grundlage der Abschätzungen sind historische Vergleichsanlagen oder andere Datensätze. Summarische Verfahren zählen damit zu den stochastischen Methoden (Dysert, 2003). Im Folgenden werden die wichtigsten summarischen Verfahren in Anlehnung an Kerdoncuff (2008) vorgestellt.

Umschlagskoeffizient des Anlagekapitals

Bei dieser groben Schnellschätzmethode wird der Anlagekapitalbedarf aus dem geplanten Jahresumsatz und den branchenspezifischen Investitionskosten pro Produktmenge ermittelt (Schembra, 1993a). Dabei bleibt der Einfluss der Kapazität auf die Investition unberücksichtigt.

tigt. Darüber hinaus werden auch die Rahmenbedingungen prozesstechnischer Anlagen nicht beachtet, die sich mit dem Standort und dem Baujahr stark unterscheiden. Aufgrund der hohen Unsicherheit findet die Methode in der Praxis daher kaum Anwendung (Schleef, 1999; Schweyer, 1952).

Spezifische Kapitalbedarfsziffern

Die Kritik am Verfahren des Umschlagskoeffizienten des Anlagekapitals führte zur Übertragung des Ansatzes auf ein kapazitätsgestütztes Modell. Dabei wird der Anlagekapitalbedarf aus der geplanten Anlagenkapazität abgeleitet. Im einfachsten Fall wird die Proportionalität des Kapitalbedarfs zur geplanten Kapazität angenommen und das Anlagekapital über die Extrapolation des Kapitalbedarfes einer bestehenden Anlage abgeschätzt. Da technologie-spezifische Einflüsse nicht beachtet werden, weist diese Vorgehensweise eine hohe Ungenauigkeit auf. Durch die Einbeziehung von Preisentwicklungen, Standorteinflüssen und der Berücksichtigung kapazitätsabhängiger Einflüsse kann die Genauigkeit jedoch deutlich erhöht werden (Kerdoncuff, 2008). Im Folgenden werden die drei Verfahren vorgestellt.

- Zeitindizes

Zur Kompensation unterschiedlicher Errichtungszeitpunkte kann auf Zeitindizes zurückgegriffen werden. Zeitindizes bilden die Preisentwicklung über die Zeit für Komponenten oder Gesamtanlagen anhand eines Warenkorbs ab. Insbesondere für den nordamerikanischen Raum können unter anderem der *Chemical Engineering Plant Cost Index*, der *Marshall and Swift installed-Equipment Index* und der *Engineering News-Record Construction Index* herangezogen werden. Die Preisentwicklung für den deutschen Raum wird seit 1962 durch den *Kölbel-Schulze-Index* abgebildet. Alle Indizes werden regelmäßig, überwiegend monatlich, veröffentlicht. Der wichtigste internationale Index ist der *Chemical Engineering Plant Cost Index* (Coker, 2007). Sein Verlauf der letzten Jahre ist in Abbildung 5-1 dargestellt.

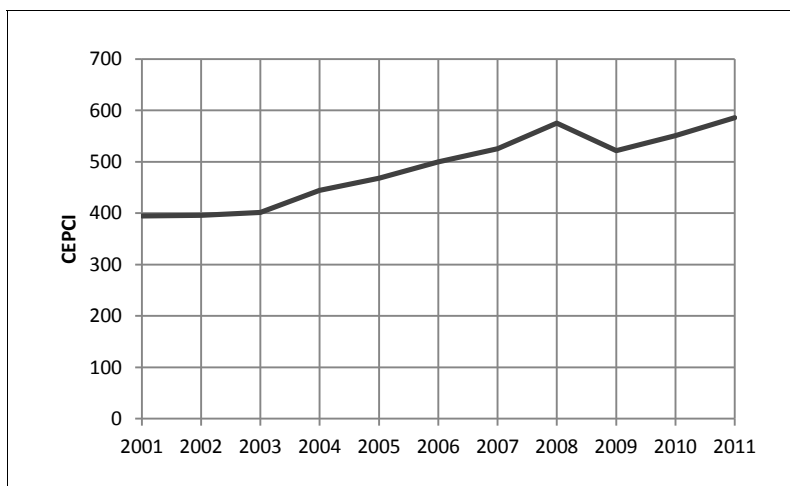


Abbildung 5-1: Verlauf der Jahresmittelwerte des Chemical Engineering Plant Cost Index (vgl. Chemical Engineering (2001-2011))

Aufgrund technologischer Fortschritte sind Abschätzungen mit Hilfe des Indexes umso genauer, je kürzer der zwischen den Zeitpunkten liegende Zeitraum ist. Der Ansatz ist insbesondere für Schätzungen innerhalb eines Zeitraumes von zehn Jahren geeignet (Peters, et al., 2004).

Gleichung 5.3

$$I_a = I_b \cdot \frac{in_a}{in_b}$$

mit:

I_a	Investition zum Zeitpunkt a	€	I_b	Investition zum Zeitpunkt b	€
in_a	Index zum Zeitpunkt a	-	in_b	Index zum Zeitpunkt b	-

- **Standortindizes**

Neben einer zeitlichen Preisentwicklung treten Unterschiede in den standortabhängigen Bedingungen auf. Diese können die Vergleichbarkeit des Anlagekapitals prozesstechnischer Anlagen insbesondere in unterschiedlich entwickelten Ländern beeinflussen. Zur Kompensation können Standortindizes herangezogen werden, die aus der Nachkalkulation durchgeführter Projekte stammen. Unter anderem werden unterschiedliche Produktivität, klimatische Verhältnisse, Verfügbarkeit von Prozessausrüstung, Berufsausbildungsniveau und Lohnniveau berücksichtigt (Schembra, 1993b). Die regelmäßige Veröffentlichung geht auf Winton (1977) zurück.

- **Größendegressionsansatz**

Die bekannteste der summarischen Verfahren ist die Kapazitätsmethode mit Degressionsexponenten. Williams (1947) erkannte, dass die Anlagekosten bestimmter Apparate und Maschinen unterproportional zur Kapazität mit einem Exponenten von 0,6 steigen. Chilton (1950) erweiterte den Ansatz auf die Investitionskosten von Komplettanlagen und konnte die Gesetzmäßigkeit allgemein bestätigen. Dies hat unter anderem folgende Gründe. Der Materialaufwand für Behälter und Rohrleitungen wächst unterproportional zu deren Volumen, ebenso der Aufwand für die Planung, Montage und die Mess-, Steuer- und Regelungstechnik. Der Degressionsexponent variiert mit Anlagentyp und Branche. Eine Reihe detaillierter Datenbanken dazu wurden u.a. von Guthrie (1977), Kölbel (1982), Garret (1989) und Schembra (1993b) veröffentlicht:

Gleichung 5.4

$$I_a = I_b \cdot \left(\frac{Kap_a}{Kap_b} \right)^{exp}$$

mit:

I_a	Investition bei Kapazität a	€	I_b	Investition bei Kapazität b	€
Kap_a	Kapazität a	t a ⁻¹	Kap_b	Kapazität b	t a ⁻¹
exp	Degressionsexponent	$exp \in \mathbb{R}^+$			

Typisch sind Degressionsexponenten zwischen 0,5 und 0,85 (Dysert, 2003). Die Genauigkeit des Verfahrens liegt bei etwa 50 % (AAE, 2011). Der spezifische Degressionsexponent steigt mit zunehmender Kapazität an (siehe Abbildung 5-2). Bei hohen Kapazitäten ist es wirtschaftlich oft sinnvoller, zwei Standardaggregate anstelle eines großen einzusetzen (Dysert, 2003). Der spezifische Degressionsexponent beträgt in diesen Fällen annähernd 1.

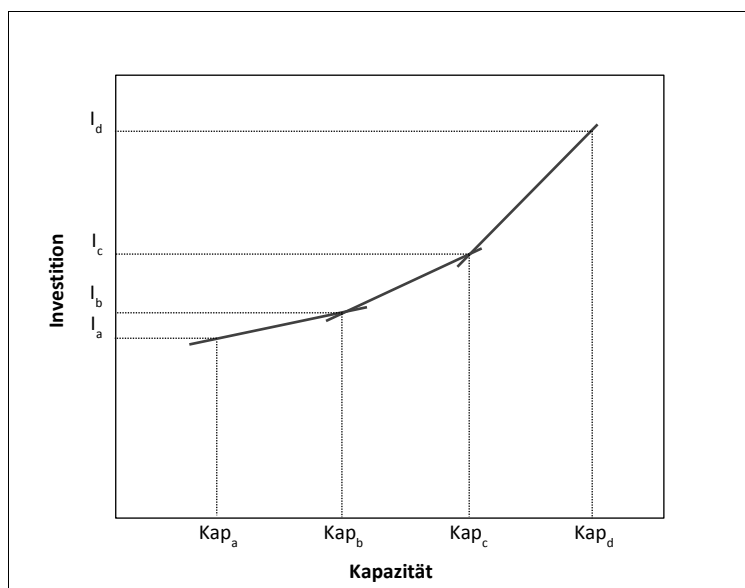


Abbildung 5-2: Verlauf des Degressionsexponenten in Abhängigkeit der Kapazität in logarithmischer Darstellung (in Anlehnung an Dysert (2003))

Hauptkritikpunkte der ausschließlichen Nutzung dieser Methode sind die Nichtbeachtung des technologischen Fortschritts und die grundsätzliche Schwierigkeit, Anlagen durch ihre unterschiedlichen Konfigurationen und Standorte zu vergleichen (vgl. hierzu: Holland et al. (1988)). Darüber hinaus sind Ausschlüsse aus dem Lieferumfang des Anlagenbauers oft unbekannt. Um höhere Genauigkeiten zu erreichen, sollte die Methode nur unter deren Berücksichtigung zur Anwendung kommen (Strauch, 2008).

Es existieren weitere Vorgehensweisen, die auf diesem Ansatz basieren (vgl. hierzu: Schembra (1993b)). Zu den bekanntesten zählen die Methoden von Allen (1975; 1976), Herbert und Bisio (1976), Stallworthy (1970), Taylor (1977) sowie Wilson (1971). Der Größen-

degressionsansatz kann darüber hinaus Anwendung in der Abbildung der Personalkosten in Abhängigkeit der Kapazität einer Anlage finden (vgl. hierzu: Hamelinck et al. (2005), Lange (2007)).

5.1.1.2.2 Zuschlagsfaktormethoden

Zuschlagsfaktormethoden berücksichtigen die eingesetzte Technologie in Produktionssystemen detaillierter als summarische Verfahren. Sie liefern daher eine höhere Genauigkeit. Voraussetzung ist die Ermittlung aller Kosten für Apparate und Maschinen. Diese Klasse von Schätzmethoden wird daher auch *Equipment-Factored Estimation* (EFE) genannt. Zuschlagsfaktormethoden basieren auf aktuellen Lieferantenangeboten und zählen damit zu den deterministischen Schätzmethoden (Dysert, 2003). Die Verbesserung in der Genauigkeit gegenüber summarischen Verfahren lässt sich maßgeblich auf die bekannte Kostenstruktur prozesstechnischer Anlagen zurückführen (siehe Kapitel 5.1.1.1). Der Anteil der Kosten für Apparate und Maschinen an den Gesamtinvestitionen von Anlagen ist für ähnliche Typen vergleichbar hoch. Die Nebenpositionen weisen hingegen eine stärkere Abhängigkeit von den Randbedingungen auf (Strauch, 2008). Infolge der projektindividuellen Berücksichtigung der Randbedingungen steigt die Genauigkeit.

Globale Zuschlagssätze

Basis der Methode ist eine detaillierte Kostenermittlung der Apparate und Maschinen (I_{BL}). Die Summe der Kosten wird ausschließlich mit einem Globalfaktor multipliziert. Eine Berücksichtigung von direkten und indirekten Nebenpositionen wird im Unterschied zur später diskutierten Methode differenzierter Zuschlagssätze nicht vorgenommen. Die Methode wurde von Lang (1948) entwickelt und ist auch als der Lang'sche Ansatz bekannt. Lang unterscheidet nach verschiedenen Aggregatzuständen von Prozessmedien. Für feste Medien schlägt er einen Zuschlagsfaktor von 3,1 auf alle Apparate und Maschinen vor, für flüssige 4,74 und für fest-flüssige 3,63. Haselbarth (1960), Miller (1965), Wilson (1971), Mach (1971) und andere entwickelten den Ansatz in Bezug auf die Berücksichtigung von Temperatur und den Druck der Medien sowie der eingesetzten Werkstoffe weiter.

Mit dieser Methode lassen sich zwar technologische Entwicklungen abbilden, jedoch ist der Aufwand zur Erstellung einer detaillierten Kostenermittlung relativ hoch. Detaillierte Kosteninformationen für Apparate und Maschinen liegen meist erst in der Phase des Basic Engineerings vor. Daher resultiert ein häufiger Schätzfehler dieser Methode aus der Unvollständigkeit der Ausgangslisten (Baasel, 1990). Die Genauigkeit liegt bei etwa $\pm 30\%$ (Schembra, 1993b).

Differenzierte Zuschlagssätze

Wie auch bei der Schätzung mit globalen Zuschlagssätzen basiert die Schätzung mit differenzierten Zuschlagssätzen auf einer detaillierten Ermittlung der Kosten für Apparate und Maschinen (I_{AM}). Im Unterschied werden hier jedoch differenzierte Zuschlagssätze für alle

Nebenpositionen angewendet. Sie berücksichtigen beispielsweise den Aggregatzustand der Medien, die Kapazität der Anlage und verwendete Werkstoffe. Die Methoden differenzierter Zuschlagssätze gelten daher als die Weiterentwicklung der Methoden globaler Zuschlagssätze (Schembra, 1993b). Grundsätzlich lassen sich dabei additive und multiplikative Methoden unterscheiden:

Gleichung 5.5

$$I = I_{AM} \cdot \sum_z a_z \quad \text{bzw.} \quad I = I_{AM} \cdot \prod_z a_z$$

mit:

I	Investition	€	I_{AM}	Investition Apparate & Maschinen	€
a_z	Zuschlagssatz		$a \in IR^+$		

Methoden differenzierter Zuschlagssätze sind u.a. von Chilton (1949), Bach (1958), Garret (1989) und Rudd (1968) vorgestellt worden. Tabelle 5-2 zeigt exemplarisch die differenzierten Zuschläge der Methode nach Peters et al. (2004). Die Genauigkeiten von Methoden mit differenzierten Zuschlagssätzen liegen bei ± 20 – 30 %. Werden mit der Methode ähnliche konfigurierte Anlagen verglichen kann die Genauigkeit auf bis zu ± 10 % steigen (Peters, et al., 2004).

Tabelle 5-2: Investitionskostenabschätzung mit Hilfe differenzierter Zuschlagssätze nach Peters et al. (2004)

	Anteil (% I_{AM}) in Abhängigkeit des Anlagentyps		
	Feststoff	Fest-Flüssig	Flüssigkeit
Direct Cost			
Apparate und Maschinen (inkl. Ersatzteile, Transport etc.)	100	100	100
Montage	45	39	47
Mess-, Steuer- und Regelungstechnik	18	26	36
Rohrleitungen	16	31	68
Elektrische Ausrüstung	10	10	11
Gebäude und Stahlbau	25	29	18
Grundstückerschließung und Infrastruktur	15	12	10
Nebenanlagen und –Einrichtungen	40	55	70
Summe Direct Cost	269	302	360
Indirect Cost			
Ingenieurleistungen und Überwachung	33	32	33
Kosten für Baustelleneinrichtung und –betrieb	39	34	41
Genehmigung und Rechtskosten	4	4	4
Unternehmensgewinn	17	19	22
Unvorhergesehenes	35	37	44
Summe Indirect Cost	128	126	144
Summe Fixed Capital Investment	397	428	504
Working Capital (15% des Total Capital Investment)	70	76	89
Total Capital Investment	467	504	593

5.1.1.2.3 Modulare Methoden

Modulare Methoden zielen auf eine weitere Detaillierung der Anlagenkomponenten in Module und eine damit verbundene höhere Genauigkeit. Ausgangspunkt für die Entwicklung modularer Methoden ist die Feststellung, dass nicht alle Anlagenteile beziehungsweise Module den gleichen Anforderungen hinsichtlich Druck, Temperatur oder Werkstoffeigenschaften unterliegen (Remmers, 1991). Die Modularisierung lässt sich prinzipiell für alle bisher genannten Methoden anwenden. Im Folgenden wird sie für Methoden der globalen und differenzierten Zuschlagssätze sowie für das modulare Konzept auf Basis objektorientierter Werkzeuge dargestellt.

Modulare Faktormethoden für globale Zuschlagssätze

Basierend auf der Methode globaler Zuschlagssätze werden die Kosten für direkte und indirekte Nebenpositionen mit Hilfe eines Zuschlagssatzes abgebildet. Diese basieren auf den In-

vestitionen für Apparate und Maschinen eines jeden Moduls. So entwickelte Wroth (1960) einen Ansatz, in dem er für jedes Modul den Typ der eingesetzten Komponenten für die Schätzung des Zuschlagssatzes berücksichtigt. Clerk (1963) schlägt einen ähnlichen Ansatz hinsichtlich der Werkstoffwahl vor. Der Vorteil dieser Methoden liegt wie auch bei den allgemeinen globalen Zuschlagssätzen in der einfachen Handhabung und der Einsetzbarkeit in frühen Planungsphasen. Die Genauigkeiten liegen bei $\pm 25 - 30 \%$.

Modulare Faktormethoden für differenzierte Zuschlagssätze

Eine deutliche Verbesserung der Genauigkeiten bieten modulare Faktormethoden, die auf differenzierten Zuschlagssätzen basieren. Wie auch bei den allgemeinen Methoden differenzierter Zuschlagssätze wird die Kenntnis der Kosten aller Hauptpositionen vorausgesetzt. Sie ist damit erst in der Phase des Basic Engineerings anzuwenden. Prinzipiell existieren auch hier additive und multiplikative Methoden. Exemplarisch für einen additiven Aufbau steht die Methode von Hand (1958). Er orientiert sich am Lang'schen Ansatz (siehe Kapitel 5.1.1.2.2) und differenziert die Ausrüstungstypen über die Prozessmedien anstatt über die Aggregatzustände. Dabei werden für jede Position, wie Kolonne, Wärmetauscher, Pumpe, spezifische Zuschläge für Material, indirekte Kosten und Montage erhoben (Dhillon, 1989).

Gleichung 5.6

$$I = \sum_z I_z a_z$$

mit:

I	Investition	€	I_z	Investition der Ausrüstungsart z	€
a_z	Zuschlagssatz	$a \in \mathbb{R}^+$			

Miller (1965) berücksichtigt in der von ihm vorgestellten Methode den Einfluss der Unsicherheit. Das Ergebnis ist eine stochastische Auswertung mit einem Erwartungswert und einem Konfidenzintervall. Für jedes Modul ermittelt der Anwender der Methode verschiedene Szenarien in Abhängigkeit ihres Aufwandes. Diese können beispielsweise ein wahrscheinliches durchschnittlich aufwändiges Szenario, ein wenig aufwändiges und ein sehr aufwändiges Szenario sein.

Eine weitere Methode von Guthrie (1974) greift das Prinzip der Methode von Hand (1958) auf. Über die Differenzierung nach Hauptkomponenten hinaus unterscheidet Guthrie die Zuschlagsfaktoren nach Disziplinen wie Montage, Beton, Stahlstruktur oder Verrohrung. Neben den einzelnen Modulen für verschiedene Ausrüstungsgegenstände definiert er ein Normmodul für unbekannte Ausrüstung. Außerdem stehen Module zur Berücksichtigung der Geländeerschließung, für Gebäude, Hilfs- und Nebenanlagen und zur Bestimmung indirekter Projektkosten zur Verfügung (Strauch, 2008).

Theoretisch bilden Ansätze dieser Art die Investitionskosten mit einer Genauigkeit von $\pm 10 - 20 \%$ ab (Peters, et al., 2004). Die erzielbaren hohen Genauigkeiten basieren jedoch auf der Aktualität der Parameter. In der Praxis veröffentlichen immer weniger Unternehmen ihre Kostensätze, so dass der technologische Fortschritt nur bedingt durch den Einsatz von Zeitindizes berücksichtigt werden kann (Dysert, 2003).

Modulares Konzept auf Basis objektorientierter Werkzeuge

Die diskutierten modularen Ansätze zur Investitionskostenabschätzung basieren auf den mit Zuschlägen versehenen Ausrüstungskosten. Voraussetzung für die Anwendung dieser Methoden ist der Abschluss des Basic Engineerings. Der Ansatz der modularen Planung kehrt dieses Prinzip um. Im Basic Engineering wird auf Anlagenmodule bereits bestehender Projekte zurückgegriffen (*Reuse*). Die Kosten der einzelnen Module liegen dabei auf Basis abgeschlossener Projekte vor. Dabei wird ausgenutzt, dass sich Ausrüstung oder Prozessschritte zu Modulen zusammenfassen lassen. Ein Modul besteht dabei aus Ausrüstung, Mess- und Regelungstechnik und weiteren Komponenten. Es stellt damit einen Querschnitt über alle geforderten Disziplinen dar.

Das Konzept stellt damit nicht nur eine Methode zur Investitionskostenschätzung bereit, sondern liefert ein integriertes Planungswerkzeug (vgl. hierzu: Strauch (2008)). Voraussetzung ist daher die Verfügbarkeit von Spezifikations- und Kosteninformationen auf Basis genormter Module (Hady, et al., 2010). Durch die Intransparenz von Anlagenkosten im Wettbewerb eignet sich diese Methode daher insbesondere unternehmensintern oder für den Einsatz innerhalb von Planungsk Kooperationen.

5.1.1.2.4 Detaillierte Einzelermittlung

Bei der Einzelermittlung werden alle Positionen einer Anlage ermittelt und mit Hilfe von Mengengerüsten und Massenauszügen zur weiteren Berechnung herangezogen. Die Einzelermittlung ist das mit Abstand aufwändigste Verfahren in der Kostenschätzung. Durch den enormen Informationsbedarf ist es erst in der Phase des Detail Engineerings anwendbar. Voraussetzung ist die Kenntnis von Prozessflussdiagrammen, Rohrleitungs- und Instrumentenfließbildern, Listen aller Ausrüstungsgegenstände, Layouts, Isometrien und weiteren Spezifikationen. Trotz des enormen Aufwandes liegen die Genauigkeiten selten unter 5 % (Peters, et al., 2004; Baasel, 1990).

In der Praxis ist es daher üblich, dass im Verlauf eines einzigen Projektes zuerst weniger detaillierte Kostenschätzungen herangezogen werden. Kann das Ergebnis positiv bewertet werden, wird das Projekt weiter verfolgt und die Genauigkeit der Abschätzung bis hin zur detaillierten Einzelermittlung erhöht. Diese kombinierte Vorgehensweise wird auch *Stage Gated Approval Process* genannt (Lawrence, 2008).

5.1.1.2.5 Einordnung der Genauigkeit von Kostenschätzungen

Wie jedes Gut unterliegt auch der Preis einer prozesstechnischen Anlage Markteinflüssen. In Gegenüberstellung zu anderen Gütern ist die Vergleichbarkeit von prozesstechnischen Anlagen durch die Unterschiedlichkeit der Anlagen und ihrer Standorte jedoch nur bedingt gewährleistet. Nach Schwanfelder (1989) existiert durch die Intransparenz der Einflussparameter für Anlagenprojekte kein vollständig objektiver Marktpreis. Für die Preisabschätzung eines Projektes ergibt sich aus der Intransparenz ein Zielkonflikt. Dieser besteht in der Nichtvereinbarkeit von der Genauigkeit der Schätzung und dem dafür notwendigen Planungsstand, der sich in zeitlichem und monetärem Aufwand niederschlägt. Abbildung 5-3 verdeutlicht diesen Zusammenhang.

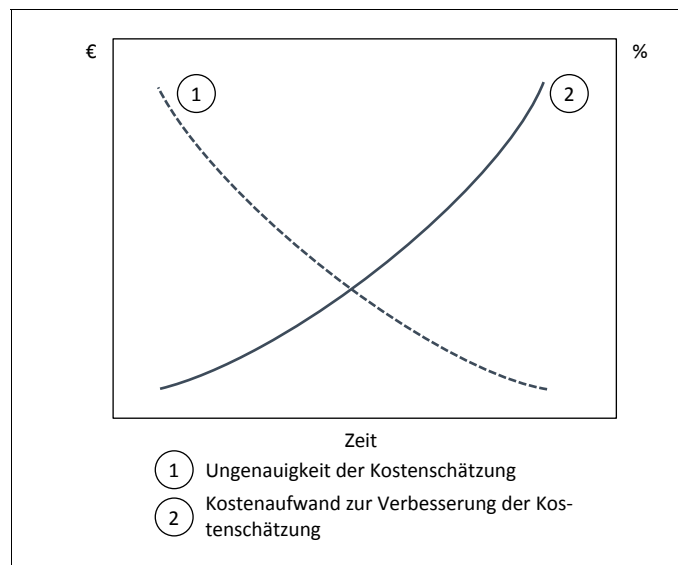


Abbildung 5-3: Zusammenhang zwischen Ungenauigkeit, Bearbeitungskosten und Zeitaufwand eines Projektes (in Anlehnung an Schwind (1979))

Der Planungsstand eines Projektes lässt sich in Projektphasen darstellen. In der Literatur steht dafür eine Vielzahl von Darstellungsmöglichkeiten bereit (vgl. hierzu: Strauch (2008), Sattler und Werner (2000), Schembra (1993b), Aichert et al. (1985)). Im Folgenden wird ein Ansatz in Anlehnung an Sattler und Werner (2000) herangezogen, der auch in der Praxis Verwendung findet. Da sich die Projektphasen inhaltlich nicht immer klar abgrenzen lassen, werden häufig Meilensteine definiert, mit denen ein Teilabschnitt beendet wird (siehe Abbildung 5-4). Um der im Anlagenbau verwendeten Nomenklatur gerecht zu werden, werden die Begriffe im Folgenden in englischer Sprache verwendet.

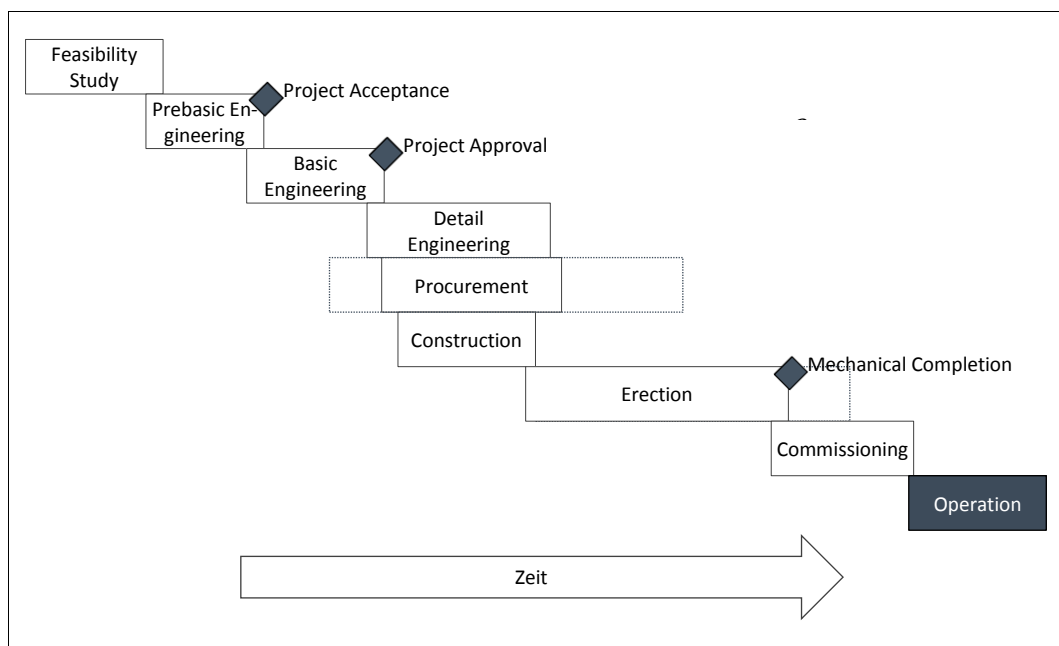


Abbildung 5-4: Lebenszyklus- und Planungsphasen eines Anlagenprojektes (eigene Darstellung in Anlehnung an Sattler und Werner (2000))

Durch die hohen Kosten, die bei der Datenerhebung einer detaillierten Kostenschätzung entstehen, werden in der Praxis Investitionsentscheidungen teilweise mit wenig oder gar keiner ingenieurwissenschaftlichen Unterstützung getroffen (Dysert, 2003). Der in der Literatur angegebene Aufwand für die Investitionskostenschätzung variiert mit der Branche und kann für ein Festpreisangebot um 6 % der Gesamtinvestition betragen (Lawrence, 2008).

Bedingt durch den hohen zeitlichen und monetären Aufwand einer präzisen Kostenschätzung existieren in der Angebotserstellung verschiedene Klassen von Angeboten in Abhängigkeit von der Schätzgenauigkeit. In der Literatur werden verschiedene Systeme vorgestellt (vgl. hierzu: Verein Deutscher Ingenieure (1983) und Association for the Advancement of Cost Engineering (2011)). In Tabelle 5-3 wird exemplarisch ein Klassifizierungssystem der Association for the Advancement of Cost Engineering (AACEI) vorgestellt, das 1951 von Nichols (1951) vorgeschlagen wurde.

Tabelle 5-3: Klassifikation von Kostenschätzung (in Anlehnung an AACEI (2011) und Sattler und Werner (2000))

Kategorie und Bezeichnung	Projektdefinition	Methode der Investitionskostenschätzung	Genauigkeit
Class I: Order of Magnitude	0 – 2 %	Kapazitätsmethoden, Strukturmetho- den mit Globalfaktoren	-35 % - +50 %
Class II: Study	1 – 15 %	Strukturmethode mit globalen oder differenzierten Zuschlagssätzen	-15 % - +30 %
Class III: Preliminary	10 – 40 %	Strukturmethode mit differenzierten Zuschlagssätzen, Modulare Methoden	-15 % - +30 %
Class IV: Definitive	30 – 70 %	Detaillierte Einzelermittlung	-5 % - +15 %
Class V: Detailed	50 – 100 %	Kostenkalkulation mit tatsächlichen Projektkosten	-5 % - +15 %

5.1.1.3 Entwicklung eines angepassten Ansatzes zur Abschätzung der Investitionskosten

Die Abschätzung der Investitionskosten der Modellanlage erfolgt innerhalb des Bilanz- und Betrachtungszeitraums der Stoff- und Energiestrommodellierung (siehe Kapitel 4). Der Bilanzraum entspricht damit der Systemgrenze der Modellanlage. Im Hinblick auf die Basis der ermittelten Stoff- und Energieströme lässt sich der Definitionsgrad des zu untersuchenden Produktionssystems im Stadium zwischen Pre-Basic und Basis Engineering einordnen. Die zu erreichende Genauigkeit der Investitionskostenschätzung beträgt daher zwischen -15 und +30 % (siehe Tabelle 5-3).

Zur Abschätzung der Investitionskosten eignen sich daher insbesondere die Methoden differenzierter Zuschlagssätze. Im Hinblick auf die Ähnlichkeit vieler Bereiche der fermentativen Herstellung von n-Butanol mit der von Ethanol und die Möglichkeit, entsprechende Kosteninformation auf der Ebene der technischen Ausrüstung zur Abschätzung heranzuziehen, wird im Folgenden die Methode von Peters et al. (2004)

eingesetzt. Die Ermittlung der dafür notwendigen Kosten der Apparate und Maschinen (I_{AM}) und des Total Capital Investment erfolgt nach folgender Herangehensweise:

1. Identifikation von Referenzpreisen ($I_{ref,k}$) aller wesentlichen Apparate und Maschinen (k) der Modellanlage und pauschale Berücksichtigung nicht gelisteter Ausrüstungsgegenstände
2. Berücksichtigung der Zielkapazität ausgehend von der Kapazität der Referenz ($Kap_{ref,k}$) mit Hilfe des Größendegressionsansatzes auf Basis individueller Degressionsexponenten (exp_k)
3. Berücksichtigung der Marktentwicklung anhand des Chemical Engineering Plant Cost Indexes als Quotient des Zieljahrsindex (in_{2012}) und des Referenzjahrsindex (in_{ref})
4. Identifikation des Zuschlagssatzes (Z_{TCI}) für die Modellanlage auf Basis von Peters et al. (2004)

Die Modellerweiterung zur Abschätzung des Total Capital Investments über die vorgestellte Herangehensweise lässt sich in folgender Gleichung darstellen:

Gleichung 5.7

$$TCI = Z_{TCI} \cdot \sum_{k \in K} I_{ref,k} \cdot \left(\frac{\sum_{v \in V_k} |v|}{Kap_{ref,k}} \right)^{exp_k} \cdot \frac{in_{2012}}{in_{ref,k}}$$

mit:

TCI	Total Capital Investment	€	Z_{TCI}	Zuschlagsfaktor	-
$I_{ref,k}$	Referenzpreis der Ausrüstung k	t h ⁻¹	v	Stoffstromvektor ³⁷	t h ⁻¹
$Kap_{ref,k}$	Referenzkapazität	t h ⁻¹	exp_k	Degressionsexponent der Ausrüstung k	-
in_{2012}	CEPCI im Zieljahr	-	$in_{ref,k}$	CEPCI im Referenzjahr für Ausrüstung	-

$K = \{RKT; WT1; BND; HCKS; PMP; BFLTR; RHR; ZYKL; VFLTR; WT2; GBLS; RKND; FRMT; NBTL; ACTN; ETHN; ADSR; TNK; VRBR; TRBN\}$

5.1.2 Umsetzung der Investitionskostenabschätzung einer Modellanlage zur Herstellung von n-Butanol

Über die Stoff- und Energieströme der Anlage hinaus werden in Kapitel 4 die Kapazität sowie der Energiebedarf aller wesentlichen Apparate und Maschinen definiert. Die in der Stoff- und Energiestrommodellierung herangezogene Literatur enthält detaillierte Referenzmarktpreise zu den meisten in der Stückliste verzeichneten Apparate und Maschinen. Für alle Positionen, die in der Literatur ohne oder mit nicht ausreichend detaillierten Preisinformationen

³⁷ Die Position der Turbine und des Generators wird nicht in t h⁻¹, sondern in der Einheit kW angegeben. Auf eine doppelte Ausführung der Gleichung wird jedoch verzichtet.

vorliegen, basiert die Abschätzung auf Richtpreisangeboten von Herstellern. Für den in Abschnitt 5.1.1.2.1 erläuterten Größendegressionsansatz und die einzusetzenden Degressions-exponenten wird eine Ausführung von Kazi et al. (2010) herangezogen. Kazi et al. geben eine umfassende Aufstellung der für den Ansatz notwendigen Degressionsexponenten von Komponenten zur Herstellung von Fermentationserzeugnissen an.

Die Vorgehensweise wird im Folgenden am Beispiel des Häckslers in der Rohstoffannahme dargestellt. Im Jahr 2010 betrug der Anschaffungspreis des Häckslers mit einer Kapazität von $31,6 \text{ t h}^{-1}$ inklusive Ersatzteilen und Transport US\$ 639.000 (Kumar, et al., 2011). Die Zielkapazität des zu untersuchenden Produktionssystems beträgt $58,1 \text{ t h}^{-1}$ und entspricht damit dem 1,84 fachen der Basiskapazität. Der Degressionsexponent für einen Häckslers der angegebenen Kapazität kann mit 0,6 angegeben werden (Kazi, et al., 2010). Nach Gleichung 5.4 betragen die Anschaffungskosten das 1,44 fache des Preises der Ausgangskapazität und in der Zielkapazität damit US\$ 921.280.

Die Berücksichtigung der Marktentwicklung wird ebenfalls anhand des Häckslers gezeigt. Im Basisjahr 2010 betrug der Wert des CEPCI 550,8 Punkte, im August des Zieljahres 2012 576,6 Punkte. Nach Gleichung 5.3 werden die Anschaffungskosten daher um den Faktor 1,05 korrigiert und betragen damit im Jahr 2012 US\$ 964.433. Die Ergebnisse werden anhand des durchschnittlichen Wechselkurses von €-US\$ von 1,3059 (EZB, 2012a) in Euro überführt. Eine ausführliche Aufstellung aller Apparate und Maschinen befindet sich in Anhang B in Tabelle 9-1. Die Summe aller Positionen beträgt € 64.858.000.

Ausgehend davon lässt sich die Methode differenzierter Zuschlagssätze nach Peters et al. (2004) anwenden. Der Ansatz differenzierter Zuschlagssätze bietet im Gegensatz zu globalen Zuschlagssätzen die Möglichkeit, über die Wahl der Zuschlagssätze den Entwicklungsstand der eingesetzten Technologie zu berücksichtigen. Peters et al. geben dabei die Durchschnittszuschlagssätze für die Verarbeitung von festen Rohstoffen zu flüssigen Endprodukten an (siehe Kapitel 5.1.1.2.2). Abweichend davon erfolgen Anpassungen im Hinblick auf die Eigenschaften der Modellanlage.

Die Kosten für ein Grundstück variieren stark mit dem Standort. Da dessen Lokalisierung nicht Teil der vorliegenden Arbeit ist, wird der Erwerb beziehungsweise die Pacht eines Grundstückes nicht berücksichtigt. Tabelle 5-4 zeigt die Einzelpositionen und identifizierten Zuschlagssätze in der Übersicht. Alle von Peters et al. (2004) abweichenden Positionen werden nachfolgend erläutert.

Tabelle 5-4: Differenzierte Zuschlagssätze der Modellanlage

Direct Cost	Anteil (% I_{AM})
Apparate und Maschinen inkl. Ersatzteilen, Transport etc.	100 ^{a)}
Montage	39 ^{a)}
Mess-, Steuer- und Regelungstechnik	26 ^{a)}
Rohrleitungen	31 ^{a)}
Elektrische Ausrüstung	10 ^{a)}
Gebäude und Stahlbau	29 ^{a)}
Grundstückerschließung und Infrastruktur	5 ^{b)}
Nebenanlagen und –Einrichtungen	15 ^{b)}
Summe Direct Cost	255
Indirect Cost	
Ingenieurleistungen und Überwachung	35 ^{b)}
Kosten für Baustelleneinrichtung und –betrieb	30 ^{a)}
Genehmigung und Rechtskosten	5 ^{b)}
Unternehmergewinn	19 ^{a)}
Unvorhergesehenes	45 ^{b)}
Summe Indirect Cost	134
Summe Fixed Capital Investment	389
Working Capital (10% des Total Capital Investment)	43 ^{b)}
Total Capital Investment	437
a) in Anlehnung an Peters et al. (2004)	
b) eigene Abschätzung	

In den Zuschlägen der Direct Cost werden zwei Korrekturen zu den von Peters et al. (2004) vorgeschlagenen Sätzen angewendet. Zum einen wird der Zuschlag Grundstückerschließung und Infrastruktur von 12 auf 5 % gesenkt. Hintergrund der Korrektur ist die Grundannahme, dass es sich beim Standort um einen Industriestandort handelt, der bereits teilweise erschlossen ist.

Zum anderen findet eine Korrektur durch die Verringerung des Zuschlages für Nebenanlagen und –Einrichtungen statt. Darunter verstehen Peters et al. (2004) neben Betriebsmitteln, allgemeiner Infrastruktur und weiteren Bestandteilen auch die Dampferzeugung und die Abwasseraufbereitung. Beide Positionen sind jedoch bereits explizit in der Aufstellung der Apparate und Maschinen enthalten. Der Verzicht auf eine Korrektur würde zu einer mehrfachen Berechnung dieser Nebenanlagen führen. Darüber hinaus würde sie zu einem erhöhten Zuschlag auf Nebenanlagen- und Einrichtungen führen (siehe Tabelle 5-4). Diese sind im Vorgehen von Peters et al. bereits als Teil der Nebenanlagen und -Einrichtungen berücksichtigt. Die Korrektur des Zuschlages für Nebenanlagen und -Einrichtungen von 50 auf 15 % gleicht diesen Umstand aus.

Auch innerhalb der Indirect Cost sind Korrekturen notwendig, die auf die Neuheit der Technologie zurückzuführen sind. Durch den Umstand, dass keine Erfahrungen in der Planung einer derartigen n-Butanolanlage im industriellen Maßstab vorliegen, besteht ein erhöhter Bedarf an Ingenieurleistungen. Der Zuschlag für Ingenieurleistung und Überwachung wird daher von 32 auf 35 % erhöht.

Darüber hinaus wird der Zuschlag für Genehmigungen und Rechtskosten von 4 auf 5 % angehoben. Die höchste Korrektur weist die Position für Unvorhergesehenes mit einer Steigerung von 37 auf 45 % auf. Da das Working Capital nach Peters et al. (2004) ebenfalls als Zuschlag auf das Fixed Capital Investment verstanden wird, ist auch hier eine Überprüfung notwendig. Als Näherung reichen 10 % des Fixed Capital Investments aus, um das Working Capital für 60 Betriebstage vorzuhalten. Der Zuschlag wird daher von 15 auf 10 % gesenkt.

5.1.3 Ergebnisse der Investitionskostenabschätzung

Unter Berücksichtigung der identifizierten Zuschlagssätze beträgt die Höhe des Fixed Capital Investments 252.298.000 €, die des Working Capitals 28.003.000 €. Das Total Capital Investment ergibt sich als deren Summe zu 280.331.000 €. Abbildung 5-5 zeigt die Kostenpositionen im Überblick. Die Genauigkeit der Abschätzung kann mit -15 bis +30 % angegeben werden (siehe Kapitel 5.1.1.2.5). Es wird deutlich, dass Apparate und Maschinen zwar absolut einen hohen Beitrag (65 Mio. €) zur Gesamtinvestition liefern, jedoch nur etwa 23 % des Total Capital Investments betragen.

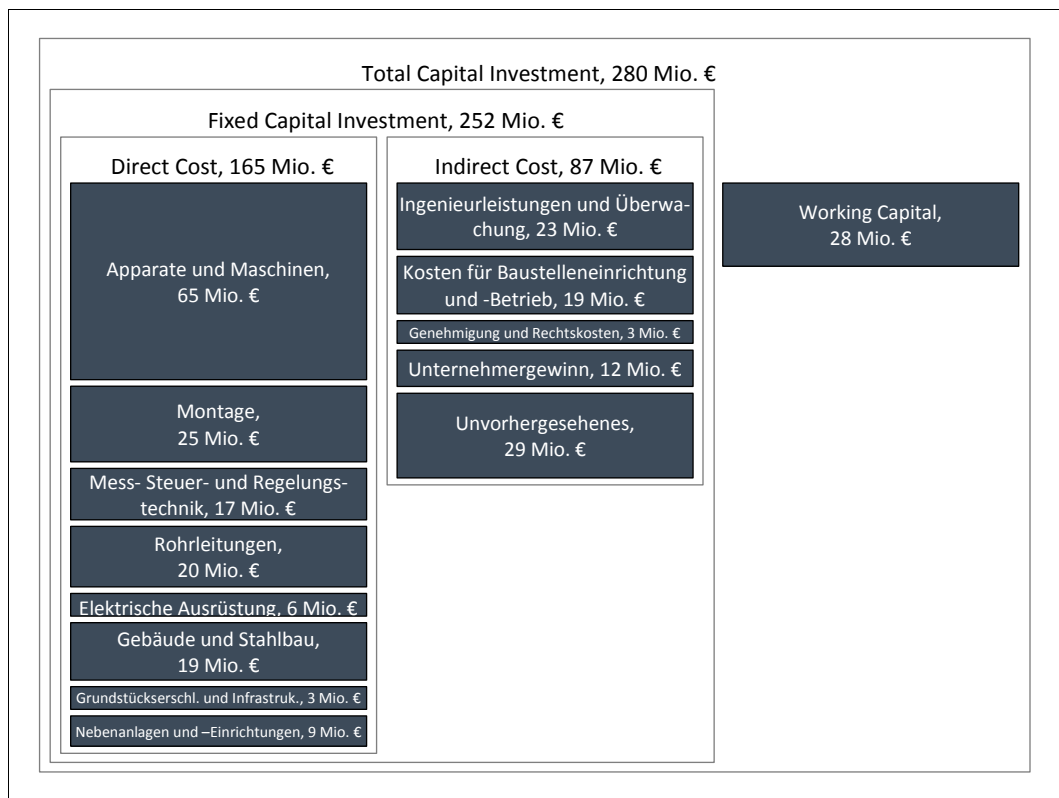


Abbildung 5-5: Bestandteile der Total Investment Cost (Angaben gerundet)

Bislang sind keine Investitionskosten einer großtechnischen Anlage zur Produktion von n-Butanol aus lignocellulosebasierten Rohstoffen verfügbar. Daher kann kein unmittelbarer Vergleich der Investitionskosten der Modellanlagen zu bereits bestehenden Anlagen dieser Art gezogen werden. Es bietet sich jedoch eine Gegenüberstellung zu Anlagen vergleichbarer Technologie an. Wie bereits in Kapitel 5.1.1.3 erläutert, eignen sich dafür insbesondere Anlagen zur fermentativen Herstellung von Ethanol aus lignocellulosebasierten Rohstoffen. Zwar existieren bislang ausschließlich Pilotanlagen in geringer Kapazität. Diese lassen jedoch Rückschlüsse auf die Investitionskosten höherer Kapazitäten zu, die in der Literatur beschrieben werden.

Klein-Marcuschamer et al. (2010) legen eine Investitionskostenabschätzung einer Anlage zur Produktion von Ethanol aus Maisstroh³⁸ vor. Das Fixed Capital Investment der Anlage beträgt 340 Mio. US\$. Die Autoren weisen ausdrücklich darauf hin, dass die vorgelegte Investitionskostenabschätzung hinsichtlich einer Verringerung der Kosten nicht optimiert worden ist. Mit Hilfe des in Kapitel 5.1.1.2 diskutierten Größendegressionsansatzes lassen sich die Investitionskosten dieser Ethanolanlage auch für andere Kapazitäten abschätzen. Für die in der n-Butanol-Modellanlage angenommenen Rohstoffverarbeitungskapazität betrüge das Fixed Capital Investment der Ethanolanlage etwa 231.000.000 €³⁹. Wie zu erwarten weist die Mo-

³⁸ Englisch: Corn stover; Rückstände der Maisspflanze nach der Ernte, besteht maßgeblich aus Blättern und Stängeln

³⁹ Fixed Capital Investment 340 Mio. US\$ im Jahr 2009 (Klein-Marcuschamer, et al., 2010); Abschätzung des Fixed Capital Investments über Zeitindex (CEPCI (2009) 521,9), Größendegressionsansatz (Exponent 0,6) (siehe Kapitel 5.1.1.2) sowie dem Wechselkurs EUR-USD von 1,31

dellanlage mit einer Differenz von etwa 21 Mio. € höhere Investitionskosten auf. Ein solcher Vergleich kann zwar nur ein Anhaltspunkt sein. Er zeigt jedoch, dass die Investitionskosten der Modellanlage in dieser Größenordnung anzusiedeln sind.

Aktuell wird eine Vielzahl technologischer Alternativen zu der in der Stoff- und Energiestrommodellierung eingesetzten Technologie untersucht. Neben prozesstechnischen Vorteilen können diese großen Einfluss auf die Investitions- und Betriebskosten haben (siehe Kapitel 2.4). Darüber hinaus kann davon ausgegangen werden, dass Lerneffekte die Kosten einer neuartigen Technologie mit der Steigerung der installierten Kapazität deutlich verringern. Dabei gibt der Fortschrittsfaktor an, welche Preisänderung bei einer Verdopplung der insgesamt installierten Kapazität zu erwarten ist.

Für die Produktion von Ethanol aus Zuckerrohr in Brasilien lag der Fortschrittsfaktor in den Jahren von 1980 bis 1985 bei 0,91, von 1985 bis 2002 bei 0,71 (Goldemberg, et al., 2004). Diese Ergebnisse lassen sich nicht unmittelbar auf die Entwicklung der Investitionskosten von n-Butanol übertragen. Jedoch zeigen sie, dass auch in der Herstellung von n-Butanol aus Lignocellulose in Zukunft tendenziell sinkende Investitionskosten erwartet werden können (vgl. hierzu: Goldemberg et al. (2004), Lange (2007)). Die ersten Erfahrungen in der Herstellung von n-Butanol auf der Basis von Maisstärke werden zurzeit mit der Umrüstung bestehender Ethanolanlagen gemacht (vgl. hierzu: Butamax (2012)). Informationen über die Investitionskosten derartiger Anlagen beziehungsweise Umbauten liegen nicht vor.

5.2 Zahlungsströme der Modellanlage

Ziel dieses Kapitels ist die Abschätzung der Kosten zur Produktion von n-Butanol. Dazu erfolgt eine Periodisierung aller Kosten auf einen Betrachtungszeitraum von einem Jahr. Es ist hervorzuheben, dass damit die resultierenden Kosten den gemittelten Verlauf abbilden, nicht die tatsächlich anfallenden Zahlungen. Dazu wird zunächst ein geeigneter Modellierungsansatz identifiziert und auf die Modellanlage angepasst. Aufbauend darauf erfolgt die Umsetzung der Zahlungsströme des Basisszenarios. Alle Kosten beziehen sich auf das Jahr 2012. Die Auswirkung alternativer Marktentwicklungen beziehungsweise Szenarien ist Gegenstand von Kapitel 7.

5.2.1 Methodisches Vorgehen der Modellierung von Zahlungsströmen einer Modellanlage zur Herstellung von n-Butanol

5.2.1.1 Ansätze zur Modellierung von Zahlungsströmen

Im Gegensatz zu den vorgestellten Ansätzen in Kapitel 5.1.1.2 zielt die Modellierung der Ansätze im vorliegenden Kapitel nicht auf die Abschätzung von Kosten anhand von Methoden. Vielmehr gilt sie der systematischen Erfassung und Darstellung von Kosten. Dazu werden verschiedene dynamische Darstellungsansätze vorgestellt.

Den höchsten Detaillierungsgrad weisen die in der Praxis des Anlagenbaus und der Projektentwicklung genutzten Finanzierungsmodelle (*Financial Models*) auf. Sie werden sowohl zur unternehmensinternen Entscheidungsfindung eingesetzt als auch zur Projektpräsentation bei potentiellen Investoren. Financial Models berücksichtigen die zugrunde liegenden Einflussfaktoren sehr detailliert. Insbesondere können verschiedene Darlehen, Tilgungszeitpunkte und -modalitäten flexibel dargestellt werden. Eine Periodisierung der Zahlungsströme kann beispielsweise mit Hilfe der Annuitätenmethode vorgenommen werden. Durch die hohe Detailtiefe weist dieser Ansatz eine hohe Genauigkeit auf, verlangt jedoch einen fortgeschrittenen Planungsstand des Projektes.

Weitere Ansätze zur Modellierung von Zahlungsströmen erlauben durch eine weniger differenzierte Darstellungsweise eine Kostenerfassung auch bei weniger fortgeschrittenen Projektplanungsständen. Hier sei exemplarisch die VDI-Richtlinie 6025 (1996) erwähnt. Sie sieht eine Unterteilung in kapitalgebundene, verbrauchsgebundene, betriebsgebundene und sonstige Kosten sowie Umsatzerlöse vor. Dabei werden alle Zahlungs- und Umsatzströme periodisch dargestellt. Die Anwendung der Richtlinie zielt ebenso wie ein Financial Model auf die vollständige Erfassung aller Zahlungsströme, erlaubt jedoch gezielte Vereinfachungen.

5.2.1.2 Entwicklung eines angepassten Ansatzes zur Modellierung von Zahlungsströmen einer Modellanlage zur Herstellung von n-Butanol

Die Erfassung der Zahlungsströme der Modellanlagen umfasst zwei Funktionen. Zum einen werden die kontinuierlichen Umsätze und Kosten auf Basis der in Kapitel 4 ermittelten Stoff- und Energieströme periodisch erfasst. Zum anderen werden einmalige Zahlungen wie die im vorherigen Kapitel 5.1 ermittelten Investitionskosten in Annuitäten überführt. Für beide Bereiche wird im Folgenden ein an die VDI-Richtlinie 6025 (1996) und Peters et al. (2004) angelehnter Ansatz entwickelt. Der Bilanzraum entspricht dabei der Prozesskette von der Bereitstellung der Biomasse über deren Transport bis zum Absatz der Produkte (Abbildung 5-6).

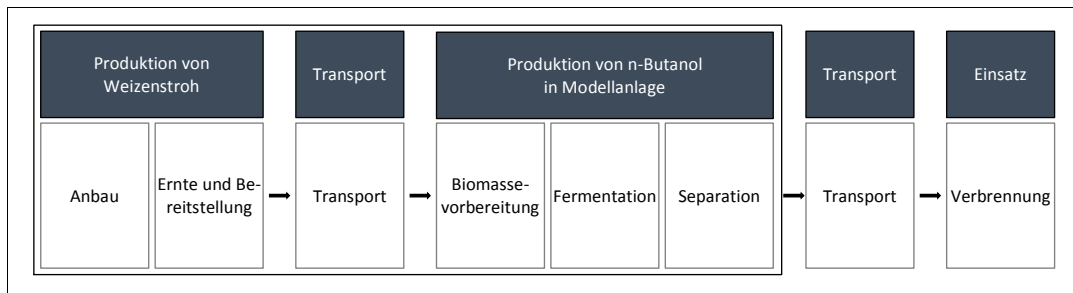


Abbildung 5-6: Prozessstufen in der Produktion von n-Butanol aus Weizenstroh

Berücksichtigt werden Umsatzerlöse (U), kapitalgebundene Kosten (K^{KAP}), verbrauchsgebundene Kosten (K^{VRB}), betriebsgebundene Kosten (K^{BTR}) und sonstige Kosten (K^{STG}). Das Ziel des Kapitels liegt in der Identifikation der durchschnittlichen Kosten zur Produktion von n-Butanol unter aktuellen Marktbedingungen. Die Berücksichtigung von Preissteigerungen über die gesamte Lebensdauer bietet daher keinen signifikanten Vorteil. Der Einfluss von Preis- oder Kostensteigerungen wird daher weder in den Umsatzerlösen noch in den Kosten berücksichtigt.

Eine besondere Rolle kommt den Transportkosten des Reststrohs zu, die einen Teil der verbrauchsgebundenen Kosten bilden. Der Anteil der Transportkosten bei den meisten Roh-, Hilfs- und Betriebsstoffen ist eher gering. Hingegen können die Transportkosten biogener Rohstoffe in Abhängigkeit der Transportdistanz erheblichen Einfluss haben. Hauptgrund dafür ist die im Vergleich zu fossilen Energieträgern geringe Energiedichte. So beträgt die Energiedichte von bereits zu Quaderballen verdichtetem Weizenstroh etwa 2 MJ L^{-1} (DBFZ, 2012), die von Heizöl dagegen ca. 36 MJ L^{-1} .

Zur Abschätzung der Produktionskosten von n-Butanol wird ein Vollkostenansatz gewählt, in dem die Umsatzerlöse aller nicht intendierten Produkte zur Senkung der Kosten für n-Butanol beitragen. Nicht intendierte Produkte sind Aceton, Ethanol und Elektrizität. Es wird angenommen, dass die gesamte Produktion vollständig abgesetzt werden kann. Die Produktionskosten von n-Butanol (K_{NBTL}) ergeben sich daraus wie folgt:

Gleichung 5.8

$$K_{NBTL} = \frac{K^{KAP} + K^{VRB} + K^{BTR} + K^{STG} - U_{ACTN} - U_{ETHN} - U_{ELKT}}{x_{y1}^{uw*}}$$

mit:

K_{NBTL}	Kosten n-Butanol	€ t ⁻¹	K^{KAP}	Kapitalgebundene Kosten	€ a ⁻¹
K^{VRB}	Verbrauchsgebundene Kosten	€ a ⁻¹	K^{BTR}	Betriebsgebundene Kosten	€ a ⁻¹
K^{STG}	Sonstige Kosten	€ a ⁻¹	U_{ACTN}	Betriebsgebundene Kosten	€ a ⁻¹
x_{y1}^{uw*}	Umweltvektor n-Butanol	t a ⁻¹			

5.2.1.2.1 Umsatzerlöse

Die Umsatzerlöse ergeben sich aus dem in Kapitel 4 ermittelten Umweltvektor (x^{uw*}) in Form von bewerteten Stoffflüssen. Für die Darstellung der ökonomischen Bewertung wird der Preisvektor (p) eingeführt. Dabei ist der Vektor (p^{*+}) als Produktpreisvektor der Modellanlage definiert. Er bildet ausschließlich die Preise der Produkte ($y_1, \dots, y_l$) ab und nimmt für alle anderen den Wert null an. Der Vektor (p^{*+}) lässt sich wie folgt darstellen:

$$p^{*+} = \begin{bmatrix} 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \\ p_{y1} \\ \cdot \\ \cdot \\ p_{yl} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \end{bmatrix}$$

Die Umsatzerlöse ergeben sich damit als Skalarprodukt aus (x^{uw*}) und (p^{*+}) in folgender Form:

Gleichung 5.9

$$U = x^{uw*} \cdot p^{*+}$$

mit:

U	Umsatzerlöse	€ a ⁻¹	x^{uw*}	Umweltvektor der Modellanlage	t a ⁻¹
p^{*+}	Produktpreisvektor	€ t ⁻¹			

5.2.1.2.2 Kapitalgebundene Kosten

Unter dem Begriff kapitalgebundene Kosten werden alle Kosten für die Investition und Instandhaltung des Produktionsfaktors Anlage zusammengefasst. Die kapitalgebundenen Kosten zählen damit zu den Fixkosten. Dazu gehören die einmalig auftretenden Investitionskosten, die mit Hilfe der Annuitätsmethode als periodische Belastung dargestellt werden. Als Funktion der Abschreibungen und Zinsen werden diese durch den Annuitätenfaktor (f_{ANN}^{KAP}) abgebildet, der mit dem Wiederbeschaffungswert abzüglich des Restwertes (R) der Anlage multipliziert wird. Die periodischen Instandhaltungskosten werden durch den Instandhaltungsfaktor (f_{INS}^{KAP}) dargestellt. Er wird mit dem Fixed Capital Investment multipliziert. Die kapitalgebunden Kosten ergeben sich damit wie folgt:

Gleichung 5.10

$$K^{KAP} = f_{ANN}^{KAP} \cdot (TCI - R) + f_{INS}^{KAP} \cdot FCI$$

mit:

K^{KAP}	Kapitalgebundene Kosten	€ a ⁻¹	f_{ANN}^{KAP}	Annuitätenfaktor	%
TCI	Total Capital Investment	€	R	Restwert der Anlage	€
f_{INS}^{KAP}	Instandhaltungsfaktor	%	FCI	Fixed Capital Investment	€

Bestimmung des Annuitätenfaktors

Der Annuitätenfaktor bildet zum einen die Abnutzung von Vermögensgegenständen in Form von Abschreibung ab, zum anderen die Kapitalkosten in Form von Zinsen und Gebühren. Abschreibungen bezeichnen die Wertminderung von abnutzbaren Vermögensgegenständen, die als Aufwand durch die Nutzung von Anlagevermögen entsteht (Gabler, 2012a). Abhängig vom Abschreibungsgegenstand und dessen Wert existieren verschiedene Abschreibungsmethoden. Industrieanlagen werden üblicherweise über ihren Nutzungszeitraum linear abgeschrieben. Abgeschrieben werden kann nur der Wiederbeschaffungswert der Anlagegüter

inklusive Transport, Montage und Ingenieurleistung. Nicht abgeschrieben werden können Grundstücke, das Umlaufvermögen und die Erstinbetriebnahme.

Für die Ermittlung der Kapitalkosten wird zunächst deren Zusammensetzung erläutert und für den häufigsten Fall einer Fremdfinanzierung durch eine Bank dargestellt. Im Regelfall finanziert eine Bank ein Projekt erst in einem fortgeschrittenen Projektstadium. Voraussetzung einer Kreditvergabe sind daher meist abgeschlossene Machbarkeitsstudien und der Nachweis über das Vorliegen der wichtigsten Genehmigungen. Das Darlehen kann daher üblicherweise nur den Fremdkapitalanteil der Investitionskosten abdecken, während alle anderen Positionen durch Eigenkapital finanziert werden müssen. Dazu zählen unter anderem die Kosten für das Basic Engineering, Bauzinsen und das Umlaufkapital. Diese Kosten werden auch als Owner's Cost (OC) bezeichnet. In der Regel können diese nicht fremdfinanziert werden, was auch für die Modellanlage angenommen wird. Das Fremdkapital deckt daher ausschließlich den mit der Bank vereinbarten Finanzierungsgrad (G_{DRL}^{KAP}) des Total Capital Investments abzüglich der Owner's Cost ab. Der Fremdkapitalanteil (FKA) des gesamten Anlagenbauprojektes lässt sich wie folgt ableiten:

Gleichung 5.11

$$FKA = \left(1 - \frac{OC}{TCI}\right) \cdot G_{DRL}^{KAP}$$

mit:

FKA	Fremdkapitalanteil	%	OC	Owner's Cost	€
TCI	Total Capital Investment	€	G_{DRL}^{KAP}	Fremdfinanzierungsgrad	%

Der Eigenkapitalanteil (EKA) des Gesamtprojektes lässt sich analog zum Fremdkapitalanteil darstellen und entspricht:

Gleichung 5.12

$$EKA = 1 - FKA$$

mit:

EKA	Eigenkapitalanteil	%	FKA	Fremdkapitalanteil	%
-------	--------------------	---	-------	--------------------	---

Für das Fremdkapital werden Fremdkapitalkosten fällig, im üblichen Fall eines Darlehens sind dies Zinsen (i_{DRL}^{KAP}). Die Höhe der Fremdkapitalkosten setzt sich aus dem Kapitalmarktzins und einem Risikoaufschlag zusammen, der mit dem Kapitalgeber verhandelt wird. Für das Eigenkapital fallen ebenfalls Kapitalkosten, die Eigenkapitalkosten, an. Diese spiegeln die Erwartung der Eigenkapitalgeber an das Projekt wieder und können in Form eines kalkulatorischen Zinssatzes (i_{KLK}^{KAP}) abgeschätzt werden. Im Gegensatz zu Fremdkapitalkosten können Eigenkapitalkosten in der Regel nicht steuermindernd geltend gemacht werden

(*Tax shield*). Die gewichteten Durchschnittskapitalkosten (*Weighted Average Cost of Capital, WACC*) berücksichtigen diesen Umstand⁴⁰. Basierend darauf ergeben sich die durchschnittlichen Kapitalkosten aus den anteiligen Fremd- und Eigenkapitalkosten wie folgt:

Gleichung 5.13

$$WACC = EKA \cdot i_{KLK}^{KAP} + FKA \cdot i_{DRL}^{KAP} \cdot \left(1 - s_{KRP}^{STR} - \left(s_{GWR,MSZ}^{STR} \cdot s_{GWR,HBS}^{STR} \cdot \frac{3}{4} \right) \right)$$

mit:

$WACC$	Weighted Average Cost of Capital	%	EKA	Eigenkapitalanteil	%
i_{KLK}^{KAP}	Eigenkapitalzins	%	FKA	Fremdkapitalanteil	%
i_{DRL}^{KAP}	Fremdkapitalzins	%	s_{KRP}^{STR}	Körperschaftsteuersatz	%
$s_{GWR,MSZ}^{STR}$	Gewerbsteuerermesszahl	%	$s_{GWR,HBS}^{STR}$	Gewerbsteuerhebesatz	%

Anhand des WACC und der geplanten Laufzeit lässt sich der Annuitätenfaktor für die Modellanlage bestimmen:

Gleichung 5.14

$$f_{ANN}^{KAP} = \frac{(1 + WACC)^a \cdot WACC}{(1 + WACC)^a - 1}$$

mit:

f_{ANN}^{KAP}	Annuitätenfaktor	%	$WACC$	Weighted Average Cost of Capital	%
a	Laufzeit der Anlage	A			

Bestimmung des Restwertes

Der Restwert der Modellanlage hängt von ihrer zukünftigen Wettbewerbsfähigkeit ab, die durch den technologischen Fortschritt und die Marktentwicklung beeinflusst wird. Eine zuverlässige Abschätzung beider Faktoren über den gesamten Zeitraum der Anlagennutzung ist im Rahmen dieser Arbeit nicht möglich. Im Folgenden wird daher angenommen, dass der Restwert (R) 20 % des diskontierten TCI entspricht (siehe Gleichung 5.15).

⁴⁰ Alle Steuerarten werden im Kapitel 5.2.1.2.5 behandelt. Bei der Ermittlung der Gewerbesteuer sind nur etwa 75 % der Fremdkapitalkosten abzugsfähig.

Gleichung 5.15

$$R = \frac{TCI \cdot 0,2}{(1 + WACC)^a}$$

mit:

R	Restwert der Modellanlage	€	TCI	Total Capital Investment	€
$WACC$	Weighted Average Cost of Capital	%	a	Laufzeit der Anlage	A

Bestimmung des Instandhaltungsfaktors

Kosten für die Instandhaltung der Anlage werden in Form des periodischen Instandhaltungsfaktors (f_{INS}^{KAP}) zusammengefasst. Der Oberbegriff Instandhaltung umfasst Wartung, Inspektion, Instandsetzung und Verbesserung (DIN, 2003). Unter Wartung werden alle Maßnahmen zur Verringerung beziehungsweise Verzögerung von Abnutzung zusammengefasst. Die Inspektion umfasst alle Maßnahmen zur Feststellung und Beurteilung des Ist-Zustandes. Unter Instandsetzung fallen alle Maßnahmen zur Wiederherstellung des funktionsfähigen Zustandes, sofern es sich nicht um Verbesserungsmaßnahmen handelt. Im Gegensatz zum Vorgehen der VDI 6025 werden im Folgenden nicht nur die Instandsetzungskosten, sondern alle Instandhaltungskosten den kapitalgebundenen Kosten zugeordnet. Die Höhe des Instandhaltungsfaktors (f_{INS}^{KAP}) kann aufgrund von Literaturangaben oder Erfahrungswerten für die eingesetzte Technologie abgeschätzt werden (vgl. hierzu: Peters et al. (2004)).

5.2.1.2.3 Verbrauchsgebundene Kosten

Die verbrauchsgebundenen Kosten (K^{VRB}) enthalten alle Kosten des Energieverbrauchs und des Bedarfs an Roh- und Hilfsstoffen inklusive deren Transport zur Modellanlage. Sie umfassen ausschließlich Kostenarten, die variabel anfallen. Für die Modellanlage sind das insbesondere Rohstoffe, Hilfs- und Betriebsstoffe wie Gas, Wasser, Strom, Enzyme und weitere Chemikalien. Bedarfsgebundene Kosten fallen proportional zur Produktionsmenge an. Eine klare Abgrenzung zu den betriebsgebundenen Kosten ist jedoch nicht immer möglich. Grundsätzlich lassen sich die Kosten als Produkt aus einer benötigten Stoffmenge und dem entsprechenden Preis darstellen.

Eine Übersicht über die zum Betrieb der Modellanlage benötigten Stoff- und Energieströme kann dem in Kapitel 4 ermittelten Umweltvektor (x^{uw*}) entnommen werden. Analog zum Modellierungsansatz der Umsatzerlöse wird der Vektor (p^{*-}) als Faktorpreisvektor der Modellanlage definiert. Er nimmt für alle Produkte ($y_1, \dots, y_l$) den Wert null an. Preise werden mit positiven, Entsorgungsgebühren mit negativen Vorzeichen versehen. Der Faktorpreisvektor ist wie folgt definiert:

$$p^{*-} = \begin{bmatrix} p_{r1} \\ \cdot \\ \cdot \\ p_{rk} \\ p_{s1} \\ \cdot \\ \cdot \\ p_{sn} \\ p_{q1} \\ \cdot \\ \cdot \\ p_{qh} \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \\ p_{z1} \\ \cdot \\ \cdot \\ p_{zp} \\ -p_{w1} \\ \cdot \\ \cdot \\ -p_{wo} \end{bmatrix}$$

Die verbrauchsgebundenen Kosten ergeben sich damit als Skalarprodukt aus (x^{uw*}) und (p^{*-}) in folgender Form:

Gleichung 5.16

$$K^{VRB} = x^{uw*} \cdot p^{*-}$$

mit:

K^{VRB}	Verbrauchsgebundene Kosten	€ a ⁻¹	x^{uw*}	Umweltvektor der Modellanlage	t a ⁻¹
p^{*-}	Faktorpreisvektor	€ t ⁻¹			

Transportkosten in Abhängigkeit des Einzugsgebietes

Die Modellierung der Transportkosten lässt sich in drei Schritte unterteilen. Im ersten Schritt wird in Abhängigkeit der Anlagenkapazität beziehungsweise des Reststrohbedarfes der Modellanlage die für die Bereitstellung notwendige Anbaufläche beziehungsweise das Einzugsgebiet ermittelt. Der zweite Schritt bestimmt die für die Bereitstellung zurückzulegende mittlere Transportstrecke in Abhängigkeit der Modellierung des Einzugsgebietes. Abschließend werden die durchschnittlichen Transportkosten für Reststroh dargestellt.

- Einzugsgebiet

Das Reststrohaufkommen in Deutschland divergiert sowohl mit als auch innerhalb der Bundesländer (siehe Tabelle 2-4). Für die Modellanlage wird angenommen, dass sich der Standort in Brandenburg beziehungsweise in der Nähe von Berlin befindet. Das Einzugsgebiet

kann sich damit auch über die Grenzen nach Mecklenburg-Vorpommern, Sachsen oder Sachsen-Anhalt erstrecken. Aufbauend auf den Grundlagen aus Kapitel 2.5.2 beträgt das nachhaltige Strohpotential für diese Region zwischen 1,3 und 4,4 Mio. t a⁻¹ (FM). Ein Drittel der in Deutschland verfügbaren Menge. Bezogen auf die Grundfläche der Region ergibt sich daraus ein nachhaltiges Potential zwischen 14,1 und 30,8 t km⁻² a⁻¹ Reststroh (FM). Geht man davon aus, dass der Standort der Modellanlage so gewählt wird, dass das Einzugsgebiet ein überdurchschnittlich hohes Strohaufkommen aufweist, ist der gewichtete Mittelwert von 22,5 t km⁻² a⁻¹ Reststroh (FM) realistisch.

Die Modellanlage und insbesondere deren Fermentation sind auf die Nutzung von Weizenstroh ausgelegt. Im oben abgeschätzten Strohvorkommen sind darüber hinaus Roggen-, Gersten-, Triticale-, Mais- und Haferstroh enthalten. Der gewichtete Anteil von Weizenstroh beträgt 51,5 % (DBFZ, 2012). Unter der Annahme, dass der bundesweite Durchschnitt auf die oben genannte Region übertragen werden kann, beträgt das nachhaltige Strohaufkommen (f_{STR}^{TRNS}) im Einzugsgebiet der Modellanlage 11,5 t km⁻² a⁻¹ Weizenstroh (FM). Die Größe des Einzugsgebietes (A_{STR}^{TRNS}) ist abhängig von der Kapazität der Anlage beziehungsweise deren Reststrohbedarf. Sie lässt sich wie folgt ermitteln.

Gleichung 5.17

$$A_{STR}^{TRNS} = (x_{r1}^{uw*} + x_{r2}^{uw*}) \cdot \frac{1}{f_{STR}^{TRNS}}$$

mit:

A_{STR}^{TRNS}	Größe des Einzugsgebietes	km ²	x_{r1}^{uw*}	Umweltvektor Weizenstroh	t a ⁻¹
x_{r2}^{uw*}	Umweltvektor Wasser aus Weizenstroh	t a ⁻¹	f_{STR}^{TRNS}	Faktor nachhaltiges Strohaufkommen	t km ⁻² a ⁻¹

- Mittlere Transportdistanz

Das Reststroh wird nach der Ernte des Korns mittels einer Ballenpresse aufgenommen und anschließend in mehreren Arbeitsschritten am Feldrand oder in einem Zwischenlager abgelegt. Von dort gelangt es über landgebundenen Transport in mehreren Arbeitsschritten zur Modellanlage. Für die folgende Betrachtung werden ausschließlich die Schritte Umschlag am Feldrand oder Zwischenlager, der Transport zur Modellanlage und der dortige Umschlag betrachtet. Alle vorgelagerten Prozessschritte fallen in den Bilanzraum der Ernte. Die Aufgabe der Lagerung verbleibt damit beim Erzeuger, was die aktuelle reale Situation abbildet.

Neben der Größe des Einzugsgebietes beeinflusst auch dessen Form die Transportdistanz. In der Literatur werden Modelle sowohl zu rechteckigen als auch zu kreisförmigen Geometrien vorgestellt (vgl. hierzu: Seiffert (2010), Kappler (2008)). Für das Einzugsgebiet der Modellanlage wird eine kreisförmige Geometrie unterstellt, in der die Anlage den Kreismittelpunkt bildet. Die Modellierung der mittleren Transportdistanz (d_m^{TRNS}) erfolgt in Anlehnung an

Kappler (2008). Kappler stellt auf Basis empirischer Erkenntnisse für eine typische Modellregion mit hohem Ackeranteil ein Transportmodell für den Transport von Reststroh auf. Für ein Einzugsgebiet mit dem Radius (r^{TRNS}) kann die mittlere Transportdistanz (d_m^{TRNS}) aus dem mittleren Abstand aller Punkte vom Mittelpunkt und einem Zuschlagsfaktor ermittelt werden. Abbildung 5-7 zeigt eine schematische Darstellung des Einzugsgebietes und der mittleren Transportdistanz.

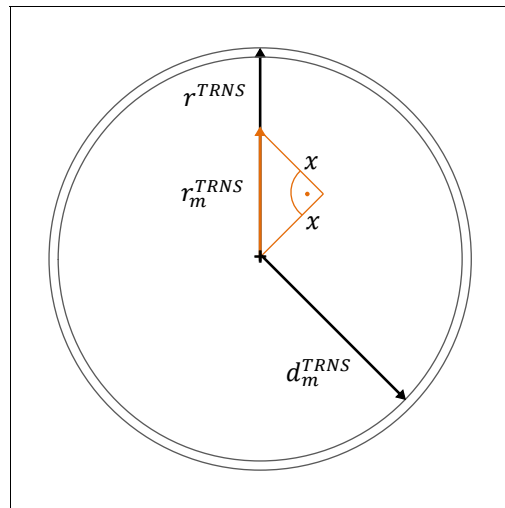


Abbildung 5-7: Schematische Darstellung der mittleren Transportstrecke (in Anlehnung an Kappler (2008))

Der mittlere Abstand (r_m^{TRNS}) aller Punkte vom Mittelpunkt eines Kreises beträgt ($2/3 \cdot r^{TRNS}$). Durch den Zuschlagsfaktor repräsentiert Kappler den Umweg, der durch die Straßenführung entsteht. Diese entspricht meist nicht der Luftlinie zum Mittelpunkt sondern vereinfacht einer Zick-Zack-Linie mit rechten Winkeln ($x + x$). Der Zuschlagsfaktor ergibt sich demnach zu ($\sqrt{2} \cdot r^{TRNS}$). Daraus lässt sich die mittlere Transportdistanz (d_m^{TRNS}) wie folgt herleiten:

Gleichung 5.18

$$d_m^{TRNS} = \frac{2}{3} \cdot \sqrt{2} \cdot r^{TRNS} \quad \text{bzw.} \quad d_m^{TRNS} = \frac{2}{3} \cdot \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot A_{STR}^{TRNS}$$

mit:

d_m^{TRNS}	Mittlere Transportdistanz	km	r^{TRNS}	Radius des Einzugsgebietes	km
A_{STR}^{TRNS}	Größe des Einzugsgebietes	km ²			

- Resultierende Transportkosten

Die Transportkosten hängen neben der Transportdistanz maßgeblich von der Art des Transportes beziehungsweise Umschlags ab. Mit zunehmender Kapazität der Konversionsanlage verschiebt sich die optimale Kostenstruktur vom reinen Einsatz konventioneller Traktoren, über Teleskoplader und LKW-Gliederzügen bis hin zur Entladung über festinstallierte Portalkräne. Die im Folgenden vorgestellte Herangehensweise basiert auf der in DBFZ (2012) entwickelten Methodik. Das DBFZ stellt einen bereits optimierten Transportweg für den Strohtransport über ein Einzugsgebiet von 10.737 km² zu einer Konversionsanlage mit einem Bedarf von 349.000 t a⁻¹ Reststroh (FM) vor. Dabei wird das Stroh vom Zwischenlager mittels eines Teleskopladers auf einen LKW im Plattformgliederzug verladen und in der Konversionsanlage über einen Portalkran entladen. Für die Modellanlage wird der gleiche Transportpfad angenommen. Die Kosten pro t transportierter und umgeschlagener Strohmenge richten sich nach der Nutzungsdauer der eingesetzten Maschinen.

Für den Betrieb der Modellanlage ist ein größeres Einzugsgebiet als für die in DBFZ (2012) modellierte Konversionsanlage notwendig. Die Dauer für den Umschlag im Zwischenlager ($t_{UMSC,ZWL}^{TRNS}$) und in der Anlage ($t_{UMSC,ANL}^{TRNS}$) wird dadurch nicht beeinflusst. Für den Transport kann angenommen werden, dass lediglich die Fahrtzeit des LKW-Gliederzuges ($t_{LKW,FHRT}^{TRNS}$) steigt, die Rüst- und Wartezeiten ($t_{LKW,RÜST}^{TRNS}$) jedoch unabhängig sind. Der Anteil der Rüst- und Wartezeiten wird für die vorliegende Arbeit mit 40 % angenommen. Tabelle 5-5 zeigt eine Übersicht der Stundensätze.

Tabelle 5-5: Umschlags- und Transportkosten sowie Zeitbedarf inklusive Personalkosten (in Anlehnung an DBFZ (2012))

Maschine	Auslastung [h]	Vollkosten [€ h ⁻¹]	Zeitbedarf [h t ⁻¹]
Teleskoplader	2.000	$p_{UMSC,ZWL}^{TRNS}=34,85$	$t_{UMSC,ZWL}^{TRNS}=0,0435$
LKW-Gliederzug (Warte- und Rüstzeit)	2.000	$p_{LKW,RÜST}^{TRNS}=57,69$	$t_{LKW,RÜST}^{TRNS}=0,1473$
LKW-Gliederzug (Fahrtzeit)	2.000	$p_{LKW,FHRT}^{TRNS}=57,69$	$t_{LKW,FHRT}^{TRNS}=0,0021^a$
Portalkran	4.150	$p_{UMSC,ANL}^{TRNS}=93,98$	$t_{UMSC,ANL}^{TRNS}=0,0157$

^a in h (t*km)⁻¹

Die angegebenen Preise für alle Umschlags- und Transportaktivitäten beziehen sich auf die transportierte Trockenmasse. Die Transportkosten (k^{TRNS}) lassen sich auf Basis des vorgestellten Zeit- und Kostenaufwandes wie folgt abschätzen.

Gleichung 5.19

$$k^{TRNS} = p_{LKW, FHRT}^{TRNS} \cdot t_{LKW, FHRT}^{TRNS} \cdot 2 d_m^{TRNS} + \sum_{n \in N} p_n^{TRNS} \cdot t_n^{TRNS}$$

mit:

$$N = \{UMSC, ZWL; LKW, RÜST; UMSC, ANL\}$$

5.2.1.2.4 Betriebsgebundene Kosten

Betriebsgebundene Kosten (K^{BTR}) entstehen durch die Aufrechterhaltung der Betriebsbereitschaft einer Anlage. Da sie nur unwesentlich durch die Auslastung der Anlage beeinflusst werden zählen sie zu den Fixkosten. Wie bereits oben erwähnt, kann eine klare Abgrenzung nicht immer vorgenommen werden. Im Gegensatz zur VDI 6025 werden Wartung und Inspektion hier nicht erfasst. Sie werden bereits in den kapitalgebundenen Kosten berücksichtigt. In der Modellanlage beinhalten die betriebsgebundenen Kosten daher ausschließlich die Personalkosten. Wie auch die Investitionskosten lassen sich diese in Abhängigkeit der Anlagenkapazität beschreiben (vgl. hierzu: Hamelinck et al. (2005), Lange (2007), Haase (2012)). Unter der Voraussetzung, dass die Personalkosten der Modellanlage für eine gegebene Anlagenkapazität (K_{ref}^{PRSNL}) bekannt sind, lassen sich die betriebsgebundenen Kosten (K^{BTR}) wie folgt darstellen.

Gleichung 5.20

$$K^{BTR} = K_{ref}^{PRSNL} \cdot \left(\frac{Kap}{Kap_{ref}} \right)^{exp}$$

mit:

K^{BTR}	Betriebsgebundene Kosten	€ a ⁻¹	K_{ref}^{PRSNL}	Referenzpersonalkosten	€ a ⁻¹
Kap	Anlagenkapazität	t a ⁻¹	Kap_{ref}	Referenzkapazität	t a ⁻¹
exp	Degressionsexponent	-			

Die Referenzpersonalkosten des Basisszenarios (K_{ref}^{PRSNL}) werden für Mitarbeiter verschiedene Leistungsgruppen⁴¹ (lg) abgebildet. Diese Kosten werden jeweils durch das Produkt der Mitarbeiteranzahl in einer Leistungsgruppe (A_{LG}^{PRSNL}) und dem durchschnittlichen Bruttoverdienst in der Leistungsgruppe (k_{LG}^{PRSNL}) gebildet. Die Summe über alle Leistungsgruppen entspricht unter Berücksichtigung eines Zuschlags für indirekte Personalkosten (f^{PRSNL}) den Referenzpersonalkosten (K_{ref}^{PRSNL}).

⁴¹ Das Prinzip der Leistungsgruppen beruht auf der Darstellungsweise der Publikationen des Statistischen Bundesamtes (2012)

Gleichung 5.21

$$K_{ref}^{PRSNL} = f^{PRSNL} \cdot \sum_{lg \in LG} A_{lg}^{PRSNL} \cdot k_{lg}^{PRSNL}$$

mit:

K_{ref}^{PRSNL}	Referenzpersonalkosten	€ a ⁻¹	A_{lg}^{PRSNL}	Mitarbeiteranzahl in einer Leistungsgruppe	MA
k_{lg}^{PRSNL}	Durchschnittspersonalkosten einer Leistungsgruppe	€ MA ⁻¹	f^{PRSNL}	Zuschlagsfaktor indirekte Personalkosten	-

5.2.1.2.5 Sonstige Kosten

Kosten, die nicht den bereits vorgestellten Kostenarten zuzuordnen sind, werden in Sonstigen Kosten (K^{STG}) erfasst. Dazu zählen Verwaltungskosten, Versicherungen und Steuern. Sie gehören zu den Fixkosten und lassen sich wie folgt angeben:

Gleichung 5.22

$$K^{STG} = K^{VRW} + K^{VRS} + K^{STR}$$

mit:

K^{STG}	Sonstige Kosten	€ a ⁻¹	K^{VRW}	Verwaltungskosten	€ a ⁻¹
K^{VRS}	Versicherungskosten	€ a ⁻¹	K^{STR}	Steuern	€ a ⁻¹

Verwaltungskosten

Die Abschätzung der Verwaltungskosten (K^{VRW}) ist auf der Basis von Einzelposten sehr aufwändig. Neben der Einzelermittlung kann daher nach VDI 6025 eine Faktormethode auf Basis anderer Kostenarten herangezogen werden. Ausgangspunkt ist die Feststellung, dass der Verwaltungsbedarf für kapital- (K^{KAP}), verbrauchs- (K^{KAP}) und betriebsgebundene Kosten (K^{BTR}) mit deren Höhe proportional zunimmt. Die Höhe des dabei eingesetzten Verwaltungskostenfaktors (f^{VRW}) wird auf der Basis von Literatur- und Erfahrungswerten abgeschätzt. Die Verwaltungskosten (K^{VRW}) lassen sich wie folgt darstellen:

Gleichung 5.23

$$K^{VRW} = (K^{KAP} + K^{VRB} + K^{BTR}) \cdot f^{VRW}$$

mit:

K^{VRW}	Verwaltungskosten	€ a ⁻¹	K^{KAP}	Kapitalkosten	€ a ⁻¹
K^{VRB}	Verbrauchsgebundene Kosten	€ a ⁻¹	K^{BTR}	Betriebsgebundene Kosten	€ a ⁻¹
f^{VRW}	Verwaltungskostenfaktor	%			

Versicherungskosten

Versicherungen stellen bei Anlagenbauprojekten einen Bestandteil der Risikosteuerung dar. Die Höhe der Versicherungskosten lässt sich in Abhängigkeit der Investitionskosten über den Versicherungskostenfaktor (f^{VRS}) abschätzen, der auf der Basis von Erfahrungswerten ermittelt wird:

Gleichung 5.24

$$K^{VRS} = FCI \cdot f^{VRS}$$

mit:

K^{VRS}	Versicherungskosten	€ a ⁻¹	FCI	Fixed Capital Investment	€
f^{VRS}	Versicherungskostenfaktor	%			

Steuern

Es gibt eine Vielzahl von Steuerarten, die in Abhängigkeit des Anlagenbauprojektes eine Rolle spielen können. In der Praxis werden der Bau und Betrieb von Anlagenbauprojekten häufig über Projektgesellschaften abgewickelt, was auch für die Modellanlage angenommen wird. Für die Modellanlage fallen daher unter anderem Körperschafts- und Gewerbesteuer an, deren Abschätzung im Folgenden vorgenommen wird. Es gibt darüber hinaus weitere Steuerarten wie beispielsweise die Grundsteuer, die abschließend in Form der sonstigen Steuern behandelt werden. Die Steuern (K^{STR}) der Modellanlage lassen sich wie folgt darstellen:

Gleichung 5.25

$$K^{STR} = K_{KRP}^{STR} + K_{GWR}^{STR} + K_{STG}^{STR}$$

mit:

K^{STR}	Steuern	€ a ⁻¹	K_{KRP}^{STR}	Körperschaftssteuer	€ a ⁻¹
K_{GWR}^{STR}	Gewerbsteuer	€ a ⁻¹	K_{STG}^{STR}	Sonstige Steuern	€ a ⁻¹

- Körperschaftssteuer

Voraussetzung für die Berechnung der Körperschafts- und Gewerbesteuer ist die Kenntnis über die Höhe des Gewinns. Geht man von einer vollständigen Ausschüttung des Gewinns an die Anteilseigner aus, entspricht dieser den Eigenkapitalkosten vor Abzug der Kapitalertragssteuer:

Gleichung 5.26

$$G = EKA \cdot TCI \cdot i_{KLG}^{KAP} \cdot \frac{1}{1 - s_{KRP}^{STR}}$$

mit:

G	Gewinn	€ a ⁻¹	EKA	Eigenkapitalanteil	€ a ⁻¹
TCI	Total Capital Investment	€ a ⁻¹	i_{KLG}^{KAP}	Eigenkapitalzins	% a ⁻¹
s_{KRP}^{STR}	Körperschaftssteuersatz	%			

Die Körperschaftssteuer (K_{KRP}^{STR}) bemisst sich nach der Höhe des zu versteuernden Einkommens der Kapitalgesellschaft. Diese wird auf Basis des Steuerbilanzgewinns unter Berücksichtigung von Kürzungen und Hinzurechnungen ermittelt. Für die Modellanlage werden diese jedoch nicht berücksichtigt. Der Tarif beträgt 15 %. Die Körperschaftssteuer (K_{KRP}^{STR}) ergibt sich damit wie folgt:

Gleichung 5.27

$$K_{KRP}^{STR} = G \cdot s_{KRP}^{STR}$$

mit:

K_{KRP}^{STR}	Körperschaftsteuer	€ a ⁻¹	G	Gewinn	€ a ⁻¹
s_{KRP}^{STR}	Körperschaftsteuersatz	%			

- Gewerbesteuer

Die Bemessungsgrundlage für die Gewerbesteuer (K_{GWR}^{STR}) ist der Gewerbeertrag. Dieser basiert auf dem Steuerbilanzgewinn, der abhängig von Kürzungen und Hinzurechnungen bemessen wird. Eine der relevantesten Hinzurechnungen sind die Fremdkapitalkosten, die zu insgesamt 25 % dem Gewerbeertrag hinzugerechnet werden. Die Fremdkapitalzinsen der Modellanlage berechnen sich aus dem Zinssatz (i_{DRL}^{KAP}), der über die Anlagenlebensdauer auf durchschnittlich die Hälfte des Fremdkapitals erhoben wird. Andere Positionen werden für die Abschätzung nicht berücksichtigt. Die Steuermesszahl beträgt 3,5 %. Sie wird mit dem gemeindeabhängigen Hebesatz multipliziert. Die Gewerbesteuer (K_{GWR}^{STR}) ergibt sich wie folgt:

Gleichung 5.28

$$K_{GWR}^{STR} = \left(G + i_{DRL}^{KAP} \cdot FKA \cdot TCI \cdot \frac{1}{2} \cdot 0,25 \right) \cdot s_{GWR,MSZ}^{STR} \cdot s_{GWR,HBS}^{STR}$$

mit:

K_{GWR}^{STR}	Gewerbesteuer	€ a ⁻¹	G	Gewinn	€ a ⁻¹
i_{DRL}^{KAP}	Fremdkapitalzins	% a ⁻¹	FKA	Fremdkapitalanteil	%
TCI	Total Capital Investment	€	$s_{GWR,MSZ}^{STR}$	Gewerbesteuermesszahl	%
$s_{GWR,HBS}^{STR}$	Gewerbesteuerhebesatz	%			

- Sonstige Steuern

Sonstige Steuern (K_{STG}^{STR}), wie beispielweise die Grundsteuer, werden nicht differenziert betrachtet. Sie werden im Folgenden näherungsweise auf der Basis des Fixed Capital Investments mit Hilfe des Faktors (f_{STG}^{STR}) abgebildet:

Gleichung 5.29

$$K_{STG}^{STR} = FCI \cdot f_{STG}^{STR}$$

mit:

K_{STG}^{STR}	Sonstige Steuern	€ a ⁻¹	FCI	Fixed Capital Investment	€
f_{STG}^{STR}	Faktor sonstige Steuern	% a ⁻¹			

5.2.2 Umsetzung der Modellierung von Zahlungsströmen einer Modellanlage zur Herstellung von n-Butanol

5.2.2.1 Umsatzerlöse

Wie angegeben ergeben sich die Umsatzerlöse aus dem Skalarprodukt des Umweltvektors (x^{uw*}) und des Preisvektors (p^{*+}). Im Folgenden werden die Produktpreise für n-Butanol (p_{y1}), Aceton (p_{y2}) und Ethanol (p_{y3}) ermittelt. Der Preis, den der Endverbraucher für n-Butanol (p_{y1}) bereit wäre zu zahlen, kann mit einer Abschätzung eingegrenzt werden.

Zum einen ersetzt beziehungsweise ergänzt n-Butanol FAME als alternative Biokomponente im Bioheizöl (siehe Kapitel 2.1.2). Der Preis pro Energieeinheit n-Butanol sollte daher den von FAME nicht übersteigen. Der Preis für FAME inklusive Energiesteuer von 0,07 € L⁻¹, jedoch ohne Mehrwertsteuer, beträgt etwa 0,025⁴² € MJ⁻¹. Geht man vom gleichen Preis für n-Butanol ohne Energiesteuer⁴³ aus, dürfte dieser nicht mehr als 816 € t⁻¹ betragen. Er stellt damit die Untergrenze des vom Verbraucher akzeptierten Preises dar.

Zum anderen wird n-Butanol fossiler Herkunft als chemischer Rohstoff weltweit gehandelt. Unter Berücksichtigung eines Preisaufschlags von 5 % für die Erneuerbarkeit des Produktes sind demnach etwa 1.110 € t⁻¹ zu erzielen (ICIS, 2012c). Für Endverbraucher, die bereit sind einen Preisaufschlag für eine erhöhte Nachhaltigkeit von n-Butanol gegenüber FAME zu akzeptieren, stellt dieser Preis die Obergrenze dar. Es kann davon ausgegangen werden, dass der Betreiber der Modellanlage n-Butanol vorzugsweise für den höheren Preis von 1.110 € t⁻¹ veräußern wird. Im Folgenden wird daher der höhere Preis für n-Butanol angenommen.

⁴² Mittelwert 10/2012: 1,37 € L⁻¹ inkl. Energiesteuer von 0,422 € L⁻¹ und Mehrwertsteuer (UFOP, 2012); 0,96 inkl. Energiesteuer von 0,076 € L⁻¹ und Mehrwertsteuer; Dichte 0,879 kg L⁻¹; Heizwert 37,2 MJ kg⁻¹

⁴³ Alkohole, die aus lignocellulosebasierten Rohstoffe hergestellt werden, genießen bis Ende 2015 eine Befreiung von der Energiesteuer (EnergieStG, 2012)

Geht man bei der Abschätzung des Preises für Aceton (p_{y2}) von einem akzeptierten Preisaufschlag für die Nachhaltigkeit des Produktes in Höhe von 5 % aus, beträgt dieser etwa 905 € t⁻¹ (ICIS, 2012a). Für erneuerbares Ethanol existiert bereits ein internationaler Markt, weshalb kein gesonderter Preisaufschlag berücksichtigt wird. Der Marktpreis von Ethanol wird mit 1.038 € t⁻¹ angenommen (ICIS, 2012b).

5.2.2.2 Kapitalgebundene Kosten

Ausgangspunkt für die Ermittlung des Annuitätenfaktors ist die Verteilung des Fremd- und Eigenkapitalanteils. Wie bereits in der Entwicklung des angepassten Ansatzes beschrieben, lassen sich die Owner's Cost nicht fremdfinanzieren (vgl. hierzu: Kapitel 5.2.1.2.2). Die Abbildung für die Modellanlage erfolgt durch die Annahme, dass alle Genehmigungen und 50 % der Ingenieurleistungen bereits vor Finanzierungsschluss anfallen und daher vom Betreiber finanziert werden müssen. Ausgehend davon können die Owner's Cost der Modellanlage aus Kapitel 5.1 entnommen werden:

Tabelle 5-6: Owner's Cost der Modellanlage

Position	Einheit	Betrag
Working Capital	€	28.033.000
Genehmigungen	€	3.243.000
50 % der Ingenieurleistungen	€	11.350.000
Summe	€	42.626.000

Für den Finanzierungsgrad ist neben dem Kreditausfallrisiko der Anlage beziehungsweise der Projektgesellschaft vor allem die Besicherung entscheidend. Für die Modellanlage wird angenommen, dass eine politische Unterstützung des Projektes hinsichtlich der Bereitstellung von Garantien besteht und einen Finanzierungsgrad (G_{DRL}^{KAP}) von 60 % ermöglicht. Aus Gleichung 5.12 ergibt sich für das gesamte Projekt damit ein Fremdkapitalanteil von 51,2 % und eine Eigenkapitalanteil von 48,8 %.

Der Fremdkapitalzinssatz für das Darlehen ist insbesondere vom aktuellen Zinsniveau (Euribor 3 Monate) und einem Risikoaufschlag darauf abhängig. Geht man für die Modellanlage von einem Euribor-Wert von 0,36⁴⁴ % und einem Risikoaufschlag von 400 Basispunkten beziehungsweise 4 % aus, können die Darlehenszinsen (i_{DRL}^{KAP}) mit einer Höhe von 4,36 % angenommen werden.

Ein Investor folgt dem gleichen Vorgehen zur Ermittlung der Eigenkapitalkosten beziehungsweise kalkulatorischen Zinsen. Da das Ausfallrisiko für den Investor höher ist, wird von einem Risikoaufschlag von 800 Basispunkten beziehungsweise 8 % ausgegangen. Die kalkulatorischen Zinsen (i_{KLK}^{KAP}) betragen ausgehend davon 8,36 %. Nach Gleichung 5.14 er-

⁴⁴ Durchschnitt Euribor 3 Monate im Q3 2012: 0,36 % (EZB, 2012b)

geben sich die gewichteten Durchschnittskapitalkosten (Weighted Average Cost of Capital) zu 6,37 %.

Die Annuität (f_{ANN}^{KAP}) hängt neben dem WACC von der Laufzeit des Darlehens beziehungsweise der Anlage ab, die mit 20 Jahren angenommen wird. Mit Hilfe von Gleichung 5.16 kann der Annuitätenfaktor mit 8,53 % abgeschätzt werden. Die Höhe des Restwertes der Modellanlage wird mit 20 % der Total Capital Investment angenommen. Die Annuität der Anlage beträgt daher 22.354.000 €.

Die Höhe des Instandhaltungsfaktors liegt nach Peters (2004) zwischen 2 und 10 % des Fixed Capital Investment. Da die Modellanlage keine Katalysatoren oder ähnlich kosten- und verschleißintensive Komponenten besitzt, wird die Höhe des Instandhaltungsfaktors mit 4 % angenommen. Auf Basis der oben abgeschätzten Faktoren und der Abschätzungen des Total Capital Investment (TCI) und Fixed Capital Investment (FCI) in Kapitel 5.1 beträgt die Höhe der kapitalgebundenen Kosten (K^{KAP}) 32.446.000 € a⁻¹.

5.2.2.3 Verbrauchsgebundene Kosten

Wie in Kapitel 5.2.2.3 entwickelt, werden die verbrauchsgebundenen Kosten (K^{VRB}) über das Skalarprodukt des Umweltvektors der Modellanlage (x^{uw*}) und des Faktorpreisvektors (p^{*-}) berechnet. Im Folgenden werden die zugrunde liegenden Preise beziehungsweise Gebühren der Produktionsfaktoren und Reststoffe auf Basis der Stoff- und Energiestrommodellierung in Kapitel 4 abgeschätzt.

Preis Weizenstroh

Das Strohaufkommen (f_{STR}^{TRNS}) im Einzugsgebiet der Modellanlage wurde in Kapitel 2.5.2 mit 11,5 t km⁻² a⁻¹ Weizenstroh (FM) abgeschätzt. Die Größe des Einzugsgebietes (A_{STR}^{TRNS}) kann nach Gleichung 5.16 mit 40.388 km² abgeschätzt werden. Daraus ergibt sich nach Gleichung 5.20 eine mittlere Transportdistanz (d_m^{TRNS}) von 106,9 km. Die Preise für Reststroh gelten im Allgemeinen für die Abholung ab Hof inklusive Beladung. Die Kosten für den Umschlag trägt damit der Erzeuger. Unter Berücksichtigung dieses Umstandes und auf Basis des vorgestellten Zeit- und Kostenaufwandes lassen sich die Transportkosten (k^{TRNS}) nach Gleichung 5.22 mit 37,80 € t⁻¹ abschätzen. Diese werden gemeinsam mit dem Preis für Weizenstroh den verbrauchsgebundenen Kosten zugeordnet (siehe Kapitel 5.2.2.3).

Stroh wird in Deutschland bislang vornehmlich regional gehandelt, Erzeuger und Abnehmer treten dabei überwiegend direkt in Kontakt. Handelsplätze für Stroh existieren zwar bereits (beispielsweise Proplanta, Raiffeisen), besitzen jedoch keine bundesweite Gültigkeit. Die Preise pro Tonne Weizenstroh schwanken zurzeit zwischen 40 und 80 € t⁻¹ Frischmasse Stroh. Im Emsland geht 2013 die erste großtechnische Strohf Feuerungsanlage Deutschlands in Betrieb. Für das aus einem Umkreis von etwa 60 km bezogene Stroh wird ein Preis von

durchschnittlich 80 € t^{-1} inklusive Transport gezahlt (Otto, 2012). Unter Berücksichtigung der Transportkosten entspricht das einem Preis für Weizenstrohfrischmasse von $57,71^{45} \text{ € t}^{-1}$. Dieser wird im Folgenden auch für die Modellanlage angenommen. Unter Berücksichtigung der Transportkosten (k^{TRNS}) von $33,95 \text{ € t}$ Trockenmasse und einem Feuchtigkeitsgehalt ($f_{FM,STR}^{VRBR}$) von $14 \text{ \% (m/m)}$ beträgt der Bereitstellungspreis für Weizenstrohtrockenmasse (p_{r1}) bei gegebener Kapazität (Kap) $99,74 \text{ € t}^{-1}$.

Preis Wasser

Die Preise für Frischwasser schwanken mit dem Standort der Anlage. Im Folgenden wird ein Preis (p_{s1}) von 2 € t^{-1} Frischwasser angenommen (Wasserbetriebe Berlin, 2012).

Preis Schwefelsäure

Die Preise für Schwefelsäure in Europa beziehungsweise Deutschland lagen im Verlauf des Jahres 2011 relativ stabil bei einem Wert um 100 € t^{-1} . Für die Modellanlagen wird dieser Bereitstellungspreis für Schwefelsäure (p_{s2}) angenommen (Fertecon, 2012).

Preis Calciumhydroxid

Der Preis für Calciumhydroxid ist in den letzten Jahren leicht gestiegen und wird umgerechnet mit 94 € t^{-1} angegeben (USGS, 2012), der auch als Bereitstellungspreis (p_{s3}) für die Modellanlage angenommen wird.

Preis Gips

Gips kann als Rohstoff für die Bauindustrie verwendet werden. Der Preis für Gips liegt bei etwa 21 € t^{-1} . Es ist jedoch nicht bekannt, ob der in der Modellanlage erzeugte Gips den Handelsspezifikationen genügt. Es wird daher angenommen, dass der Gips zu einem Preis (p_{z1}) von 0 € t^{-1} abgegeben wird.

Preis Enzyme

Die in der Literatur verfügbaren Preise für Cellulase und andere Enzyme zur Hydrolyse von Lignocellulose variieren stark. Die Enzyme sind zwar in sehr hohen Reinheiten für den Laborbedarf verfügbar, jedoch besteht eine Preisintransparenz in Bezug auf die Güte von Enzymen für industrielle Anforderungen. Für die Modellanlage wird auf Basis einer Abschätzung der DECHEMA (2009) ein Enzympreis (p_{s4}) von 2000 € t^{-1} angenommen.

Entsorgungsgebühren gasförmiger Emissionen

Es fallen keine Entsorgungsgebühren an.

⁴⁵ Nach Gleichung 5.19 entspricht ein Transportradius von 60 km durchschnittlichen Transportkosten von $22,29 \text{ € t}^{-1}$ Frischmasse. Daraus ergibt sich ein Strohpreis von $57,71 \text{ € t}^{-1}$ Frischmasse.

Entsorgungsgebühren Asche

Die Eignung von Weizenstrohasche als Kalium- beziehungsweise Phosphatdünger wurde in einem Langzeitversuch in Thüringen nachgewiesen (TLL, 2010). Es wird davon ausgegangen, dass die Asche daher nicht entsorgt werden muss und keine Gebühren anfallen.

Preis elektrische Energie

Für elektrische Energie variieren die Bereitstellungspreise maßgeblich mit der Abnahmemenge und Konstanz der Abnahme. Für Industrieanlagen wie der Modellanlage wird ein Bezugspreis (p_{s5}) von $0,11 \text{ € kWh}^{-1}$ angenommen. Dieser setzt sich aus einem Industriestrompreis von $0,0895 \text{ € kWh}^{-1}$ (Statista, 2012) und der Stromsteuer von $0,0205 \text{ € kWh}^{-1}$ (StromStG, 2012) zusammen.

Die Einspeisung der durch die Anlage erzeugten elektrischen Energie ist dann sinnvoll, wenn die durch das Erneuerbare-Energien-Gesetz (EEG) gewährte Einspeisevergütung höher als der Bezugspreis ist. Die vom EEG vorgesehene Einspeisevergütung bemisst sich zum einen nach der installierten Bemessungsleistung, zum anderen nach der Einsatzstoffvergütungsklasse. Für eine installierte Bemessungsleistung von etwa 28 MW sieht das EEG eine Vergütung von $0,073 \text{ € kWh}^{-1}$ vor, die um $0,02 \text{ € kWh}^{-1}$ Vergütung für den Einsatzstoff auf insgesamt $0,093 \text{ € kWh}^{-1}$ erhöht wird (EEG, 2012). Die ab dem Jahr 2013 geltende Verringerung der Vergütung von 2 % pro Jahr wurde im Hinblick auf das Bezugsjahr 2012 nicht berücksichtigt. Da der Bezugspreis höher als der Verkaufspreis ist, speist die Anlage daher nur Strom ein, wenn sie ihn selbst nicht verbrauchen kann.

Preis Kühlwasser

Mit dem Standort der Modellanlage variiert der Bereitstellungspreis von Kühlwasser. Für die Modellanlage wird ein Preis von $0,043 \text{ € t}^{-1}$ angenommen (DECHEMA, 2009), wie ihn Haase (2012) für den Industriestandort Leuna annimmt. Die Wärmemenge (Q), die durch eine t Kühlwasser abgeführt werden kann, ergibt sich aus Gleichung 5.30. Nimmt man für das Kühlwasser eine Temperaturdifferenz (ΔT_{kh}) von 20 auf 30 °C beziehungsweise 10 K und eine Wärmekapazität bei 20 °C (γ_p) von $4,190 \text{ kJ kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$, ergibt sich eine Wärmemenge (Q) von $41,9 \text{ MJ t}^{-1}$ Kühlwasser. Der Preis (p_{s7}) für Kühlwasser beträgt demnach $0,00103 \text{ € MJ}^{-1}$.

Gleichung 5.30

$$Q_{kh} = \gamma_p \cdot \Delta T_{kh}$$

mit:

Q_{kh}	Wärmemenge Kühlwasser	MJ t^{-1}	γ_p	Wärmekapazität bei 20 °C	$\text{kJ kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$
ΔT_{kh}	Temperaturdifferenz	K			

Der Faktorpreisvektor (p^{*-}) nimmt damit die unten gezeigte Form an. Auf dessen Basis ergeben sich die verbrauchsgebundenen Kosten (K^{VRB}) nach Gleichung 5.16 zu 86.056.000 € a⁻¹.

$$p^{*-} = \begin{bmatrix} 99,74 \\ 0 \\ 2 \\ 100 \\ 94 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 2000 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 2,4 \\ 0 \\ 0,09 \\ 0 \\ 0,00103 \end{bmatrix}$$

5.2.2.4 Betriebsgebundene Kosten

Im Basisszenario entsprechen die betriebsgebundenen Kosten (K^{BTR}) nach Gleichung 5.23 den Referenzpersonalkosten (K_{ref}^{PRSNL}) für eine Kapazität von 100.000 t a⁻¹. Es kann davon ausgegangen werden, dass sowohl das Degressionsverhalten der Personalkosten als auch die Personalstruktur einer Anlage zur Herstellung von Ethanol unter Berücksichtigung technologischer Besonderheiten vergleichbar mit der einer Anlage zur Herstellung von n-Butanol ist. Hamelinck et al. (2005) untersuchten die Produktion von Ethanol auf Basis von schwefelsäurevorbehandelter lignocellulosehaltiger Biomasse. Für die Abschätzung der Personalkosten in Abhängigkeit unterschiedlicher Kapazitäten schlugen sie einen Degressionsexponenten von 0,25 vor.

Die Struktur des Personalbedarfes wird in Anlehnung an Reimelt (2008) unter Berücksichtigung eines zusätzlichen Mitarbeiters pro Schicht für die Biomasseannahme abgeschätzt. Dabei wird bei einer durchgehenden Produktion von 8.000 h a⁻¹ von einem Fünfschichtbetrieb ausgegangen. Basierend darauf sind bei der im Basisszenario angenommenen Kapazität von 100.000 t a⁻¹ insgesamt 36 Mitarbeiter in der Modellanlage beschäftigt (siehe Tabelle 5-7). Diese können den Leistungsgruppen 1 mit *Arbeitnehmern in leitender Stellung*, Leistungs-

gruppe 2 mit *Herausgehobenen Fachkräften* oder Leistungsgruppe 3 mit *Fachkräften* zugeordnet werden.

Tabelle 5-7: Personalbedarf der Modellanlage bei einer Kapazität von 100.000 t a⁻¹ nach Schicht und Leistungsgruppe

Einsatzbereich	Leistungsgruppe	Mitarbeiter pro Schicht	Anzahl Schichten	Personalbedarf
Betriebsleitung	1	1	1	1
Kaufmännische Leitung	1	1	1	1
Sekretariat	3	2	1	2
Produktionsleitung	2	1	1	1
Schichtleitung	3	1	5	5
Anlagenführer	3	1	5	5
Mechaniker / Schlosser	3	1	5	5
Elektriker / MSR	3	1	5	5
Biomasseannahme	3	1	5	5
Laborleitung	2	2	1	2
Laborant	3	1	1	1
Buchhaltung	2	1	1	1
Personalreferent	2	1	1	1
Einkauf / Verkauf	2	1	1	1
Personalbedarf Leistungsgruppe 1				2
Personalbedarf Leistungsgruppe 2				6
Personalbedarf Leistungsgruppe 3				28

Der durchschnittliche Bruttoverdienst⁴⁶ der Leistungsgruppe 1 (k_1^{PRSNL}) beträgt etwa 101.208 € a⁻¹, der der Leistungsgruppe 2 (k_2^{PRSNL}) 65.328 € a⁻¹ und der der Leistungsgruppe 3 (k_3^{PRSNL}) 48.144 € a⁻¹. Die Verwaltungskosten sowie ein Personalreferent werden in den Kosten der Modellanlage bereits berücksichtigt. Der Zuschlag für indirekte Personalkosten (f^{PRSNL}) wird daher mit 20 % angenommen. Nach Gleichung 5.21 ergeben sich die Referenzpersonalkosten (K_{ref}^{PRSNL}) zu 2.331.000 € a⁻¹.

5.2.2.5 Sonstige Kosten

Verwaltungskosten

Nach Gleichung 5.23 lassen sich die Verwaltungskosten der Modellanlage als Funktion des Verwaltungskostenfaktors (f^{VRW}), der Kapitalkosten (K^{KAP}), der verbrauchs- (K^{KAP}) und der betriebsgebundenen Kosten (K^{BTR}) darstellen. Der Verwaltungskostenfaktor (f^{VRW}) der Modellanlage wird mit 2 % angenommen. Die Verwaltungskosten betragen damit 2.202.000 € a⁻¹.

⁴⁶ Durchschnitt Männer und Frauen inkl. Sonderzahlungen (Statistisches Bundesamt, 2012)

Versicherungskosten

Der Versicherungskostenfaktor (f^{VRS}) kann mit 1 % des Fixed Capital Investment (FCI) angenommen werden. Nach Gleichung 5.23 betragen die Versicherungskosten (K^{VRS}) damit 2.417.000 € a⁻¹.

Körperschaftsteuer

Bemessungsgrundlage der Körperschaftssteueranlagung ist der Gewinn (G). Nach Gleichung 5.26 ergibt sich dieser aus dem Eigenkapitalanteil, den Total Investment Cost, dem Eigenkapitalzins und dem Körperschaftssteuersatz. Bei Eigenkapitalkosten von 8,36 % beträgt der Gewinn 13.544.000 € a⁻¹. Bei einem Körperschaftssteuersatz von 15 % beträgt die Höhe der Körperschaftsteuer (K_{KRP}^{STR}) 2.032.000 € a⁻¹.

Gewerbesteuer

Die Bemessungsgrundlage für die Gewerbesteuer (K_{GWR}^{STR}), der Gewerbeertrag, beträgt 14.321.000 € a⁻¹, die Steuermesszahl ($s_{GWR,MSZ}^{STR}$) 3,5 %. Der gemeindeabhängige Hebesatz betrug im Jahr 2011 durchschnittlich 438 % (DIHK, 2011). Unter der Annahme, dass dieser Hebesatz ebenfalls für die Modellanlage zutrifft, beläuft sich die Gewerbesteuer (K_{GWR}^{STR}) auf 2.195.000 € a⁻¹.

Sonstige Steuern

Weitere Steuerarten werden auf der Basis des Fixed Capital Investments mit Hilfe des Faktors (f_{STG}^{STR}) abgebildet. Er wird für die Modellanlage auf 0,5 % des Fixed Capital Investments (FCI) geschätzt. Nach Gleichung 5.29 ergeben sich die sonstigen Steuern (K_{STG}^{STR}) zu 1.261.000 € a⁻¹.

Summe der sonstigen Kosten

Nach Gleichung 5.22 bestehen die sonstigen Kosten (K^{STG}) aus den Verwaltungskosten, Versicherungskosten und den Steuern. Für die Modellanlage betragen sie 10.428.000 € a⁻¹.

5.2.3 Ergebnisse der Zahlungsströme

Im Folgenden werden die für das Basisszenario identifizierten Kosten zur Herstellung von n-Butanol den Umsatzerlösen gegenübergestellt. Nach Gleichung 5.10 beträgt die Summe der Produktionskosten abzüglich der Umsätze der Produkte Aceton, Ethanol und Elektrizität 1,21 € L⁻¹. Abbildung 5-8 zeigt die Kosten für n-Butanol in der Übersicht. Inklusive des Transportes entfällt deutlich mehr als die Hälfte aller Kosten auf die Bereitstellung von Weizenstroh und Enzymen mit 0,42 beziehungsweise 0,29 € L⁻¹. Die Annuität, Instandhaltung und Kosten für Chemikalien betragen 0,21, 0,09 beziehungsweise 0,06 € L⁻¹ und tragen mit einem Viertel zu den Gesamtkosten bei. Darüber hinaus entfallen 0,05 € L⁻¹ auf Steuern, während Personalkosten mit etwa 0,02 € L⁻¹ eine untergeordnete Rolle einnehmen. Durch

die Berücksichtigung der Umsätze von Aceton, Ethanol und Elektrizität werden die Gesamtkosten zur Herstellung von n-Butanol um etwa 36 % verringert.

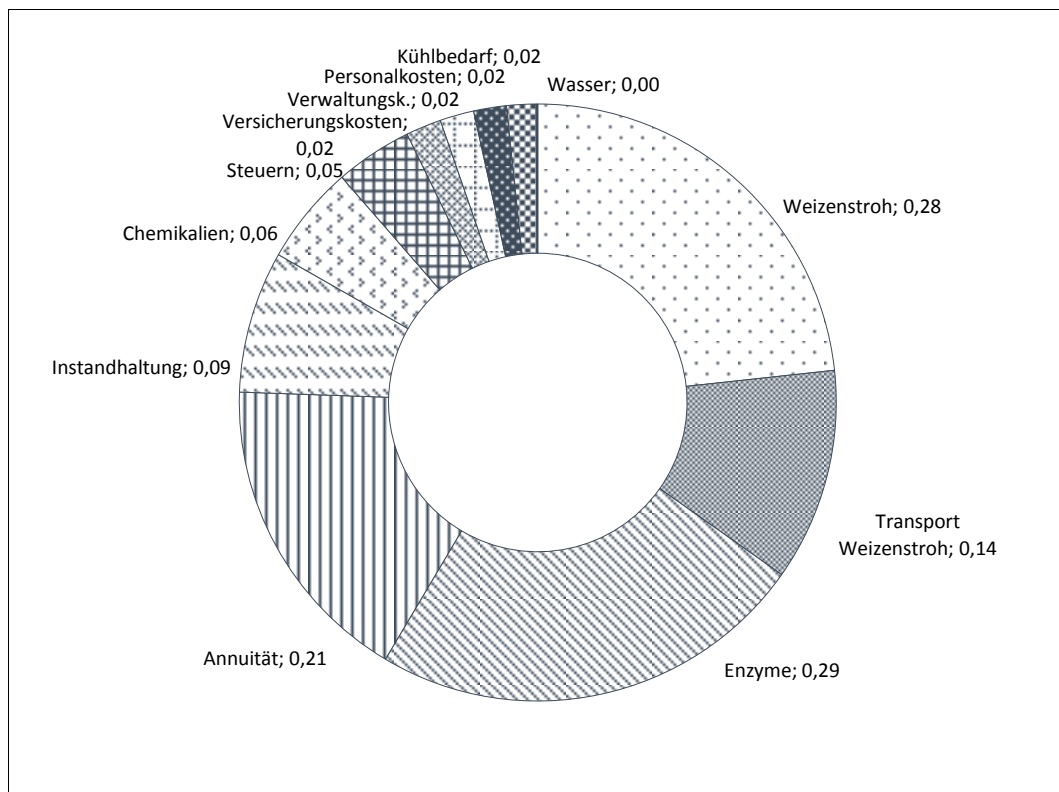


Abbildung 5-8: Kosten zur Herstellung von einem Liter n-Butanol aus Reststroh im Basisszenario

Den Gesamtkosten von 131.261.000 € a⁻¹ steht ein Umsatz in Höhe von 107.162.000 € a⁻¹ gegenüber. Daraus ergibt sich ein Fehlbetrag von 24.099.000 € a⁻¹. Pro Liter n-Butanol entspricht das 0,31 € L⁻¹. Damit die Modellanlage kostendeckend arbeitet, müssten entweder die Kosten auf 0,90 € L⁻¹ n-Butanol fallen oder der Verkaufspreis aller Produkte um etwa 26 % steigen.

Durch die Verwendung des entwickelten Ansatzes ergeben sich jedoch Unschärfen. Er bildet alle Zahlungsströme mit der für eine Abschätzung hinreichenden Genauigkeit ab, kann jedoch kein detailliertes Finanzierungsmodell ersetzen.

Zum einen entsteht eine Unterbewertung der ermittelten Kosten durch die Berücksichtigung des Restwertes der Anlage im Total Capital Investment. Zwar geht der Restwert diskontiert in die Berechnung ein, jedoch verringert er die Höhe der Annuität und führt damit zu einer Unterbewertung. Darüber hinaus sind die Bauzinsen, die im Zeitraum vor der Inbetriebnahme der Anlage entstehen, nicht detailliert erfasst und führen ebenfalls zu einer Unterbewertung.

Zum anderen entspricht die Darlehenslaufzeit im Modell der Anlagenlaufzeit und erhöht damit absolut die Zinslast, was zu einer Überbewertung der Kosten führt. Ferner sind keine Preissteigerungen für Produkte und Rohstoffe berücksichtigt, die bei konstantem Zinssatz ebenfalls zu einer Überbewertung der Finanzierungskosten führen. Des Weiteren bildet das

Modell keinen Verlustvortrag in den ersten Betriebsjahren ab, der einen reduzierenden Einfluss auf die Steuerlast aufweist. In erster Näherung gleichen sich die Effekte der Unter- und Überbewertung jedoch aus.

5.2.4 Sensitivitätsanalyse

Wie in Kapitel 4 dargestellt, geht die Entwicklung eines Modells aus einer Reihe von Abstraktionen hervor. Die systemimmanente Unsicherheit von Investitionskostenabschätzungen wurde bereits diskutiert und lässt sich mit Hilfe der in der Literatur verfügbaren Genauigkeiten abgrenzen (vgl. hierzu: Kapitel 5.1). Die Datenunsicherheit des in dieser Arbeit vorgelegten Modells kann nicht anhand realer Systeme eingegrenzt werden, da bislang keine industrielle Realisierung der Modellanlage existiert. Um den Einfluss externer Faktoren auf die Gesamtkosten zu quantifizieren und damit die Robustheit der Annahmen zu überprüfen, wird im Folgenden eine Sensitivitätsanalyse durchgeführt.

Die Sensitivitätsanalyse ist ein Werkzeug zur Untersuchung einzelner Parameter auf eine resultierende Kennzahl. Dabei wird innerhalb eines geeigneten Rahmens eine Parametervariation durchgeführt und das Ergebnis graphisch in Form eines Strauss-Plots dargestellt (vgl. hierzu: Couper (2003)). Parameter, deren Variation eine starke Auswirkung auf die resultierende Kennzahl haben, weisen dabei eine hohe Steigung auf. Abhängig vom Modell und der Wahl des Untersuchungsrahmens kann ein Strauss-Plot neben der Steigung der erzeugten Verläufe auch Hinweise auf das Vorliegen von Maxima oder Minima geben. Kritik an der Sensitivitätsanalyse ergibt sich aus der Annahme unabhängiger Parameter. In der Realität treten häufig Wechselwirkungen zwischen Parametern auf. Diese finden im Folgenden keine Berücksichtigung.

Ausgehend davon werden relevante Parameter zur Variation identifiziert und im Intervall von -80 % bis +80 % des Ausgangswertes variiert. Auf Basis der Kostenpositionen in Abbildung 5-8 werden die Kosten für Reststroh inklusive Transport, Enzyme und Total Capital Investment variiert. Die Betrachtung des Einflusses von Reststroh erstreckt sich somit über den Bereich von 50,96 und 156,22 € t⁻¹, die der Enzyme von 400 bis 3.600 € t⁻¹ und die des Total Capital Investments von 56,10 bis 504,60 Mio. €. Zusätzlich findet eine Analyse der Einflüsse der Abschreibungsdauer⁴⁷, der Jahresvolllaststunden und der Kapazität der Modellanlage statt. Diese werden in den Grenzen von 4 bis 36 a, 1.600 bis 8700 h a⁻¹ beziehungsweise von 20.000 bis 180.000 t a⁻¹ variiert. Abbildung 5-9 zeigt die Ergebnisse der Variation.

⁴⁷ Neben der Abschreibungsdauer verändert sich die Dauer der Darlehenslaufzeit

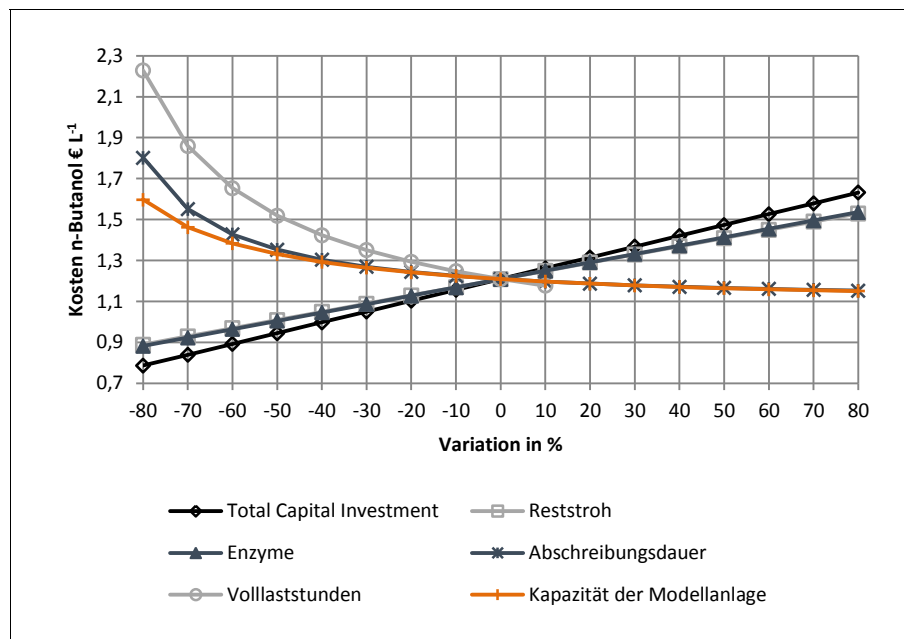


Abbildung 5-9: Einfluss der Variation ausgewählter Parameter auf die Herstellungskosten von n-Butanol im Basisszenario

Durch den hyperbolischen Verlauf beeinflusst die Anzahl der Jahresvolllaststunden die Produktionskosten insbesondere im unteren Bereich. Eine Erhöhung der Volllaststunden um 10 % führt zu einer Reduzierung der Kosten von 0,03 € L⁻¹. In geringerer Ausprägung trifft diese Beobachtung auch für die Abschreibungsdauer zu. Der über den gesamten Variationsbereich sensitivste Parameter ist jedoch das Total Capital Investment. Mit jedem Anstieg beziehungsweise jeder Abnahme um 10 % variieren die Gesamtkosten um über 0,05 € L⁻¹. Ähnliche Effekte lassen sich bei den Kosten für Weizenstroh und den Kosten für Enzyme mit Ausprägungen von jeweils etwa 0,04 € L⁻¹ beobachten.

Während höhere Ausprägungen der bereits diskutierten Parameter über das untersuchte Intervall hinaus unwahrscheinlich sind, ist eine Erweiterung der Anlagenkapazität über 180.000 t a⁻¹ hinaus denkbar.

Bei der Erweiterung der Anlagenkapazität lassen sich zwei Effekte unterscheiden. Zum einen steigen die Investitionskosten mit wachsender Kapazität unterproportional stark an (vgl. hierzu: Kapitel 5.1.1.2.1), so dass die Gesamtkosten sinken. Zum anderen steigen die Transportkosten mit wachsender Kapazität, wodurch die Gesamtkosten steigen. Für die Gesamtfunktion existiert daher ein Minimum.

Der in Abbildung 5-9 zu erkennende asymptotische Verlauf lässt darauf schließen, dass dieses Minimum im Rahmen des untersuchten Intervalls nicht erreicht wird. Nimmt man die Variation des Einzelparameters Anlagenkapazität für ein erweitertes Intervall vor, lässt sich das Minimum der Gesamtkosten graphisch ermitteln. Die optimale Anlagenkapazität der Modellanlage liegt demnach bei 340.000 t a⁻¹ (siehe Abbildung 5-10). In diesem Fall betragen die Gesamtkosten zur Herstellung von n-Butanol 1,13 € L⁻¹, das Total Capital Investment beläuft sich auf 634 Mio. €. Da die vorgestellte Technologie wie bereits beschrieben noch nicht

größentechnisch realisiert wurde, ist davon auszugehen, dass vorerst kein Investor dieses Risiko übernehmen wird.

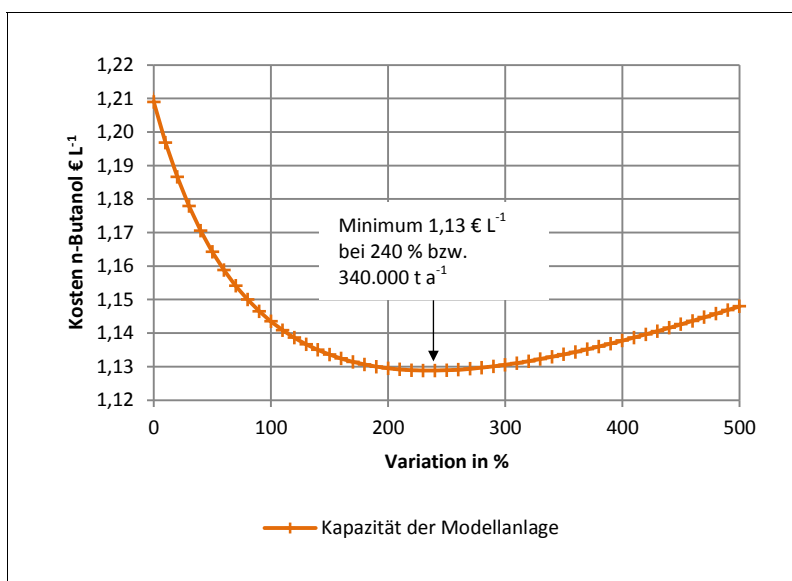


Abbildung 5-10: Einfluss der Variation der Anlagenkapazität auf die Herstellungskosten von n-Butanol im Basisszenario

5.3 Ergebnisse der Wirtschaftlichkeitsbetrachtung

Zur Ermittlung der Wirtschaftlichkeit des Basisszenarios der Modellanlage wird das Modell um eine Investitionskostenschätzung und die Darstellung aller periodischen Zahlungsströme erweitert. Die Total Investment Cost der Modellanlage betragen 280 Mio. €, die des Fixed Capital Investment 252 Mio.⁴⁸€. Die beschriebene Modellanlage arbeitet unter den gegebenen Voraussetzungen nicht wirtschaftlich. Bei einem Preis für Weizenstroh von etwa 58 € t⁻¹ Frischmasse stehen den Produktionskosten von 1,21 € L⁻¹ n-Butanol Erlöse von 0,90 € L⁻¹ gegenüber. Der daraus resultierende Fehlbetrag beträgt 0,31 € L⁻¹.

Die mittlere Transportstrecke von 107 km verursacht dabei Transport-, Lagerungs- und Umschlagkosten von Reststroh in Höhe von annähernd 38 € t⁻¹ Stroh bzw. 0,14 € L⁻¹ n-Butanol. Obwohl die Transportkosten bei der gegebenen Kapazität bereits 37 % der Bereitstellungskosten von Stroh betragen, sinken die Produktionskosten durch eine Erhöhung der Anlagenkapazität und damit erhöhte Transportdistanz. Sie betragen bei optimaler Kapazität von 370.000 t a⁻¹ etwa 1,13 € L⁻¹. Trotz dieser Verringerung um 7 % wäre auch dann der wirtschaftliche Betrieb der Modellanlage nicht gewährleistet.

⁴⁸ Für eine Anlage zur Produktion von Ethanol aus Reststroh der gleichen Kapazität jedoch mit Änderungen in Biomassevorbereitung sind Fixed Capital Investment Cost in Höhe von etwa 241 Mio. € zu erwarten (Abschätzung mit Hilfe des Größendegressionsansatzes (siehe Kapitel 5.1.1.2.1) auf Basis von Klein-Marcuschamer (2010) und einem Degressionsexponenten in Höhe von 0,6)

Wie auch die Bereitstellung erneuerbarer elektrischer Energie der ersten technologischen Generation muss das entstehende wirtschaftliche Defizit jedoch dem ökologischen Nutzen gegenübergestellt werden. Kapitel 6 erweitert das Modell daher um eine ökologische Betrachtung. Die Identifikation und Umsetzung technischer und wirtschaftlicher Potentiale wird in Form eines Fortschrittsszenarios in Kapitel 7 betrachtet.

6 Erweiterung des Modells um eine ökologische Betrachtung

Im vorhergehenden Kapitel wurden die Produktionskosten von n-Butanol im Basisszenario auf Basis des entwickelten Stoff- und Energiestrommodells abgeleitet. Die mit der Herstellung von n-Butanol verbundene ökologische Nachhaltigkeit wurde bislang nicht betrachtet.

Der ursprünglich aus der Forstwirtschaft stammende Begriff *Nachhaltigkeit* (Bibliographisches Institut GmbH, 2012) wird heute meist als Synonym für eine nachhaltige Entwicklung gebraucht. Darunter ist eine Entwicklung zu verstehen, „[...]die die Bedürfnisse der Gegenwart befriedigt, ohne zu riskieren, daß künftige Generationen ihre eigenen Bedürfnisse nicht befriedigen können.“ (Hauff, 1987). Das Konzept der Nachhaltigkeit wird sowohl für die ökologische Dimension als auch die ökonomische und soziale genutzt (Bundestag, 1998).

Ziel dieses Kapitels ist die Erweiterung des Modells um die Betrachtung der ökologischen Nachhaltigkeit. Darüber hinaus findet eine Überprüfung im Hinblick auf energie- und klimapolitische Rahmenbedingungen sowie die vergleichende Gegenüberstellung der Prozessketten von n-Butanol, Heizöl und FAME statt. Dazu wird zunächst der Ansatz der Ökobilanz beziehungsweise des Life Cycle Assessment und eine geeignete Methoden zur Wirkungsabschätzung und rechnergestützten Umsetzung vorgestellt. Anschließend findet die Konzeption der Ökobilanz für das zu untersuchende Produktionssystem statt.

Für die Umsetzung werden die Ergebnisse der Stoff- und Energieflussmodellierung aus Kapitel 4 herangezogen und die Ergebnisse in Abschnitt 6.3 dargestellt und ausgewertet. In diesem Zusammenhang werden auch die Treibhausgasvermeidungskosten auf Basis der Wirtschaftlichkeitsberechnung in Kapitel 5 abgeleitet.

6.1 Methodisches Vorgehen der Nachhaltigkeitsüberprüfung

Die Ökobilanz ist eine Umweltmanagementmethode, die Umweltaspekte und potentielle Umweltwirkungen über den Produktlebenszyklus beziehungsweise alle Produktionsstufen vom Rohstoff bis zur Entsorgung betrachtet. Sie ist durch die DIN EN ISO 14040 spezifiziert und umfasst die Aufstellung und anschließende Bewertung aller relevanten Input- und Outputströme. Ökonomische oder soziale Aspekte werden dabei weder erfasst noch bewertet. Der Ansatz besteht aus den folgenden vier Phasen (DIN, 2006).

- Festlegung von Ziel und Untersuchungsrahmen
- Sachbilanz
- Wirkungsabschätzung
- Auswertung

Die Ökobilanz gibt kein festes Bewertungsinstrument zur Wirkungsabschätzung vor. Sie lässt sich mit verschiedenen Instrumenten durchführen, die sich in Abhängigkeit ihrer Einsetzbarkeit für die Bearbeitung der Zielsetzung eignen (DIN, 2006). Im Hinblick darauf werden in den folgenden Abschnitten die relevantesten Methoden vorgestellt (siehe Kapitel 6.1.1).

Aufgrund der vielfältigen Einsatzgebiete der Ökobilanzierung existieren unterschiedliche rechnergestützte Ansätze und Datenbanken zur Aufstellung der Sachbilanz und Umsetzung der Wirkungsabschätzung. In den Kapiteln 6.1.1 und 6.1.2 wird die jeweils geeignetste der vorgestellten Methoden zur Darstellung des zu untersuchenden Produktionssystems identifiziert. Das methodische Vorgehen schließt mit der Konzeption einer angepassten Ökobilanz in Anlehnung an DIN EN ISO 14040. Diese umfasst die Festlegung des Ziel- und Untersuchungsrahmens sowie die Durchführungsplanung der Sachbilanz und der Wirkungsabschätzung.

6.1.1 Ökologieorientierte Methoden zur Wirkungsabschätzung im Rahmen einer Ökobilanz

Es existiert eine Vielzahl unterschiedlicher Bewertungsmethoden, die sich in Abhängigkeit der Zielsetzung zur Wirkungsabschätzung eignen. Eine Übersicht und Vorstellung der relevantesten geben die folgenden Abschnitte⁴⁹. Alle vorgestellten Methoden eignen sich insbesondere für die Bewertung überregionaler Vorhaben.

6.1.1.1 Methode des Umweltbundesamtes (UBA)

Die Bewertungsmethode des Umweltbundesamtes (UBA) wurde 1999 eingeführt und ist seitdem für alle vom UBA durchgeführten oder beauftragten Ökobilanzen bindend. Die Methode beruht auf dem Konzept der Wirkungsindikatoren und ist speziell für den Einsatz als Bewertungsmethode einer Ökobilanz nach DIN EN 14040 entwickelt worden. Die Bewertung der Sachbilanz kann dabei in den folgenden zehn Wirkungskategorien erfolgen: direkte Gesundheitsschädigung, direkte Schädigung von Ökosystemen, aquatische Eutrophierung, terrestrische Eutrophierung, Naturraumbeanspruchung, photochemische Oxidantienbildung (Sommersmog), Ressourcenbeanspruchung, stratosphärischer Ozonabbau, Treibhauseffekt und Versauerung. Die Ergebnisse der Sachbilanz werden durch Charakterisierungsfaktoren zu Indikatorergebnissen verdichtet.

⁴⁹ Die Auswahl der Methoden basiert auf den Ausführungen von Bielig (2010).

Dabei geht das UBA im Gegensatz zur später vorgestellten Methode der ökologischen Knappheit davon aus, dass ein direkter qualitativer oder quantitativer Vergleich der Indikatorergebnisse der unterschiedlichen Wirkungskategorien nicht zulässig ist. Beispielsweise liegen keine naturwissenschaftlichen Erkenntnisse dazu vor, ob eine bestimmte Flächenversiegelung oder eine bestimmte Menge Treibhausgase eine größere ökologische Gefahr darstellen. Das UBA führt daher für jede Wirkungskategorie die Kriterien *ökologische Gefährdung*, *Distance-to-target* und *Spezifischer Beitrag* an, die anhand relativer Prioritäten A (höchste Priorität) bis E (niedrigste Priorität) innerhalb der Kategorie charakterisiert werden. Nach einem festen Rangfolgesystem kann daraus die *Ökologische Priorität* einer Wirkungskategorie ermittelt werden (UBA, 1999).

6.1.1.2 Methode des Centrums voor Milieukunde (CML)

Wie auch die Methode des UBA greift die von Heijungs et al. (1992) entwickelte Methode des Centrums voor Milieukunde (CML) das Konzept der Wirkungsindikatoren auf. Sie erfüllt damit ebenfalls die Anforderungen einer Ökobilanz nach DIN EN 14040. Im Gegensatz zur UBA-Methode umfasst die CML-Methode bereits die Erstellung der Zieldefinition und Sachbilanz. Sie gehört zu den *cradle-to-grave-Methoden*, die neben der Herstellung ebenfalls die Entsorgung berücksichtigen und ist prinzipiell nicht auf die Niederlande beschränkt. Wie auch die UBA-Methode untersucht sie verschiedene Wirkungskategorien und bewertet diese anhand definierter Kriterien. Kritik an der CML-Methode ergibt sich durch das mehrdimensionale Kennzahlenprofil, wodurch keine eindeutige Interpretation möglich ist (Gabler, 2012b).

6.1.1.3 Methode der Ökologischen Knappheit

Die Methode der ökologischen Knappheit wurde erstmals 1990 im Auftrag des Schweizer Bundesamtes für Umwelt und weiterer privater Unternehmen konzipiert. Sie geht davon aus, dass eine bestimmte Umweltbelastung (kritischer Fluss) gesellschaftspolitisch tolerierbar ist. Durch den Vergleich des aktuellen mit dem tolerierbaren Fluss ergibt sich eine Differenz (*Distance-to-target*). Durch die Beaufschlagung mit Bewertungsfaktoren beziehungsweise Ökofaktoren werden diese zu einem oder mehreren Indikatoren zusammengefasst. Die Ökofaktoren basieren auf der aktuellen Gesetzgebung und den umweltpolitischen Zielen. Alle Umwelteinwirkungen werden in Umweltbelastungspunkten ausgedrückt und anschließend summiert. Die dimensionslosen Umweltbelastungspunkte spiegeln das Verhältnis von vorliegender Umweltbelastung zu tolerierbarer Umweltbelastung wieder (BAFU, 2009).

Kritik an der Methode ergibt sich durch den Bezug auf die aktuelle Gesetzgebung und umweltpolitische Ziele. Die Bewertung unterliegt damit nicht rein naturwissenschaftlichen Erkenntnissen und kann in unterschiedlichen Regionen voneinander abweichen. Darüber hinaus reflektiert die Bewertung die Humantoxizität, während die Ökotoxizität nicht berücksichtigt wird (Wietschel, 2002).

6.1.1.4 Eco-Indikator 99-Methode

Der Eco-Indikator 99 bewertet die Sachbilanz auf Basis eines schadensorientierten Konzeptes. Der Eco-Indikator 99 ist eine Weiterentwicklung des Eco-Indikator 95 (Gabler, 2012c). Dabei werden alle Emissionen sowie der Flächen- und Ressourcenverbrauch den Schädigungen der menschlichen Gesundheit, der Ökosystemqualität und der Ressourcen zugeordnet. Das Vorgehen enthält eine Wirkungsanalyse, eine Schadensanalyse und die Auswertung in Form einer Normierung beziehungsweise Gewichtung. Darüber hinaus beinhaltet die Methode die Berücksichtigung von Unsicherheiten. Das Ergebnis der Eco-Indikator 99-Methode ist eine dimensionslose aggregierten Punktzahl (Goedkoop, 2000). Kritisch anzumerken ist die beschränkte Aussagekraft einer eindimensionalen Kennzahl (Gabler, 2012c).

6.1.1.5 Methode des Material-Inputs pro Serviceeinheit (MIPS)

Die Methode des Material-Inputs pro Serviceeinheit (*MIPS*) berechnet den kumulierten Materialeinsatz für jede Einheit oder Dienstleistung. Sie wurde am Wuppertal Institut für Klima, Umwelt, Energie entwickelt und gibt die Umweltbelastung über den gesamten Lebenszyklus wieder. Der Materialeinsatz wird dabei einer der folgenden fünf Kategorien zugeordnet: biotische Rohmaterialien, abiotische Rohmaterialien, Bodenbewegung in Land- und Forstwirtschaft, Luft und Wasser. Das Ergebnis wird in Form einer aggregierten Kennzahl angegeben (Schmidt-Bleek, 1994). Ähnlich der Methode der ökologischen Knappheit und der Eco-Indikator 99-Methode setzt sich der MIPS-Ansatz der Kritik an der beschränkten Aussagekraft einer eindimensionalen Kennzahl aus.

6.1.2 Rechnergestützte Ansätze zur Durchführung der Wirkungsabschätzung im Rahmen einer Ökobilanz

Für die Durchführung der Wirkungsabschätzung stehen verschiedene rechnergestützte Simulations-Ansätze zur Verfügung. Sie bestehen meist aus einer Programm- beziehungsweise Berechnungsoberfläche und einer angeschlossenen Datenbank mit Sachbilanzen. Reine Datenbanken wie Ecoinvent oder Probas werden daher im Folgenden nicht berücksichtigt. Alle vorgestellten Instrumente eignen sich im Hinblick auf die vorgestellte Vorgehensweise der Ökobilanz nach DIN EN ISO 14040. Weitere Anforderungen zur Abbildung des zu untersuchenden Produktionssystems im Rahmen einer Ökobilanz ergeben sich aus der Zielsetzung des Kapitels:

- Möglichkeit, die zu untersuchende Prozesskette als Black- oder Grey-Box abzubilden sowie einfache Modifikation der Datenbankeinträge zur Modellierung von Prozessketten
- Programmwartung und -update, um den entwickelten Ansatz auch für zukünftige Projekte nutzen zu können

- Verfügbarkeit einer umfangreichen Datenbank mit Bilanzdaten zu Prozessen, Produkten und Dienstleistungen
- Nachvollziehbarkeit und Prüfbarkeit der Datenbankeinträge

GaBi

GaBi (Ganzheitliche Bilanzierung) ist ein Programm zur Erstellung von Ökobilanzen, das von der Universität Stuttgart in Zusammenarbeit mit PE Europe entwickelt wurde. GaBi wird unter anderem von Kraft Foods, der Volkswagen AG und Tata Steel eingesetzt und ist weltweit verbreitet (PE International, 2012). Derzeit ist Version 5 kostenpflichtig erhältlich. GaBi erfüllt alle definierten Anforderungen an einen rechnergestützten Ansatz.

SimaPro

Die von PRé Consulting entwickelte Software SimaPro weist ein vergleichbares Leistungsspektrum wie GaBi auf. SimaPro ist nach eigenen Angaben Marktführer und international mit einem Beraterteam aufgestellt (Pré Consultants, 2012). Die Version 7 ist in verschiedenen Ausführungen kostenpflichtig erhältlich. SimaPro erfüllt alle definierten Anforderungen an einen rechnergestützten Ansatz.

Umberto

Die Software Umberto wurde vom Institut für Umweltinformatik (IFU) in Kooperation mit dem Institut für Energie- und Umweltforschung (IFEU) entwickelt. Umberto verfügt unter anderem über die Möglichkeit, flexible Prozessspezifikationen zu definieren und wird im Schwerpunkt im europäischen Raum z.B. von der BASF AG, der Henkel KGaA und der DECHEMA e.V. eingesetzt (Umberto, 2012). Version 5.5 ist in verschiedenen Ausführungen kostenpflichtig erhältlich. Auch Umberto erfüllt alle definierten Anforderungen, die an einen rechnergestützten Ansatz gestellt werden.

GEMIS

Das Globale Emissions-Modell Integrierter Systeme (GEMIS) wurde vom Öko-Institut unter Förderung des Hessischen Ministeriums für Umwelt, Landwirtschaft und Forsten konzipiert und seit der Einführung 1987 kontinuierlich weiterentwickelt (2008). Neben der Möglichkeit, neue Produkte und Produktionsprozesse anzulegen, verfügt GEMIS bereits über eine Reihe von Prozessen, die zur Untersuchung von Nutzungspfaden in der Wärmebereitstellung für den Raum Deutschland angelegt wurden. GEMIS wurde daher auch zur Abbildung der Emissionen der Shell-Hauswärmestudie herangezogen (Shell, 2011). Die aktuelle verfügbare Version 4.7 steht entgeltfrei zur Verfügung. GEMIS erfüllt alle definierten Anforderungen und eignet sich durch die bereits angelegten Prozesse für den Raum Deutschland in besonderer Weise. Daher wird GEMIS im Folgenden als rechnergestützter Ansatz zur Erhebung und Wirkungsabschätzung eingesetzt.

6.1.3 Konzeption einer Ökobilanz des zu untersuchenden Produktionssystems

In der vorliegenden Arbeit wurden bereits die Einsetzbarkeit von n-Butanol als Biokomponente in Heizöl EL und deren Wirtschaftlichkeit überprüft. Die Ökobilanz erweitert das entwickelte Modell um die Überprüfung der ökologischen Nachhaltigkeit. Weiterhin ermöglicht sie die Identifikation der größten Hebel zur Erhöhung der Nachhaltigkeit. Im Folgenden wird die Ökobilanz in Anlehnung an die Vorgehensweise der DIN EN ISO 14040 unter Anwendung der Methode des Umweltbundesamtes durchgeführt. Die Auswertung umfasst eine Gegenüberstellung sowohl mit fossilem Heizöl EL und FAME⁵⁰ als auch mit den Emissionsminderungsvorgaben der EU-Richtlinie 2009/28/EG.

6.1.3.1 Festlegung des Ziel- und Untersuchungsrahmens

Der Untersuchungsrahmen der Ökobilanz erstreckt sich über das gesamte Produktionssystem vom Anbau des Reststrohs hin zur Bereitstellung von Raumwärme. Wie in Abbildung 6-1 dargestellt umfasst die Systemgrenze zum einen den Anbau (Prozessstufe 1), die Ernte inklusive Ballenpressung und Bereitstellung im Zwischenlager (Prozessstufe 2), den Transport des Reststrohs (Prozessstufe 3) sowie dessen Konversion zu ABE-Produkten (Prozessstufe 4). Zum anderen beinhaltet sie den Transport des Brennstoffes (Prozessstufe 5) und dessen Einsatz in einem Ölbrenner zur Bereitstellung von Raumwärme (Prozessstufe 6).

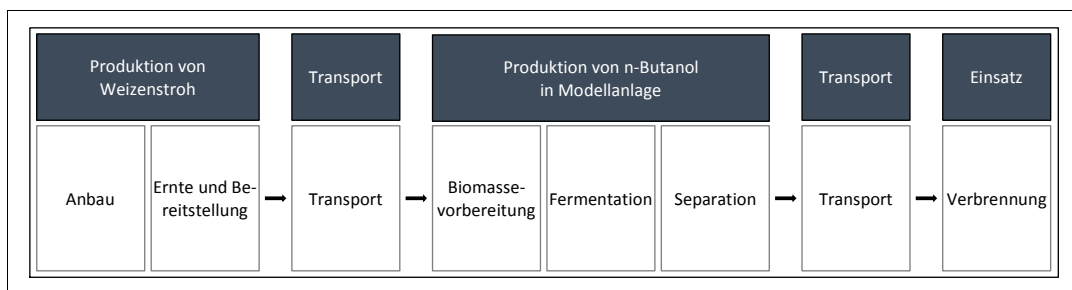


Abbildung 6-1: Prozessstufen in der Produktion von n-Butanol aus Weizenstroh

Als funktionale Einheit für n-Butanol wird das Europäische Standardmaß von einem MJ verwendet (EG, 2009). Durch den Reststoffcharakter des eingesetzten Strohs kommen keine Landnutzungsänderungen zum Tragen. Innerhalb der Systemgrenze kommt es mehrfach zu Kuppelproduktion⁵¹. Bei der Produktion von n-Butanol aus Reststroh fallen die Kuppelprodukte Aceton und Ethanol an. Um eine transparente Darstellung beziehungsweise Zuordnung der Emissionen für jedes Produkt zu gewährleisten, ist der Einsatz eines Allokationsverfahrens notwendig. Die EU-Richtlinie 2009/28/EG sieht für diesen Einsatzzweck die Energieallokationsmethode vor (EG, 2009), die im Folgenden für alle Wirkungskategorien Anwendung findet. Dabei werden alle Emissionen auf das Hauptprodukt und alle

⁵⁰ Fatty Acid Methyl Esther

⁵¹ Reststroh selbst ist nach EU-Richtlinie 2009/28/EG als Kuppelprodukt des Getreideanbaus definiert

Koppelprodukte nach Maßgabe ihres Heizwertes aufgeteilt. Für die Erstellung der Sachbilanz wird auf die Stoff- und Energiestrommodellierung in Kapitel 4 zurückgegriffen.

Für die Wirkungsabschätzung kommt die in Kapitel 6.1.1.1 vorgestellte Methode des Umweltbundesamtes zum Einsatz. Im Hinblick auf das Hauptziel von Biobrennstoffen, die Verringerung der Treibhausgasemissionen pro Energieeinheit, erfolgt eine Abschätzung für die Wirkungskategorien Treibhauseffekt und Ressourcenbeanspruchung. Darüber hinaus wird die Wirkungskategorie Versauerung betrachtet. Die Ergebnisse jeder Wirkungskategorie werden zu Indikatorergebnissen aggregiert. Da die Zielsetzung eine Gegenüberstellung mit fossilem Heizöl EL nach EU-Richtlinie 2009/28/EG vorsieht, wird auf die Priorisierung der Betrachtungskriterien verzichtet und ausschließlich ein Vergleich der Indikatorergebnisse angestellt.

6.1.3.2 Sachbilanz

In Kapitel 6.1.2 wird eine Reihe rechnergestützter Ansätzen vorgestellt. Das Programm GEMIS und die von GEMIS genutzte Datenbank sind öffentlich verfügbar und werden vom Ökoinstitut kontinuierlich verbessert. Insbesondere die Datenbank ist Grundlage einer Vielzahl von Forschungsprojekten und erfährt daher eine stetige Ergänzung. Für das zu untersuchende Produktionssystem kann bereits auf eine Vielzahl relevanter Bilanzen zurückgegriffen werden. Im Hinblick auf die gestellten Anforderungen eignet sich GEMIS daher in besonderer Weise sowohl zur Durchführung der Wirkungsabschätzung als auch zur Quantifizierung von Anbau-, Ernte- und Transportvorgängen in der Sachbilanz.

Zur Erstellung der Sachbilanz greift GEMIS auf in der Datenbank verfügbare Stoff- und Energiebilanzen zurück oder bietet die Möglichkeit, neue Prozesse zu erstellen. Für die Prozessstufen eins bis drei liegen in GEMIS bereits hinterlegte Sachbilanzen vor. Alle dazu notwendigen Angaben können aus den Ausführungen des Kapitels 5 entnommen werden. Für die Modellanlage (Prozessstufe 4) stehen die Ergebnisse der Stoff- und Energiebilanzierung aus Kapitel 4 zur Verfügung, in denen alle Koppelprodukte und Abfallstoffe quantifiziert sind. Für die aufwandsgerechte Zuordnung kommt wie im vorherigen Kapitel erläutert die Energieallokationsmethode zum Einsatz.

N-Butanol ist als Biokomponente in Heizöl EL nicht für den Reineinsatz vorgesehen (siehe Kapitel 3). Die Abbildung von n-Butanol/Heizöl EL-Gemischen in der Ökobilanz ist für einen Vergleich zu anderen flüssigen Brennstoffen jedoch nicht praktikabel. Um eine vollständig transparente Abbildung des Produktionssystems zu gewährleisten, werden alle Aufwände und Emissionen für den Lebenszyklus von reinem n-Butanol erhoben.

6.1.3.3 Wirkungsabschätzung

Die Wirkungsabschätzung besteht aus drei Schritten, wobei zunächst die zu untersuchenden Wirkungskategorien, Wirkungsindikatoren und Charakterisierungsmodelle identifiziert werden. Nachfolgend findet eine Klassifizierung der Sachbilanzergebnisse in den ausgewählten Wirkungsindikatoren statt. Basierend darauf werden die Wirkungsindikatoren berechnet. Wie bereits in der Festlegung des Ziel- und Untersuchungsrahmens definiert, werden die Wirkungskategorien Treibhauspotential, Ressourcenbeanspruchung und Versauerung untersucht.

Treibhauspotential

Das Treibhauspotential der Energiebereitstellung ist in der umweltpolitischen Diskussion die derzeit prominenteste Wirkungskategorie. Die folgende Wirkungsabschätzung erfolgt in Übereinstimmung mit der Methodologie der EU-Richtlinie 2009/28/EG. Diese greift auf die Berechnungsvorschriften des IPCC (2007) zurück. Der vorgesehene Wirkungsindikator sind die CO₂-Äquivalente (CO_{2eq}). Dabei werden die zu berücksichtigten Treibhausgase Kohlenstoffdioxid (CO₂), Distickstoffmonoxid (Lachgas) und Methan in der Gewichtung 1:296:23 berücksichtigt.

Die Richtlinie definiert Reststroh als Ernterückstand und sieht für die kumulierten Lebenszyklus-Treibhausgasemissionen der Ernte bis auf weiteres den Wert null vor. Ein Brennstoff gilt dann als nachhaltig, wenn er gegenüber der fossilen Referenz mit 77 g CO_{2eq} MJ⁻¹ eine Einsparung von mindestens 30 % aufweist. Ab dem Jahr 2017 muss die Einsparung mindestens 50 % betragen, für alle danach in Betrieb gehenden Anlagen mindestens 60 %.

Eine Möglichkeit, die Einsparung an Treibhausgasen in Bezug zu ihrem finanziellen Aufwand zu setzen, besteht in der Abschätzung der CO_{2eq}-Vermeidungskosten (vgl. hierzu: Matthes (1998) und FfE (2009)). Matthes (1998) unterscheidet dabei den volkswirtschaftlichen Ansatz, den gesellschaftlichen Ansatz, den Einzelwirtschaftlichen Ansatz und den Budgetansatz. Im Folgenden werden die CO_{2eq}-Vermeidungskosten (K^{VRMD}) auf Basis des Einzelwirtschaftlichen Ansatzes erhoben, die im Fall der zu untersuchenden Prozesskette auch die Steuern miteinbeziehen. Sie ergeben sich aus dem Quotienten der Emissions- und Marktpreisdifferenz zur fossilen Referenz Heizöl nach folgender Gleichung.

Gleichung 6.1

$$K^{VRMD} = \frac{k_{NBTL} - k_{HEL}}{E_{NBTL} - E_{HEL}}$$

mit:

K^{VRMD}	Vermeidungskosten	€ MJ ⁻¹	k_{NBTL}	Kosten n-Butanol	€ MJ ⁻¹
k_{HEL}	Kosten Heizöl EL	€ MJ ⁻¹	E_{NBTL}	Emissionen n-Butanol	CO _{2eq} MJ ⁻¹
E_{NBTL}	Emissionen Heizöl EL	CO _{2eq} MJ ⁻¹			

Versauerung

Die Emission versauernder Luftschadstoffe führte in Deutschland durch die Versauerung der Böden bereits zur Teilschädigung von Ökosystemen. Darüber hinaus begünstigt sie die Entstehung von Atemwegserkrankungen und kann zu Materialschäden an Bausubstanz führen. Als Wirkungsindikator werden dabei die Schwefeldioxid-Äquivalente (SO₂-Äquivalente) herangezogen. Dazu tragen neben Schwefeldioxid auch andere Verbindungen bei, die in Bezug auf Schwefeldioxid mit folgenden Gewichtungen in die Berechnung eingehen: Stickstoffverbindungen beziehungsweise NO_x (0,67), Flusssäure (1,60) und Salzsäure (0,88).

Dabei haben die Stickstoffverbindungen Ammoniak und Ammonium aus der Landwirtschaft mittlerweile die größte Bedeutung (UBA, 2011). Insbesondere für einen landwirtschaftlich erzeugten Rohstoff wie Reststroh ist eine Betrachtung des Versauerungspotentials sinnvoll. Da Reststroh zurzeit als Reststoff ohne Emissionen betrachtet wird, erfolgt die Untersuchung der Anbauemissionen erst im Rahmen des Fortschrittsszenarios in Kapitel 7.

Ressourcenbeanspruchung

Hinsichtlich der Ressourcenbeanspruchung sind im Sinne des Öko-Institutes (2007) zwei Definitionen gebräuchlich. Der kumulierte Energieaufwand (KEA) stellt den kumulierten Ressourcenaufwand an Primärenergie zur Herstellung, Nutzung und Beseitigung eines Produktes dar. Er erfasst nicht energetisch eingesetzte Produktionsfaktoren wie Baustoffe (Holz, Kunststoffe und weitere) mit ihrem Heizwert und der zur Bereitstellung notwendigen Energie.

Der kumulierte Energieverbrauch (KEV, früher kumulierter Prozessenergieaufwand) stellt ebenfalls den kumulierten Ressourcenaufwand an Primärenergie zur Bereitstellung dar. Er berücksichtigt dabei jedoch nur die energetisch genutzten Produktionsfaktoren und den Energieaufwand zur Bereitstellung der stofflich genutzten. Hintergrund ist die Annahme, dass Baustoffe nach ihrem bestimmungsgemäßen Einsatz für eine energetische Nutzung zur Verfügung stehen. Da diese Voraussetzung für das zu untersuchende Produktionssystem nicht garantiert werden kann, wird zur Abschätzung der Ressourcenbeanspruchung im Folgenden der KEA herangezogen.

Die Durchführung basiert dabei auf dem Vorgehen der VDI-Richtlinie 4600 (2012). Bei der ursprünglichen Berechnung nach VDI-Richtlinie treten die Förderverluste fossiler Energieträger nicht in Erscheinung (Effektivität 100 %). Die Umwandlungseffektivität erneuerbarer Energien wird jedoch mit dem tatsächlichen Wirkungsgrad berücksichtigt. Bei Windkraftanlagen entspricht die Effektivität nach der VDI-Veranschlagung daher etwa 30 % (Öko-Institut, 2007). Dieses Vorgehen kann im zu untersuchenden Produktionssystem zu erheblichen Verzerrungen führen. Entgegen der Vorgabe der VDI-Richtlinie wird daher sowohl die Umwandlungseffektivität fossiler als auch erneuerbarer Energieträger mit 100 % angenommen.

6.1.3.4 Auswertung

Die Auswertung einer Ökobilanz hat die Aufgabe, die ermittelten Ergebnisse darzustellen und diese im Hinblick auf die Zielsetzung zu diskutieren. Die Auswertung erfolgt getrennt für alle drei Wirkungskategorien. Sie dient dazu, Schlussfolgerungen aus den Ergebnissen für das untersuchte System zu ziehen. Dadurch, dass keine Massenauszüge oder ähnliche Informationen zur Abschätzung des Bauaufwandes der Modellanlage vorliegen, kann der Material- und Energieaufwand nicht verlässlich abgeschätzt werden. In der Auswertung werden die Bau-Vorleistungen daher in keiner der untersuchten Wirkungskategorien berücksichtigt.

6.2 Umsetzung der Sachbilanz

In den vorangegangenen Kapiteln wurde das Konzept der Ökobilanz diskutiert und die Vorgehensweise für das zu untersuchende Produktionssystem entwickelt. Wie in Abbildung 6-1 dargestellt, umfasst die Systemgrenze dabei alle sechs Prozessstufen vom Weizen- beziehungsweise Strohanbau über die Konversion zu n-Butanol in der Modellanlage bis hin zum Einsatz in der Ölf Feuerungsanlage. Im Folgenden werden die einzelnen Prozessstufen in GEMIS übertragen.

Basisszenario, Prozessstufe 1: Anbau Stroh beziehungsweise Getreide

In Prozessstufe eins werden in Übereinstimmung mit den Vorgaben der EU-Richtlinie 2009/28/EG weder Energieaufwand noch Emissionen für den Anbau von Stroh berücksichtigt. Alle In- und Outputs der Prozessstufe werden dem Anbau von Weizen zugeordnet, der außerhalb des betrachteten Systems beziehungsweise der Systemgrenze liegt. Der Output der Prozessstufe ist Weizenstroh, das auf dem Feld verteilt vorliegt.

Basisszenario, Prozessstufe 2: Bergung und Bereitstellung von Strohballen

Die zweite Prozessstufe bildet die Strohbergung und -Verarbeitung zu Ballen ab. Der Output der Prozessstufe besteht aus Strohballen inklusive deren Umschlag auf das nachfolgende Transportmittel. Eine Differenzierung zwischen der Lagerung am Feldrand und in einem

Zwischenlager wird nicht getroffen. Die Software GEMIS stellt einen Bergungs- und Bereitstellungsprozess⁵² zur Verfügung, der jedoch den Umschlag nicht umfasst. Dieser wird durch einen pauschalen Faktor von 5 % der eingesetzten Energie abgeschätzt.

Basisszenario, Prozessstufe 3: Transport der Strohballen

Die am Feldrand bereitstehenden Strohballen werden von einem LKW übernommen und zur Modellanlage transportiert. Die durchschnittliche Transportdistanz wurde in Kapitel 5.2.2.3 analysiert und beträgt für die einfache Strecke 106,9 km. Die bereits zuvor herangezogene Studie des deutschen Biomasseforschungszentrums (2012) sieht für den Transport im optimierten Szenario den Einsatz eines Gliederzuges vor. Pro Fahrt transportiert dieser eine Beladung von 33 Strohballen beziehungsweise 11,88 t. Ein geeigneter Transportprozess⁵³ liegt in GEMIS vor und wird entsprechend angepasst.

Basisszenario, Prozessstufe 4: Konversion zu n-Butanol

In der Modellanlage erfolgt der Umschlag der Strohballen in das Zwischenlager. In GEMIS liegt kein Prozess zur Abbildung der Modellanlage vor, weshalb ein neuer Prozess des Typs Vergärung angelegt wird. Für die Darstellung der Stoff- und Energieflüsse wird auf die in Kapitel 4 ermittelten Ergebnisse zurückgegriffen. Für die Bereitstellung von Wasser, Schwefelsäure, Calciumhydroxid, elektrische Energie und Prozesswärme stellt GEMIS geeignete Prozesse⁵⁴ zur Verfügung. Da diese die gesamte Vorkette berücksichtigen, werden neben dem Bedarf an Roh-, Hilfs- und Betriebsstoffen sowie Energie auch Gutschriften mit einbezogen. Beispielsweise entsteht bei der Bereitstellung von Schwefelsäure eine Gutschrift von Prozesswärme, die für weitere Prozesse nutzbar gemacht werden kann. Die bei der Herstellung von n-Butanol anfallenden Koppelprodukte Aceton und Ethanol werden energetisch allokiert. Für die zur weiteren Nutzung vorgesehenen Reststoffe Gips und Strohasche trifft das nicht zu.

Die bei der Verbrennung von Lignin und anderen Bestandteilen entstehenden Emissionen werden auf Basis eines vorliegenden Prozesses auf die Modellanlage übertragen⁵⁵. Zur Abbildung der Kühlung des Rückkühlwassers wird auf Basis von Herstellerangaben ein neuer Prozess⁵⁶ eingeführt. Analog erfolgt die Berücksichtigung der Enzymbereitstellung.

In der Literatur liegen nur wenige vollständige Angaben zu den Emissionen der Enzymproduktion vor. Bezogen auf das Treibhausgaspotential schwanken die Angaben zwischen 2.264 und 8.000 g CO_{2eq} kg⁻¹ Enzyme (MacLean, et al., 2009). Durch den ausgesprochen hohen Energieaufwand zur Bereitstellung von Enzymen kommt der ökologischen Bewertung der Enzymherstellung eine wichtige Rolle im Hinblick auf das Ergebnis der ökologischen Gesamtbetrachtung zu. Im Folgenden wird eine von Nielsen (2009) vorgenommenen Abschätz-

⁵² Eingesetzter Prozess: Xtra-Rest\Strohballen-DE-2010

⁵³ Eingesetzter Prozess: LKW-Diesel->12t-Solo-DE-2010

⁵⁴ Eingesetzte Prozesse: Xtra-generisch\Wasser; Chem-Anorg\Schwefelsäure-2000; Steine-Erden\Kalk-gelöscht-DE-2000; EL-KW-Park-DE-2010; Gas-Kessel-DE-2010

⁵⁵ Eingesetzter Prozess: Lignin-Kessel-WSF-DE-2020

⁵⁶ Eingeführter Prozess: Xtra-Kühlwasser-DE-2010 beruht auf Herstellerangaben von COFELY (2009)

zung zur Enzymherstellung⁵⁷ übernommen. Diese ist mit angenommenen 6.291 g CO_{2eq} kg⁻¹ eher konservativ und wird in einen neuen Prozess⁵⁸ überführt. Output der Prozessstufe ist transportfertiges n-Butanol, das auf das nachfolgende Transportmittel umgeschlagen wird.

Basisszenario, Prozessstufe 5: Transport des n-Butanols

Für den Transport des n-Butanols aus der Modellanlage eignen sich neben dem Straßen-transport auch die Beförderung über das Schienennetz oder Wasserwege. Für das vorliegende System wird angenommen, dass der überwiegende Anteil des n-Butanols haushalt-nah zur Bereitstellung von Raumwärme eingesetzt wird. Der Transport über das Schienennetz oder über Wasserwege spielt daher eine untergeordnete Rolle und wird nicht weiter betrachtet. In GEMIS steht auch für diesen Transport ein entsprechenden Prozess⁵⁹ zur Verfügung.

Basisszenario, Prozessstufe 6: Verbrennung des n-Butanols

In der vorliegenden Arbeit wird n-Butanol als Biokomponente in Heizöl EL, nicht für den Reineinsatz vorgesehen. Wie in der Konzeption der Ökobilanz bereits diskutiert, bietet die Untersuchung von reinem n-Butanol jedoch Vorteile hinsichtlich einer transparenten Darstellung (siehe Kapitel 6.1.3.2). Die Verbrennung wird in GEMIS daher nicht als Gemisch sondern im Reineinsatz abgebildet. Für die Verbrennung von Heizöl stellt GEMIS einen geeigneten Prozess⁶⁰ zur Verfügung. Zur Darstellung des Einsatzes von n-Butanol wird dieser Prozess lediglich bezüglich des Brennstoffes modifiziert.

6.3 Ergebnisse der ökologischen Betrachtung

Im vorliegenden Kapitel werden die Ergebnisse der untersuchten Wirkungskategorien dargestellt und diskutiert. Dabei werden die Indikatorergebnisse des Basisszenarios jeder Kategorie den Referenzen Heizöl EL und FAME gegenübergestellt (siehe Abbildung 6-2). Wie in Kapitel 6.1.3.1 definiert, erfolgt die Auswertung für jede Wirkungskategorie getrennt. Die angegebenen Werte enthalten bereits die Gutschrift durch die Kuppelproduktion von Aceton und Ethanol sowie den Überschuss an elektrischer Energie.

⁵⁷ Betrachtete Enzyme Celluclast 1.5 L und Novozyme 188. Es wird angenommen, dass die Angaben auch für die Bereitstellung von Viscostar gelten

⁵⁸ Eingeführter Prozess: Xtra-Rest\Cellulase-DE-2010

⁵⁹ Eingesetzter Prozess: LKW-Diesel-DE-2010

⁶⁰ Eingesetzter Prozess: Öl-Heizung-DE-2010 (Endenergie)

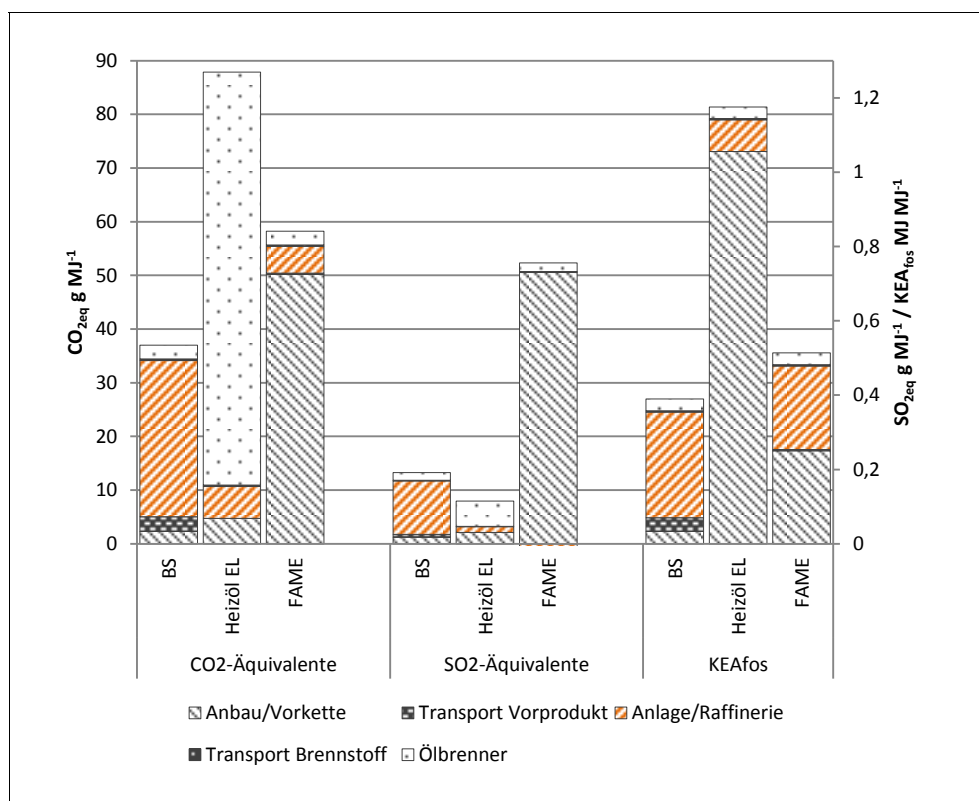


Abbildung 6-2: Ergebnisse der Nachhaltigkeitsuntersuchung des Basisszenarios (BS) und der Referenzen Heizöl EL und FAME (etwaige Gutschriften sind Bestandteil der Einzelsummen)

Indikatorergebnisse der Wirkungskategorie Treibhausgasemissionen

Das Basisszenario weist CO₂eq-Emissionen in Höhe von 37,0 g CO₂eq MJ⁻¹ auf und liegt damit deutlich unterhalb der Emissionen von FAME in Höhe von 58,2 g CO₂eq MJ⁻¹. Beide Werte enthalten bereits Gutschriften aus der Produktion der Kuppelprodukte Aceton, Ethanol sowie elektrischer Energie. Ohne diese würden sich die Treibhausgasemissionen auf 56,06 g MJ⁻¹ CO₂eq belaufen. Die absolute Einsparung gegenüber der Referenz Heizöl EL beträgt mit 87,9 g CO₂eq MJ⁻¹ insgesamt 50,9 g CO₂eq MJ⁻¹ (60 %).

Für die Berechnung der CO₂-Minderungen eines Brennstoffs sieht die EU-Richtlinie 2009/28/EG jedoch einen von der oben berechneten Referenz für Heizöl EL abweichenden Betrag in Höhe von 77 g CO₂eq MJ⁻¹ vor. Die unterschiedlichen Referenzwerte lassen sich auf unterschiedliche Annahmen und Gewichtungen zurückführen. Gemäß EU-Richtlinie 2009/28/EG ist ein Brennstoff in Bezug auf seine Treibhausgasemissionen dann nachhaltig, wenn er eine Mindesteinsparung gegenüber dem Referenzwert von aktuell 35 % und bis zum Jahr 2017 von 50 % aufweist. Bezogen auf die Referenz von 77 g CO₂eq MJ⁻¹ beträgt die Einsparung des Einsatzes von n-Butanol im Basisszenario annähernd 52 %.

Der Einsatz von n-Butanol übersteigt damit beide Mindestanforderungen und ist somit auch im Sinne der EU-weiten Gesetzgebung als nachhaltiger Brennstoff einzustufen. Die Herstellung von n-Butanol im Basisszenario und dessen Einsatz im Raumwärmemarkt ist daher in hohem Maße dazu geeignet, zur Verringerung der Treibhausgasemissionen beizutragen.

Die Treibhausgasemissionen lassen sich hinsichtlich ihrer verursachenden Prozessstufen weiter differenzieren. Die durch den Transport des Reststrohs verursachten Emissionen sind mit $1,9 \text{ g CO}_{2\text{eq}} \text{ MJ}^{-1}$ im Gegensatz zu den Emissionen der Modellanlage eher gering. Abbildung 6-2 zeigt deutlich, dass der Betrieb der Modellanlage den weitaus größten Beitrag (87,2 %) zu den Gesamtemissionen des Basisszenarios liefert. Er beträgt damit ein Vielfaches der Anlagen zur Herstellung von Heizöl EL (6,8 %) und FAME (8,6 %).

Die Treibhausgasemissionen aus dem Transport des fertigen Produktes und dessen Einsatz im Ölbrenner sind im Basisszenario eher gering. Sie weisen mit $2,8 \text{ g CO}_{2\text{eq}} \text{ MJ}^{-1}$ die gleiche Höhe auf wie die Emissionen aus dem Transport und der Verbrennung von FAME. Während bei der Verbrennung von Heizöl EL $76,9 \text{ g CO}_{2\text{eq}} \text{ MJ}^{-1}$ frei werden, sind die Treibhausgasemissionen der erneuerbaren Brennstoffe der Atmosphäre in gleicher Höhe zuvor entzogen worden und werden daher bei der Verbrennung nicht berücksichtigt.

Vor dem Hintergrund, dass Stroh als Reststoff eingestuft wird und daher keine Anbauemissionen berücksichtigt werden (siehe Kapitel 6.2), ist die Höhe der absoluten Einsparung jedoch als nicht optimal zu bewerten. Würden die gleichen Emissionen für den Anbau der Biomasse anfallen wie bei Biodiesel ($50,2 \text{ g CO}_{2\text{eq}} \text{ MJ}^{-1}$), wäre keine Einsparung gegenüber der Heizölreferenz zu verzeichnen.

Darüber hinaus zeigt eine detailliertere Analyse der Treibhausgasemissionen der Modellanlage, dass auf den Einsatz von Enzymen vor allen anderen Produktionsfaktoren mit $30,15 \text{ g CO}_{2\text{eq}} \text{ MJ}^{-1}$ der weitaus größte Anteil entfällt. Es ist daher sinnvoll, eine Überprüfung auch mit Einbeziehung der Anbauemissionen durchzuführen und insbesondere den Enzyemeinsatz zu verringern (siehe Kapitel 7).

Zur Ermittlung der $\text{CO}_{2\text{eq}}$ -Vermeidungskosten wird im Folgenden auf den errechneten Referenzwert von $87,9 \text{ g CO}_{2\text{eq}} \text{ MJ}^{-1}$ zurückgegriffen. Auf diese Weise ist sichergestellt, dass alle Angaben transparent nachvollzogen werden können und der gleiche Berechnungsansatz zum Tragen kommt. Wie oben angegeben, beträgt die Verminderung damit $50,9 \text{ g CO}_{2\text{eq}} \text{ MJ}^{-1}$. Nach Gleichung 6.1 sind darüber hinaus noch die Mehrkosten des Einsatzes heranzuziehen. Die in Kapitel 5 ermittelten Produktionskosten für n-Butanol betragen $1,21 \text{ € L}^{-1}$ beziehungsweise $0,045 \text{ € MJ}^{-1}$. Diese beinhalten bereits den Unternehmergewinn des Anlagenbetreibers.

Alkohole, die aus lignocellulosebasierten Rohstoffen hergestellt werden, genießen bis Ende 2015 eine Befreiung von der Energiesteuer (EnergieStG, 2012). Unter Berücksichtigung der Mehrwertsteuer in Höhe von 19 %, beträgt der Marktpreis von n-Butanol demnach $0,054 \text{ € MJ}^{-1}$. Der Heizölpreis beträgt inklusive Energie- und Mehrwertsteuer $0,92 \text{ € L}^{-1}$ beziehungsweise $0,026^{61} \text{ € MJ}^{-1}$. Nach Gleichung 6.1 ergeben sich die $\text{CO}_{2\text{eq}}$ -Vermeidungskosten damit zu $527 \text{ € t}^{-1} \text{ CO}_{2\text{eq}}$. Unter Berücksichtigung der Energiesteuer für Heizöl EL betragen die $\text{CO}_{2\text{eq}}$ -Vermeidungskosten $587 \text{ € t}^{-1} \text{ CO}_{2\text{eq}}$.

⁶¹ Mittelwert 10/2012: $0,923 \text{ € L}^{-1}$ inkl. Energie- und Mehrwertsteuer (MWV, 2012); Dichte $0,84 \text{ kg L}^{-1}$; Heizwert 42 MJ kg^{-1}

Im Vergleich dazu wird FAME zu etwa $0,96 \text{ L}^{-1}$ beziehungsweise $0,029^{62} \text{ € MJ}^{-1}$ gehandelt. Die $\text{CO}_{2\text{eq}}$ -Vermeidungskosten für den Einsatz von FAME betragen damit nur $101 \text{ € t}^{-1} \text{ CO}_{2\text{eq}}$. Es zeigt sich deutlich, dass die Herstellung und der Einsatz von n-Butanol im Basisszenario zwar die Treibhausgasemissionen verringert, jedoch aufgrund der hohen Kosten keine optimale Alternative zum Einsatz von Heizöl EL bietet. Um die $\text{CO}_{2\text{eq}}$ -Vermeidungskosten wirksam zu verringern, sollte daher darauf abgezielt werden, sowohl die Kosten zur Herstellung von n-Butanol zu senken als auch die Einsparung an Treibhausgasemission weiter zu erhöhen (siehe Kapitel 7).

Indikatorergebnisse der Wirkungskategorie Versauerung

Die Versauerung durch den Betrieb der Modellanlage im Basisszenario und den Einsatz von n-Butanol im Raumwärmemarkt beläuft sich auf $0,19 \text{ g SO}_{2\text{eq}} \text{ MJ}^{-1}$. Das Basisszenario verursacht damit etwa 66 % höhere Emissionen als der Einsatz von Heizöl EL ($0,12 \text{ g SO}_{2\text{eq}} \text{ MJ}^{-1}$), jedoch nur etwa 26 % der Emissionen des Einsatzes von FAME ($0,74 \text{ g SO}_{2\text{eq}} \text{ MJ}^{-1}$). Auch wenn durch den Ersatz von Heizöl EL durch n-Butanol mehr SO_2 -Äquivalente emittiert werden, resultiert der Einsatz von n-Butanol gegenüber FAME in einer geringeren Versauerung.

Bezüglich der Entstehungsorte der Emissionen ergeben sich große Unterschiede in den Prozessketten von n-Butanol und FAME. Während der Anbau von Stroh im Basisszenario aufgrund der Charakterisierung als Reststoff nicht berücksichtigt wird (siehe Kapitel 6.2), stellt die Bereitstellung der Grundstoffe der FAME-Produktion mit $0,73 \text{ g SO}_{2\text{eq}} \text{ MJ}^{-1}$ den weitaus größten Anteil der Emissionen des Lebenszyklus dar. Verantwortlich dafür sind die SO_2 -Äquivalente, die beim Anbau insbesondere durch die Freisetzung der Stickstoffverbindungen Ammoniak und Ammonium frei werden (siehe Kapitel 6.1.3.3).

Hingegen weist die Produktion von FAME durch die Berücksichtigung des Kuppelproduktes Glycerin mit $-0,01 \text{ g SO}_{2\text{eq}} \text{ MJ}^{-1}$ sogar eine minimal positive Bilanz auf. Im Gegensatz dazu emittiert der Betrieb der Modellanlage zur Herstellung von n-Butanol $0,16 \text{ g SO}_{2\text{eq}} \text{ MJ}^{-1}$ und ist damit für 86 % der Emissionen der gesamten Prozesskette verantwortlich. Würden die gleichen Emissionen bei der Bereitstellung von Reststroh anfallen wie in der Bereitstellung von Pflanzenöl für die Produktion von FAME, lägen die Emissionen an SO_2 -Äquivalenten 24 % über denen von FAME und bedeuteten eine Verschlechterung der vorhandenen Alternative zu Heizöl EL. Eine Überprüfung der Anbauemissionen ist daher Gegenstand des Kapitels 7.

Im Vergleich zu den erneuerbaren Brennstoffen fallen im Lebenszyklus von Heizöl EL damit insgesamt deutlich weniger $\text{SO}_{2\text{eq}}$ -Emissionen an. Inklusive der Vorkette verursacht die Bereitstellung von Heizöl EL insgesamt nur $0,05 \text{ g SO}_{2\text{eq}} \text{ MJ}^{-1}$. Den höchsten Beitrag zur Versauerung durch den Einsatz von Heizöl EL leistet mit 59 % die Verbrennung im Ölbrenner ($0,07 \text{ g SO}_{2\text{eq}} \text{ MJ}^{-1}$). Durch die Schwefelfreiheit weisen sowohl der Einsatz von n-Butanol als auch FAME in dieser Prozessstufe deutlich geringere Emissionen in Höhe von etwa 30 und 35 % auf.

⁶² Mittelwert 10/2012: $1,37 \text{ € L}^{-1}$ inkl. Energiesteuer (Diesel) von $0,422 \text{ € L}^{-1}$ und Mehrwertsteuer (UFOP, 2012); $0,96 \text{ € L}^{-1}$ inkl. Energiesteuer (Heizöl EL) von $0,076 \text{ € L}^{-1}$ und Mehrwertsteuer; Dichte $0,879 \text{ kg L}^{-1}$; Heizwert $37,2 \text{ MJ kg}^{-1}$

Wie auch in der Wirkungskategorie Treibhauspotential ist im Basisszenario die Modellanlage mit großem Abstand (86 %) vor den anderen Prozessstufen für die Emissionen von SO_2 -Äquivalenten verantwortlich. Der Einsatz von Schwefelsäure verursacht dabei mit $0,04 \text{ g SO}_{2\text{eq}} \text{ MJ}^{-1}$ bzw. 22 % einen großen Anteil, der jedoch von Enzymen mit $0,11 \text{ g SO}_{2\text{eq}} \text{ MJ}^{-1}$ bzw. 55 % übertroffen wird. Der Transport der Rohstoffe trägt hingegen nur zu 3 % der Emissionen bei. Neben der Überprüfung der Anbauemissionen sollte daher eine Reduktion des Einsatzes von Enzymen und Schwefelsäure angestrebt werden (siehe Kapitel 7).

Indikatorergebnisse der Wirkungskategorie Ressourcenbeanspruchung

Der fossile kumulierte Energieaufwand, der durch das Basisszenario hervorgerufen wird weist eine Höhe von $0,39 \text{ MJ MJ}^{-1}$ auf. Er beträgt damit nur etwa 33 % des Aufwandes von Heizöl EL mit $1,18 \text{ g MJ}^{-1}$ und etwa 76 % des Aufwandes des Lebenszyklus von FAME ($0,51 \text{ MJ MJ}^{-1}$). Der Einsatz von n-Butanol ist daher prinzipiell dazu geeignet, den kumulierten Energieaufwand sowohl in Bezug auf die fossile Referenz Heizöl EL als auch die erneuerbare Alternative FAME zu verringern. Während der Energieaufwand zur Bereitstellung von Reststroh nicht berücksichtigt wird, verursacht die Bereitstellung der Rohstoffe der FAME-Produktion ($0,25 \text{ MJ MJ}^{-1}$) durch Anbau, Ernte und Pressung 49 % des Gesamtaufwandes. Würden die gleichen Emissionen für den Anbau und die Ernte von Reststroh im Basisszenario anfallen, wäre der kumulierte Energieaufwand des Basisszenarios höher als der von FAME (25 %), jedoch geringer als der von Heizöl EL (54 %).

In der Betrachtung der Vorkette von Heizöl EL lässt sich anhand des Energieaufwandes von $1,05 \text{ MJ MJ}^{-1}$ die fossile Herkunft deutlich erkennen. Der Transport der Rohstoffe für die Herstellung von FAME und n-Butanol hat mit jeweils 6 % hingegen eine eher geringe Bedeutung. Mit einer Beteiligung von 84 % trägt die Modellanlage zur Herstellung von n-Butanol ($0,33 \text{ MJ MJ}^{-1}$) wie auch in den beiden bereits untersuchten Wirkungskategorie maßgeblich bei. Auch in der Wirkungskategorie der Ressourcenbeanspruchung sind die Enzyme zur Produktion von n-Butanol mit $0,32 \text{ MJ MJ}^{-1}$ beziehungsweise 81 % der Modellanlage verantwortlich. Für die Produktion von FAME ist ebenfalls ein hoher Aufwand von $0,23 \text{ MJ MJ}^{-1}$ notwendig. Im Gegensatz dazu ist der fossile Aufwand zur Produktion Heizöl EL mit $0,09 \text{ MJ MJ}^{-1}$ gering.

Zusammenfassung der Ergebnisse

Die Untersuchung der Ergebnisse der verschiedenen Wirkungskategorien zeigt, dass die Herstellung und der Einsatz von n-Butanol im Basisszenario dazu geeignet sind, die Emissionen an CO_2 -Äquivalenten und die Ressourcenbeanspruchung sowohl in Bezug auf die Referenz Heizöl EL als auch FAME zu verringern. Im Vergleich zu Heizöl EL weisen die CO_2 -Verminderungskosten eine Höhe von 527 € t^{-1} auf.

Hingegen verringert sich die Emission an SO_2 -Äquivalenten zwar hinsichtlich FAME deutlich, jedoch übersteigen sie die von Heizöl EL. Zwar liegen die CO_2 -Verminderungskosten von FAME mit einer Höhe von 101 € t^{-1} deutlich unter denen des Basisszenarios. Jedoch übertreffen die Emissionen von FAME die des Basisszenarios in allen untersuchten Wirkungskategorien bei weitem.

Im Gegensatz zur Prozesskette von FAME wurde im Basisszenario festgestellt, dass der Betrieb der Modellanlage über alle Wirkungskategorien den weitaus größten Einfluss auf die Emissionen bzw. den Energieaufwand aufweist. Als Hauptverursacher wurde insbesondere der Einsatz von Enzymen, Schwefelsäure und elektrischer Energie identifiziert. Eine mögliche Reduzierung des Einsatzes ist Gegenstand von Kapitel 7.

Am Beispiel von FAME wurde verdeutlicht, dass der Anbau der Biomasse hohen Einfluss auf die ökologische Nachhaltigkeit haben kann. Wie beschrieben wird Reststroh in der Europäischen Union zurzeit als Rest- beziehungsweise Abfallstoff deklariert. Alle Emissionen, die während des Anbaus anfallen, werden bislang vollständig der Produktion von Weizen angerechnet (EG, 2009).

Die deutsche Bundesregierung kündigte an, vermehrt Reststoffe aus der Landwirtschaft zur Bereitstellung von Bioenergie zur fördern (Bundesregierung, 2011). Darüber hinaus geht ab dem Jahr 2013 die erste großtechnische Strohfeuerung in Betrieb (Otto, 2012). Es kann daher eine zukünftig verstärkte Nutzung von Reststroh erwartet werden. In diesem Fall ist davon auszugehen, dass die alleinige Allokation auf das Hauptprodukt Weizen den realen Einfluss des Anbaus auf die nachfolgende Prozesskette nicht mehr aufwandsgerecht wiedergibt. Wenn der Reststoffcharakter von Weizenstroh nicht mehr aufrechterhalten werden kann, ist daher langfristig einer potentiellen Korrektur entgegenzusehen. Diese wird in Kapitel 7 in Form des Fortschrittsszenarios inklusive Anbauaufwand untersucht.

7 Analyse, Bewertung und Umsetzung der Modellergebnisse

Ziel des Kapitels ist die Identifikation und Auswertung eines technologischen Fortschrittsszenarios. Dazu werden die in den Ergebnissen der Kapitel 4, 5 und 6 identifizierten größten Hebel zur Verringerung der Kosten und der Steigerung der ökologischen Nachhaltigkeit herangezogen und detailliert analysiert. Die aufgedeckten Potentiale werden mit Hilfe des entwickelten Modells auf ihre Wirtschaftlichkeit und ökologische Nachhaltigkeit überprüft und anhand einer Szenarioanalyse mit den Ergebnissen des Basisszenarios gegenübergestellt.

7.1 Analyse und Bewertung des Basisszenarios

7.1.1 Wirtschaftlichkeitsbetrachtung

Der Betrieb der Modellanlage ist in der Konfiguration des Basisszenarios nicht wirtschaftlich. Unter Berücksichtigung der Unternehmervergewinne des Anlagenbauers (etwa 4,4 % des Fixed Capital Investments) und des Anlagenbetreibers (9,1 % a^{-1} des investierten Eigenkapitalanteils) betragen die Kosten zur Herstellung von n-Butanol im Basisszenario 1,21 € L^{-1} . Bei einem Verkaufspreis von 1.110 € t^{-1} beziehungsweise 0,90 € L^{-1} entspricht das einem Fehlbetrag von 0,31 € L^{-1} .

Kurz- und mittelfristig kann jedoch nicht mit einem Anstieg des Produktpreises gerechnet werden. Im Hinblick auf die Wettbewerbsfähigkeit von n-Butanol als Brennstoff ist es daher das Ziel, einen wirtschaftlichen Betrieb mit Produktionskosten von 0,90 € L^{-1} zu erreichen. Vor diesem Hintergrund werden im Folgenden die größten Einflüsse auf den Produktpreis quantifiziert. Das Ergebnis ist Grundlage für die Umsetzung der Stoff- und Energieströme des Fortschrittsszenarios in Kapitel 7.2.1.

Die Zusammensetzung der Kosten (siehe Abbildung 5-8) zeigt, dass Weizenstroh (0,28 € L^{-1}) und dessen Transport (0,14 € L^{-1}) zu etwa 35 % zum Gesamtaufwand beitragen. Die höchste Einzelkostenposition entfällt auf den Enzymeinsatz mit 0,29 € L^{-1} und 24 % Anteil. Darüber hinaus nimmt die Annuität mit 0,21 € L^{-1} (17 %) eine wesentlich Kostenposition ein.

Für die Bereitstellung elektrischer Energie fallen zwar keine externen Kosten an, jedoch entsteht ein erheblicher Aufwand innerhalb der Modellanlage. Berücksichtigt man die Kosten des Turbogenerators vollständig und den auf die Energieerzeugung entfallenden Anteil des Dampfkessels mit 82 %, lassen sich die Kosten zur Bereitstellung von elektrischer Ener-

gie mit etwa $0,13^{63} \text{ € L}^{-1}$ beziehungsweise 11 % angeben. Während der Enzymbedarf der Modellanlage eindeutig zuzuordnen ist, wird elektrische Energie in fast allen Prozessen benötigt. Der Bedarf ist ausgehend von den Ergebnisse der Energiestrommodellierung nachvollziehbar (siehe Kapitel 4.3).

Die Hauptverbraucher an elektrischer Energie sind die Gebläse der Fermentation (62 %), der Verdampfer der Wasseraufbereitung (23 %) und die Rekondensation der Fermentation (7 %). Sie weisen mit insgesamt 92 % den weitaus größten Bedarf der Modellanlage auf und werden in der Umsetzung auf eine Optimierung untersucht. Darüber hinaus tragen die Instandhaltung mit $0,09 \text{ € L}^{-1}$ (7 %) und Chemikalien mit $0,06 \text{ € L}^{-1}$ beziehungsweise 5 % zu den Kosten bei. Auf alle weiteren Kostenarten (Steuern, Versicherung und weitere) entfallen gemeinsam 12 % der Gesamtkosten.

Unabhängig vom spezifischen Bedarf an Roh-, Hilfs- und Betriebsstoffen kann eine Verringerung der Produktionskosten durch die Erhöhung der Kapazität der Modellanlage erzielt werden (siehe Kapitel 5.2.4). Die Kosten erreichen bei einer Kapazität 340.000 t a^{-1} ihr relatives Minimum und einen Produktionspreis von $1,13 \text{ € L}^{-1}$. Darüber hinaus bietet die Reduzierung der Baugrößen bei gleichbleibender Kapazität ein erhebliches Einsparungspotential. Die Erhöhung des Biomasse/Wasser-Verhältnisses durch die Verringerung der Wasserzugabe von 50 % würde die Produktionskosten auf $1,11 \text{ € L}^{-1}$ verringern. Andere Einflüsse, wie Preisvorteile durch die Verhandlung von Nachlässen bei der Beschaffung von Anlagenkomponenten, Dienstleistungen und Verbrauchsgütern, werden im Folgenden nicht betrachtet.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass die größten Hebel zur Erhöhung der Wettbewerbsfähigkeit von n-Butanol als Brennstoff in der Verringerung der Transportstrecke, des Enzymbedarfs und des Bedarfs an elektrischer Energie, insbesondere der Gebläse der Fermentation und der Verdampfer der Wasseraufbereitung, bestehen. Darüber hinaus ergeben sich Vorteile durch die Erhöhung der Kapazität und der Verringerung des Biomasse/Wasser-Verhältnisses.

7.1.2 Ökologische Betrachtung

Kapitel 6.3 zeigt deutlich, dass die Emissionen und der Ressourcenverbrauch des Einsatzes von n-Butanol im Basisszenario in allen Wirkungskategorien maßgeblich durch die Modellanlage bestimmt werden. Während die Wirkungskategorien Treibhausemissionen und Ressourcenbeanspruchung bereits deutlich geringer als die der Referenz Heizöl EL sind, übersteigen die Emissionen an SO_2 -Äquivalenten die von Heizöl EL um 67 %.

Das Ziel des Fortschrittsszenarios in Bezug auf die Verbesserung der ökologischen Nachhaltigkeit ist es daher, die Emissionen von SO_2 -Äquivalenten auf den Wert von Heizöl EL mit $0,12 \text{ g SO}_{2\text{eq}} \text{ MJ}^{-1}$ zu begrenzen und sowohl die Treibhausgasemissionen als auch die Res-

⁶³ Turbogenerator und Verdampfer (anteilig) tragen mit etwa 25 % zu allen vom Fixed Capital Investment abgeleiteten Kosten bei

sourcesbeanspruchung weiter zu verringern. Im Folgenden werden daher die größten Hebel zur Erreichung dieses Ziels quantifiziert.

Von allen Hilfs- und Betriebsstoffen weisen Enzyme in den Wirkungskategorien Treibhausgasemissionen, Versauerung und Ressourcenbeanspruchung mit 94, 55 und 81 % den jeweils größten Einfluss auf. Dieser hohe Wert ist auf die energieaufwendige Bereitstellung der erhältlichen Enzyme zurückzuführen (vgl. hierzu: MacLean et al. (2009); Nielsen (2009)). Eine Verringerung des Enzymeinsatzes würde sich daher insbesondere mindernd auf die Emission von Treibhausgasen und die Ressourcenbeanspruchung auswirken. Die Wirkungskategorie der Versauerung würde davon zwar profitieren. Jedoch wäre eine Verringerung des Enzymeinsatzes von beispielsweise 50 % allein nicht ausreichend, um die Emissionen von Heizöl EL zu unterschreiten.

Kapitel 6.3 zeigt weiterhin, dass darüber hinaus der Einsatz von Schwefelsäure zu 22 % zur Versauerung durch den Betrieb der Modellanlage beiträgt. Eine Verringerung des Einsatzes um 50 % würde daher zu einer Reduktion der Versauerung von 11 % führen. Darüber hinaus ist mit der Verringerung des Schwefelsäureeinsatzes ebenfalls die Verringerung des Einsatzes von Calciumhydroxid möglich. Diese wirkt sich mit zusätzlichen 3 % auf das Ergebnis aus.

Neben der Verringerung des Materialeinsatzes besteht Optimierungspotential durch die Einsparung elektrischer Energie. Eine Verringerung um 50 % würde zu einer Reduktion der SO₂-Äquivalente von 10 % führen. Wie in Kapitel 6.3 bereits erwähnt, könnte die Berücksichtigung der Anbauemissionen von Stroh als Kuppelprodukt zu Weizen zu erheblichen Emissionen führen. Sie wird daher als Modifikation des Fortschrittsszenarios in einem eigenen Szenario erfasst.

Zusammenfassend bestehen die größten Hebel zur Verringerung der SO_{2eq}-Emissionen in der Reduzierung des Einsatzes von Enzymen und Schwefelsäure sowie elektrischer Energie. Durch die damit verbundene Senkung der Kosten konkurrieren diese Maßnahmen nicht mit den oben identifizierten der wirtschaftlichen Optimierung.

7.2 Umsetzung des Fortschrittsszenarios

7.2.1 Umsetzung von Stoff- und Energieflüssen sowie Zahlungsströmen

Ziel dieses Kapitels ist die Überprüfung und Umsetzung der in Kapitel 7.1 identifizierten Hebel zur Verringerung des Produktionspreises von n-Butanol. Die Umsetzung erfolgt in Form des Fortschrittsszenarios, das im Gegensatz zum Basisszenario nicht ausschließlich auf der Übertragung großtechnisch umsetzbarer experimenteller Ergebnisse basiert. Es umfasst daher Technologien, die bislang keine Umsetzungsreife aufweisen, deren Realisierung im Zeitraum der nächsten 10 Jahren jedoch wahrscheinlich ist (siehe Kapitel 2.4).

Da der Fokus der Betrachtung auf den möglichen Einsparungen liegt, wird auf die detaillierte technische Beschreibung der einzelnen Prozessstufen des Fortschrittsszenarios verzichtet. Im Folgenden werden die einzelnen Hebel auf ihre Umsetzbarkeit hin überprüft. Die Identifizierung der optimalen Kapazität der Modellanlage bedarf der vollständigen Definition aller Eingangsdaten und kann nicht ex ante durchgeführt werden. Sie ist daher Gegenstand der Auswertung in Kapitel 7.3.

Enzyme

Für die Verminderung des Enzymbedarfs eignet sich neben der Senkung der Enzymkonzentration das Recycling von Enzymen. Zwar liegen Anhaltspunkte dafür vor, dass auch geringere Enzymkonzentrationen als die im Basisszenario eingesetzten zu einem wirksamen Aufschluss führen. Jedoch variiert die Strohzusammensetzung und die damit notwendige Enzymmenge und Zusammenstellung innerhalb der gleichen Sorte stark mit dem Anbaustandort (vgl. hierzu: Lindedam et al. (2010)). Da dieser Umstand in der vorliegenden Arbeit nicht mit der notwendigen Tiefe betrachtet werden kann, wird die Verringerung des Enzymeinsatzes nicht untersucht. Als geeignete Technologie wird im Folgenden daher auf die Möglichkeit des Enzymrecyclings herangezogen.

Filtrationsverfahren eignen sich aufgrund des hohen Partikelgehaltes von Weizenstrohhydrolysaten nur eingeschränkt zur Rückgewinnung von Enzymen (vgl. hierzu: Steele et al. (2005)). Darüber hinaus wird ein Teil der Enzyme durch das freie Lignin adsorbiert und steht daher nicht mehr für ein Recycling zur Verfügung (Tu, et al., 2007).

Für den vorliegenden Einsatz eignen sich insbesondere Immobilisierungsverfahren (vgl. hierzu: Mandali et al. (2010); Tu et al. (2006)). Dabei werden die Enzyme auf Trägersubstanzen wie Glas oder Kunstharze immobilisiert und können über einfache Trennverfahren separiert werden. Für die Abschätzung der notwendigen Enzymkonzentration muss davon ausgegangen werden, dass nur ein Teil der Enzyme recycelt werden kann. Zum einen wird die Enzymaktivität bei jeder Nutzung durch den teilweisen Verschluss der Trägerkörperoberfläche geringer. Dies kann durch die Ausbildung eines Biofilms oder durch Abrasion während der Separation beziehungsweise Reinigung geschehen. Zum anderen kommt es zu einer irreversiblen Hemmung eines Teils der Enzyme.

Im Folgenden wird angenommen, dass der Enzymverlust durch beide Effekte pro Einsatz 40 % beträgt. Der Enzymbedarf der Modellanlage ($f_{ENZY}^{FS FRMT}$) verringert sich dadurch auf $0,0037 \text{ t t}^{-1}$. Die Mehrkosten durch die Immobilisierung der Enzyme werden auf 10 % geschätzt. Die zur Umsetzung des Verfahrens notwendige Modifikation der Fermenter sowie die anschließende zentrale Filtrationsstufe werden im folgenden Abschnitt erfasst.

Fermenter

Der größte in Kapitel 7.1 genannte Verbraucher elektrischer Energie, das Gebläse der Fermentation, ist direkt abhängig von der Menge der produzierten ABE-Produkte. Eine Verrin-

gerung des Bedarfs an elektrischer Energie ist mit der vorliegenden Technologie daher nicht möglich.

Im Folgenden wird deshalb eine alternative Technologie zur in-situ-Entfernung der Fermentationsprodukte, die Pervaporation, eingesetzt (siehe Kapitel 2.4.3). Pervaporation bezeichnet die Diffusion aus einer flüssigen Phase durch eine Membran in eine gasförmige Phase (Melin, et al., 2007). Dabei wird die Fermentationsbrühe in-situ an einer Membran beziehungsweise einem Membranmodul entlang geführt. Das gasförmige Permeat wird durch ein Trägergas abgeführt und rekondensiert. Dieser ebenfalls in der Gas-Stripping-Technologie eingesetzte und energieaufwändige Prozessschritt entfällt daher nicht.

Die Funktionalität der Pervaporation für die Fermentation mit *Clostridium beijerinckii* wurde im Versuch bereits erfolgreich nachgewiesen (Qureshi, et al., 1999; Qureshi, et al., 2008b). Es wird jedoch in einigen Experimenten von einer Einschränkung der Membranfunktionalität durch Verschmutzung (*Fouling*) berichtet (Wu, et al., 2012; Qureshi, et al., 2008c). Wie Wu et al. berichten, besteht jedoch die Möglichkeit einer Reinigung während des Betriebs.

Im Folgenden wird daher angenommen, dass die bestehenden technischen Hindernisse der großtechnischen Realisierung überwunden werden können. Bedingt durch die Verringerung des Energiebedarfes des Gebläses kann eine Verminderung des Bedarfs an elektrischer Energie um etwa 36,9 % gegenüber dem Gas-Stripping-Prozess angenommen werden (Qureshi, et al., 2005). Durch dessen Substitution besteht jedoch die Notwendigkeit eines Rührwerks. Zwar ist auch für die Pervaporation ein Gebläse zur Umwälzung des Trägergases notwendig, jedoch in deutlich geringerer Kapazität. Darüber hinaus besteht ein nicht unwesentlicher Aufwand durch die Bereitstellung der Membranmodule. Die Mehrkosten der gesamten Fermentation einschließlich des Enzymrecyclings werden daher auf 15 % geschätzt.

Verdampfer, Biomasse/Wasser-Verhältnis und Schwefelsäure

Der Verdampfer ist mit 23 % Anteil zweitgrößter Verbraucher an elektrischer Energie. Sein Energiebedarf hängt von der Menge des zu recycelnden Wassers ab. Diese wird direkt durch das Biomasse/Wasser-Verhältnis ($f_{BIO/WAS}^{VRBR}$) beeinflusst. Eine Erhöhung des Biomasse/Wasser-Verhältnisses führt daher zu einer Verringerung des Bedarfs an elektrischer Energie. Zum anderen reduziert sie das Volumen der eingesetzten Apparate und Maschinen und vermindert so Investitionskosten der Apparate und Maschinen.

Wie in Kapitel 4.2.2 diskutiert, setzt eine Erhöhung des Biomasse/Wasser-Verhältnisses jedoch den Umgang mit einer deutlich erhöhten Viskosität und die wirksame Entgiftung der Maische voraus. Wie auch in der Diskussion zum Basisszenario liegen keine spezifischen Literaturangaben für den großtechnischen Einsatz vor. Im Folgenden wird angenommen, dass eine Erhöhung des Biomasse/Wasser-Verhältnisses im Fortschrittsszenarios ($f_{BIO/WAS}^{FS VRBR}$) um ein Drittel auf 20 % (m/m) möglich ist, wenn eine entsprechende Entgiftung eingesetzt wird (vgl. hierzu: Cho et al. (2009), Purwadi et al. (2004), Jurardo et al. (2009)).

Die Entgiftung findet durch sogenanntes Overliming statt (Purwadi, et al., 2004). Dabei wird der Strohsuspension nach dem thermischen Schwefelsäureaufschluss Calciumhydroxid hinzugegeben und nach 90 Minuten bei 30 °C in einem Neutralisationsbehälter mit Schwefelsäure neutralisiert. Die ausgefällten Inhibitoren werden in der Vakuumfiltration gemeinsam mit dem Gips abgetrennt. Die durch die Behandlung mit Calciumhydroxid entstehenden Zuckerverluste werden von Purwadi et al (2004) zwar als vernachlässigbar bezeichnet, im Folgenden jedoch mit 2 % (m/m) berücksichtigt.

Es wird angenommen, dass der Chemikalienbedarf der Entgiftung dem der Säurebehandlung entspricht. Jedoch verringert sich bei einem geringeren Wasseranteil die notwendige Menge an Schwefelsäure und Calciumhydroxid zur Konditionierung. Darüber hinaus liegen wie in Kapitel 4.2.1 diskutiert Hinweise vor, dass auch deutlich geringere Säure/Biomasse-Verhältnisse einen wirksamen Aufschluss bewirken (vgl. hierzu: Koostra et al. (2009)). Es wird daher ein Mehrverbrauch von 20 % eingesetzt. Die Mehrkosten zur Bereitstellung eines zusätzlichen Behälters entsprechen den in Kapitel 5.1 identifizierten Kosten eines Neutralisationsbehälters.

Zur Überprüfung der Strohsuspension hinsichtlich ihrer Viskosität wird erneut eine Arbeit Rosgaards et al. (2007a) herangezogen, die eine Untersuchung des Verhalten der Roggenstrohydrolyse in Abhängigkeit des Biomasse/Wasser-Verhältnisses beschreibt. Durch stufenweise Befüllung der Fermenter können demnach hohe Anfangsviskositäten vermieden werden. Zwar erhöht sich die Dauer bis zur vollständigen Hydrolyse durch dieses Vorgehen, jedoch ist bereits im Basisszenario die Hydrolyserate höher als die Fermentationsrate, wodurch keine Verzögerungen zu erwarten sind (siehe Kapitel 4.2.2).

Transportentfernung

Durch die Entgiftung können über Weizenstroh hinaus auch Roggen- und Maisstroh⁶⁴ verarbeitet werden, die zuvor nicht geeignet waren (vgl. hierzu: Qureshi et al. (2010c); Qureshi et al. (2010a)). Damit erhöht sich die für die Fermentation zur Verfügung stehende Strohmenge von 51,5 auf 71,6 % (DBFZ, 2012). Nach der in Kapitel 5.2.1.2.3 entwickelten Abschätzung steigt das nachhaltige Strohaufkommen ($f_{STR}^{FS TRNS}$) damit von 11,5 auf 16,1 t km⁻² a⁻¹ Reststroh. Die erhöhte Verfügbarkeit führt zu einer Reduktion der mittleren Transportstrecke von 106,9 auf 91,3 km.

Aktivitäts- und Umweltvektoren des Fortschrittsszenarios

Die Umsetzung der oben vorgestellten technischen beziehungsweise technologischen Modifikationen führt ausgehend von dem in Kapitel 4 entwickelten Modell zu den Aktivitätsvektoren der Biomassevorbereitung (v_1^{FS}), Fermentation (v_2^{FS}), Separation (v_3^{FS}) und Wasseraufbereitung (v_4^{FS}). Zur Berechnung des Umweltvektors lässt sich das in 4 entwickelte Vorgehen heranziehen. Tabelle 7-1 zeigt die Stoff- und Energieströme des Fortschrittsszenarios in der Übersicht.

⁶⁴ Englisch: Corn stover; Rückstände der Maisspflanze nach der Ernte, besteht maßgeblich aus Blättern und Stängeln

Tabelle 7-1: Stoff- und Energieströme der Modellanlage des Fortschrittsszenarios

Bezeichnung	Einheit	Vektor	Betrag a^{-1}	Betrag h^{-1}
Weizenstroh, feucht	t	$x_{r1}^{uw} + x_{r2}^{uw}$	-473.944	-59,2
Wasser	t	x_{s1}^{uw}	-53.777	-6,7
Schwefelsäure	t	x_{s2}^{uw}	-50.378	-6,3
Calciumhydroxid	t	x_{s3}^{uw}	-38.061	-4,8
Gips	t	x_{z1}^{uw}	55.959	7,0
Enzyme	t	x_{s4}^{uw}	-9.452	-1,2
Gasförmige Emissionen	t	x_{z2}^{uw}	428.474	53,6
n-Butanol (99,5%)	t	x_{y1}^{uw}	63.000	7,9
Aceton (99,5%)	t	x_{y2}^{uw}	33.000	4,1
Ethanol (99,5%)	t	x_{y3}^{uw}	4.000	0,5
Asche	t	x_{z5}^{uw}	41.178	5,1
Elektrische Energie	kWh	x_{s5}^{uw}	97.372.832	12.172,0
Prozesswärme	MJ	x_{s6}^{uw}	0	0
Kühlbedarf	MJ	x_{s7}^{uw}	-2.002.532.150	-250.316,0

7.2.2 Umsetzung der Sachbilanz

Basierend auf den Ergebnissen des vorherigen Kapitels wird im Folgenden die Sachbilanz zur Durchführung der Ökobilanz erstellt. Das bereits diskutierte Fortschrittsszenario wird dabei mit den bis auf die Modellanlage (Prozessstufe 4) unveränderten Annahmen aufgestellt. Darüber hinaus berücksichtigt das *Fortschrittsszenario inklusive Anbauaufwand* den anteilig beim Weizenanbau entstehenden Aufwand zur Bereitstellung von Stroh.

Umsetzung der Sachbilanz des Fortschrittsszenarios

Das Fortschrittsszenario unterscheidet sich vom Basisszenario ausschließlich in der Modellanlage. Das zur Berechnung der Umweltindikatoren herangezogene Programm GEMIS verarbeitet Eingangsdaten bereits auf einem sehr hohen Aggregationsniveau. Die erneute Modellierung oder Verknüpfung bereits vorhandener Prozesse zur Abbildung des Fortschrittsszenarios ist daher nicht notwendig.

Die Prozessstufen eins (Anbau Stroh beziehungsweise Getreide), zwei (Bereitstellung von Strohballen), drei (Transport von Strohballen) sowie fünf (Transport von n-Butanol) und sechs (Verbrennung von n-Butanol) können deshalb unverändert aus Kapitel 6.2 entnommen werden. Zur Abbildung der vierten Prozessstufe (Konversion zu n-Butanol) kann auf die im vorherigen Kapitel 7.2.1 identifizierten Stoff- und Energieströme zurückgegriffen werden.

Umsetzung der Sachbilanz des Fortschrittsszenarios inklusive Anbauaufwand

Für die Bereitstellung von Reststroh werden sowohl im Basis- als auch im Fortschrittsszenario ausschließlich Emissionen und Energieaufwand für die Ballenpressung, jedoch nicht für den Anbau berücksichtigt. Das vorliegende Szenario unterscheidet sich vom Fortschrittsszenario durch die aufwandsgerechte Allokation der Anbauemissionen.

Dazu werden diese den Produkten Weizen und Stroh nach der Energieallokationsmethode zugewiesen (siehe Kapitel 6.1.3.1). Zu diesem Zweck muss ausschließlich Prozessstufe eins (Anbau Stroh beziehungsweise Getreide) modifiziert werden. Für die Abbildung der Prozessstufen zwei (Bereitstellung von Strohballen) und drei (Transport von Strohballen) können die Ausführungen aus Kapitel 6.2 herangezogen werden. Die vierte Prozessstufe (Konversion zu n-Butanol) entspricht der des oben definierten Fortschrittsszenarios. Die Stufen fünf (Transport von n-Butanol) und sechs (Verbrennung von n-Butanol) werden ebenfalls ohne Modifikation aus Kapitel 6.2 entnommen.

In der Energieallokationsmethode werden die Vorkette und Emissionen des Weizenanbaus auf die Produkte Weizen und Stroh in Abhängigkeit ihrer Anteile am gesamten Energieoutput bezogen. Weizen und Stroh weisen Heizwerte von $17,0 \text{ MJ kg}^{-1}$ beziehungsweise $17,2 \text{ MJ kg}^{-1}$ auf (CARMEN, 2010). Die Gewichtung zwischen beiden Produkten erfolgt dabei unter Berücksichtigung des Korn-Stroh-Verhältnisses von 1:0,8 (DüV, 2006). Wie in Kapitel 2.5.2 diskutiert, steht jedoch nur ein Bruchteil (14 %) des technischen Potentials von Strohs für die nachhaltige energetische Nutzung zur Verfügung. Der übrige Teil wird unter anderem zur Erhöhung des Bodenkohlenstoffanteils oder in der Viehzucht eingesetzt.

Es entfallen demnach 89,5 % der Ressourcenbeanspruchung und aller Emissionen auf Weizen und nur 10,5 % auf Stroh. Als Basis wird ein von GEMIS zur Verfügung gestellter Prozess⁶⁵ zur Abbildung des Weizenanbaus in Nordeuropa herangezogen und wie beschrieben hinsichtlich der Ressourcenbeanspruchung und aller Emissionen, die anteilig auf den Anbau von Stroh entfallen, modifiziert.

7.3 Ergebnisse des Fortschrittsszenarios

Ergebnisse der Wirtschaftlichkeitsbetrachtung des Fortschrittsszenarios

Durch die diskutierten technologischen Änderungen müssen Mehrpreise bei Apparaten und Maschinen berücksichtigt werden. Diese werden jedoch von den Einsparungen durch das höhere Biomasse/Wasser-Verhältnis und die damit verbundenen geringeren Baugrößen überkompensiert. Die Total Investment Cost des Fortschrittsszenarios betragen 269 Mio. € und liegen damit etwa 4 % unterhalb derer des Basisszenarios.

Durch die höhere räumliche Dichte von verfügbarem Stroh sinkt die Größe des Einzugsgebietes von 40.388 auf 29.438 km^2 . Die daraus resultierende mittlere Transportstecke inkl. Leerfahrt verringert sich von 213,8 auf 182,5 km. Den Produktionskosten von 120 Mio. € steht damit ein Umsatz von 113 Mio. € gegenüber. Die Kosten der n-Butanol-Bereitstellung betragen $0,99 \text{ € L}^{-1}$ und liegen auch im Fortschrittsszenario über den Umsatzerlösen von $0,90 \text{ € L}^{-1}$.

Neben der durch die Einsparungen zu erwartenden Verringerung der Ausgaben weist das Fortschrittsszenario einen erhöhten Umsatz durch die Einspeisung elektrischer Energie in Höhe von $0,12 \text{ € L}^{-1}$ auf. Abbildung 7-1 zeigt die detaillierten Kostenbestandteile.

⁶⁵ Eingesetzter Prozess: Anbau\Weizen-Körner Nordeuropa-2010

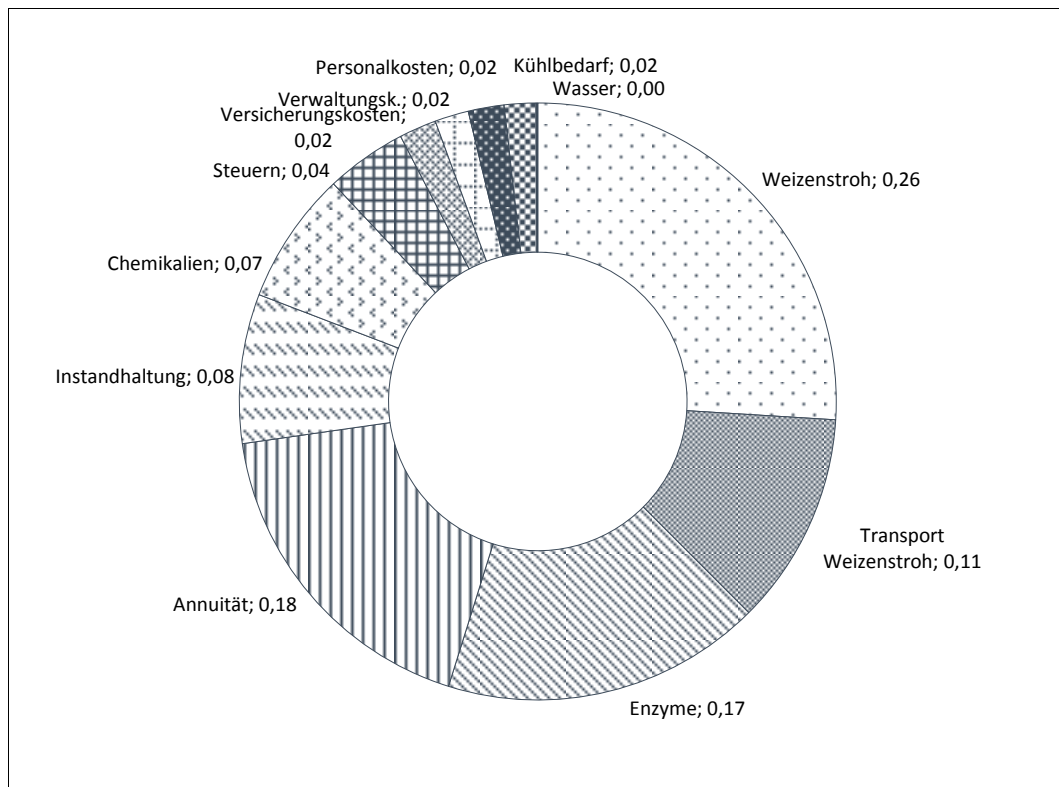


Abbildung 7-1: Kosten zur Herstellung von einem Liter n-Butanol aus Reststroh im Fortschrittsszenario

Es fällt auf, dass die Kosten für Weizenstroh mit $0,26 \text{ € L}^{-1}$ trotz des berücksichtigten Zuckerverlustes um etwa 5 % unter denen des Basisszenario mit $0,28 \text{ € L}^{-1}$ liegen. Dieser Effekt lässt sich auf die in Gleichung 5.8 dargestellte Berücksichtigung der Umsatzerlöse elektrischer Energie im Vollkostenansatz zurückführen. Der Verminderungseffekt trifft daher auf alle Kostenbestandteile zu. Nach Weizenstroh ist die Annuität mit $0,18 \text{ € L}^{-1}$ der zweitgrößte Einzelposten, die Kosten der Enzyme sinken von $0,29$ auf $0,17 \text{ € L}^{-1}$. Während diese im Basisszenario sogar leicht über den Kosten für Weizenstroh liegen, verlieren sie im Fortschrittsszenario erwartungsgemäß an Einfluss.

Die Verringerung des Schwefelsäureeinsatzes durch das höhere Biomasse/Wasser-Verhältnis wird jedoch durch den Mehrverbrauch der Entgiftung überkompensiert. Die Kosten für Chemikalien steigen dadurch von $0,06$ auf $0,07 \text{ € L}^{-1}$.

Die Sensitivitätsanalyse zeigt, dass das Total Capital Investment auch im Fortschrittsszenario den größten Einfluss auf das Ergebnis aufweist. Eine Steigerung von 10 % verursacht zusätzliche Kosten in Höhe von etwa $0,05 \text{ € L}^{-1}$ (siehe Abbildung 7-2). Durch den berücksichtigten Zuckerverlust ist die Bedeutung des Weizenstrohpreises zwar relativ angestiegen, liegt jedoch noch immer in gleicher Höhe von $0,04 \text{ € L}^{-1}$.

Des Weiteren kann abgeleitet werden, dass eine Reduktion des Bereitstellungspreises von Weizenstroh um 23 % auf etwa $84,6 \text{ € t}^{-1}$ einen profitablen Betrieb des Fortschrittssze-

narios ermöglichen würde. Dies trifft ebenfalls auf ein um 18 % auf 221 Mio. € verringertes Total Capital Investment zu. Durch den zusätzlichen Umsatz aus der Einspeisung von Elektrizität verringern sich die Preissensitivitäten der Anlage im Vergleich zum Basisszenario. Da sich die Modellanlage in einem Marktumfeld mit entkoppelten Beschaffungs- und Absatzmärkten befindet, führen geringere Preissensitivitäten gegebenenfalls zu Wettbewerbsvorteilen.

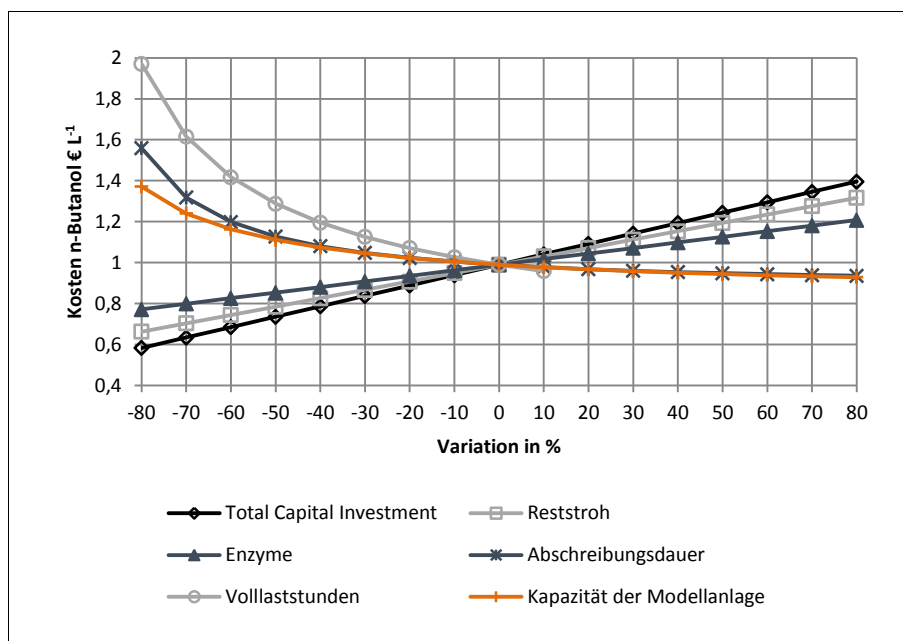


Abbildung 7-2: Einfluss der Variation ausgewählter Parameter auf die Herstellungskosten von n-Butanol im Fortschrittsszenario

Wie auch beim Basisszenario ist bei den Ergebnissen des Fortschrittsszenarios durch die Erhöhung der Kapazität ein Kostenminimum zu erwarten. Es liegt jedoch außerhalb des in Abbildung 7-2 untersuchten Bereiches. Analog zum Vorgehen in Kapitel 5.2.4 lässt es sich bei einer Kapazität von 380.000 t a⁻¹ und Produktionskosten von 0,90 € L⁻¹ lokalisieren. Die Modellanlage des Fortschrittsszenarios würde n-Butanol bei dieser Kapazität kostendeckend herstellen. Die mittlere Transportstrecke läge in diesem Fall bei etwa 178 km. Innerhalb des Einzugsbereiches von Brandenburg, Mecklenburg-Vorpommern, Sachsen und Sachsen-Anhalt ist eine Realisierung einer Anlage dieser Größenordnung indes kaum realistisch.

Als Zwischenergebnis lässt sich jedoch festhalten, dass eine Erhöhung der Kapazität auch unterhalb des Optimums zu einer deutlichen Verringerung der Produktionskosten führt. So liegen diese bei einer Verdopplung der Kapazität von 100.000 auf 200.000 t a⁻¹ bei 0,92 € L⁻¹.

Alternativ könnte ein kostendeckender Betrieb und damit das Ziel des Fortschrittsszenarios auch ohne weitere Modifikationen der Anlage oder deren Kapazität erreicht werden. Stiege die Verfügbarkeit von Reststroh durch eine optimierte Positionierung der Modellanlage um 20 % von 16,1 auf 19,32 t km⁻², betrügen die Produktionskosten 0,90 € L⁻¹.

Ergebnisse der ökologischen Betrachtung des Fortschrittsszenarios

Abbildung 7-3 zeigt die Indikatorergebnisse des Basisszenarios, Fortschrittsszenarios und des Fortschrittsszenarios inklusive Anbau in Gegenüberstellung zu den Referenzen Heizöl EL und FAME. Wie auch in der Diskussion der Ergebnisse des Basisszenarios in Kapitel 6.3 erfolgt die Auswertung getrennt für jede der drei Wirkungskategorien.

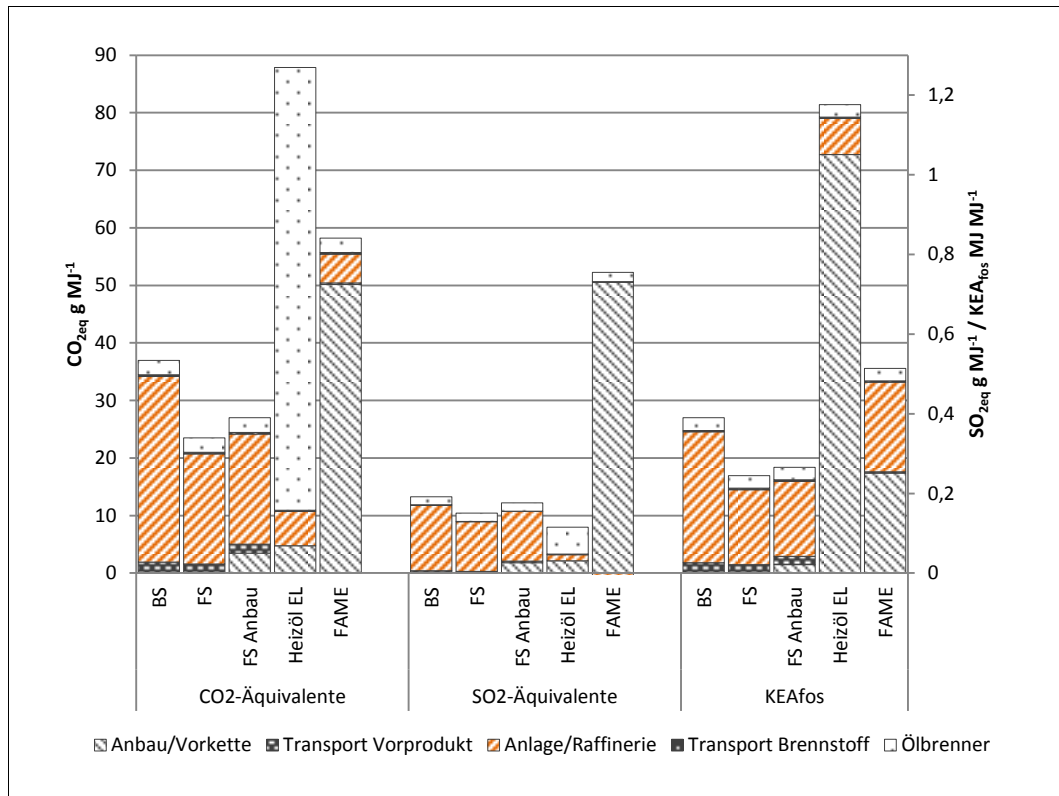


Abbildung 7-3: Ergebnisse der Nachhaltigkeitsuntersuchung des Basisszenarios (BS), Fortschrittsszenarios (FS), Fortschrittsszenarios inklusive Anbau (FS Anbau) und der Referenzen Heizöl EL und FAME (etwaige Gutschriften sind Bestandteil der Einzelsummen)

- Indikatorergebnisse der Wirkungskategorie Treibhausgasemissionen

Das Fortschrittsszenario weist mit 23,5 g CO_{2eq} MJ⁻¹ etwa 64 % der Emissionen des Basisszenarios auf. Die Einsparung gegenüber Heizöl EL wächst damit auf 64,3 g CO_{2eq} MJ⁻¹. Wie die Abbildung zeigt, variiert dabei ausschließlich der Beitrag der Modellanlage, der mit 19,1 g CO_{2eq} MJ⁻¹ und einem Anteil von 81 % im Vergleich zu FAME mit etwa 9 % noch immer vergleichsweise hoch ist. Im Fortschrittsszenario inklusive Anbau betragen die Emissionen an CO₂-Äquivalenten insgesamt 27,0 g CO_{2eq} MJ⁻¹. Dies entspricht einer Erhöhung von 15 % gegenüber dem Fortschrittsszenario ohne Anbau.

Im Vergleich zum Basisszenario wird der Mehraufwand damit durch die Anbauemissionen von den Einsparungen durch technologische Modifikationen überkompensiert. Der Einsatz von n-Butanol des Fortschrittsszenarios inklusive Anbau verringert die Treibhausgasemissionen gegenüber Heizöl EL damit um 60,9 g CO_{2eq} MJ⁻¹. Dass die Anbauemissionen von Weizenstroh im Gegensatz zu denen von FAME (50,2 g CO_{2eq} MJ⁻¹)

nur mit 3,5 g CO_{2eq} MJ⁻¹ zu den Gesamtemissionen beitragen, zeigt auch grafisch, dass der Anbauaufwand von Stroh deutlich geringer als der von Raps für FAME ist.

Aufbauend darauf lassen sich anhand der in Kapitel 6.3 erläuterten Gleichung 6.1 die CO₂-Vermeidungskosten abschätzen. Während die Kosten zur Verringerung von CO₂-Äquivalenten im Basisszenario etwa 527 € t⁻¹ CO_{2eq} betragen, ergeben sich die Kosten im Fortschrittsszenario zu 266 € t⁻¹ CO_{2eq} und im Fortschrittsszenario inklusive Anbau zu 281 € t⁻¹ CO_{2eq}. Wäre der profitable Betrieb der Modellanlage beispielsweise durch eine optimale Positionierung mit Kosten von 0,90 € L⁻¹ möglich, betrügen die CO₂-Verminderungskosten gegenüber Heizöl EL 205 € t⁻¹ CO_{2eq}.

- *Indikatorergebnisse der Wirkungskategorie Versauerung*

Der Einfluss der technologischen und technischen Modifikationen auf das Indikatorergebnis der Versauerung ist mit einer Reduktion von 22% auf 0,150 g SO_{2eq} MJ⁻¹ zwar sehr deutlich, jedoch weniger stark ausgeprägt als im Treibhauspotential. Ursächlich dafür ist der nach wie vor hohe Anteil der Enzyme am Versauerungspotential von 40 % beziehungsweise 0,058 g SO_{2eq} MJ⁻¹ (vgl. hierzu: Kapitel 6.3). Auf die Emissionen der Modellanlage entfallen im Fortschrittsszenario nur noch 83 % im Vergleich zu 85 % im Basisszenario. Trotz der Berücksichtigung des Anbaus von 0,026 g SO_{2eq} MJ⁻¹ emittiert der Einsatz von n-Butanol im Fortschrittsszenario inklusive Anbau 0,016 g SO_{2eq} MJ⁻¹ weniger SO_{2eq}-Äquivalente als im Basisszenario.

Um das Ziel des Fortschrittsszenarios zu erreichen, kein höheres Versauerungspotential im Vergleich zu Heizöl EL (0,115 g SO_{2eq} MJ⁻¹) aufzuweisen, müssen jedoch noch weitere Einsparung realisiert werden. Das Ziel wäre zu erreichen, könnte auf den Einsatz von Schwefelsäure und Calciumhydroxid weitgehend verzichtet werden. Dies setzt eine alternative Biomassevorbehandlung voraus.

- *Indikatorergebnisse der Wirkungskategorie Ressourcenbeanspruchung*

Der fossile kumulierte Energieaufwand beträgt im Fortschrittsszenario 0,245 MJ MJ⁻¹ und sinkt damit auf etwa 63 % des Bedarfes im Basisszenario. In Bezug auf Heizöl EL liegt der Bedarf bei etwa 21 %. Mit der Verringerung des Ressourcenbedarfs der Modellanlage verringert sich deren Einfluss im Fortschrittsszenario auf etwa 77 %. Im Gegensatz zur Wirkungskategorie Versauerung resultiert die Berücksichtigung des Anbaus in einem geringeren Anstieg von 9 % (0,021 MJ MJ⁻¹). Das Fortschrittsszenario inklusive Anbau bleibt damit deutlich unterhalb der Ressourcenbeanspruchung des Basisszenarios von 0,390 MJ MJ⁻¹.

Zusammenfassung

Ziel des Kapitels ist die Verringerung der Produktionskosten und der Erhöhung der technologischen Nachhaltigkeit. Dazu wurden die wichtigsten Hauptansatzpunkte in Form techni-

scher beziehungsweise technologischer Modifikation der Modellanlage des Basisszenarios identifiziert.

Die Reduzierung des Bedarfes an Enzymen, elektrischer Energie und Schwefelsäure sowie die Erhöhung des Biomasse/Wasser-Verhältnisses im Rahmen eines Fortschrittsszenario ermöglicht die Produktion von n-Butanol als Brennstoff zu Kosten von 0,99 € L⁻¹.

Um den wirtschaftlichen Betrieb der Modellanlage zu Produktionskosten von 0,90 € L⁻¹ zu gewährleisten, sind jedoch darüber hinaus weitere Maßnahmen notwendig. Neben einer Erhöhung der Kapazität bietet sich vor allem die optimierte Positionierung der Modellanlage an. Eine um 20 % gesteigerte Strohfächenverfügbarkeit würde einen wirtschaftlichen Betrieb der Modellanlagen im Fortschrittsszenario ermöglichen.

Die ökologische Nachhaltigkeit erhöht sich gegenüber dem Basisszenario durch die genannten Maßnahmen in allen Wirkungskategorien. Der Einfluss der Berücksichtigung des Anbauaufwandes wird durch die Einsparungen überkompensiert. Die Emission an SO₂-Äquivalenten unterschreitet jedoch auch im Fortschrittsszenario die von Heizöl EL nicht. Der größte Hebel zur Verringerung der SO₂-Äquivalente liegt dabei in der Biomassevorbereitung.

8 Schlussbetrachtung und Ausblick

8.1 Schlussbetrachtung

In den kommenden Jahren wird in Deutschland die Bedeutung erneuerbarer Energien sowohl im Raumwärmemarkt als auch in anderen Energiesektoren weiter zunehmen. Hinsichtlich des Einsatzes agrarbasierter Brennstoffe sollte aufgrund ethischer Bedenken und der beschränkten Anbaufläche ein Konflikt zwischen Nahrungsmittelproduktion und Biomassebereitstellung vermieden werden. FAME⁶⁶, die derzeit einzige verfügbare Biokomponente in Heizöl EL, erfüllt diese Forderung nur in beschränktem Umfang. In der vorliegenden Arbeit wird der Einsatz von n-Butanol auf der Grundlage des Reststoffes Weizenstroh als eine alternative Biokomponente zu FAME in Heizöl EL untersucht.

Das Ziel der vorliegenden Arbeit besteht in der Überprüfung der Einsetzbarkeit von n-Butanol im Raumwärmemarkt unter technischen, ökonomischen sowie ökologischen Kriterien. Das gewählte Vorgehen umfasst eine Verbrennungsversuchsreihe und die Entwicklung eines Stoff- und Energiestrommodells. Auf dessen Grundlage erfolgt die Modellerweiterung um eine wirtschaftliche und eine ökologische Betrachtung in Form einer Szenarioanalyse.

In der experimentellen Überprüfung werden Gemische aus Heizöl EL und bis zu 20 % (V/V) n-Butanol hinsichtlich der bei der Verbrennung entstehenden NO_x-, CO- und Rußemissionen und ihrer Betriebssicherheit untersucht (siehe Kapitel 3). Die Überprüfung der Einsetzbarkeit in einem weit verbreiteten Stauscheibenbrenner zeigt, dass der Einsatz von n-Butanol keine Erhöhung der Emissionen verursacht. Dies trifft sowohl auf die absolute Höhe der Emissionen zu als auch auf deren Veränderung relativ zum Heizwert der Gemische. Weiter beeinträchtigt der Einsatz von Heizöl EL/n-Butanol-Gemischen den Brennerbetrieb innerhalb des Einsatzbereiches nicht. Die Untersuchung der Systemkomponenten zeigt keine Korrosion oder übermäßigen Verschleiß. Es ist hervorzuheben, dass der Einsatz von n-Butanol innerhalb des untersuchten Betriebsbereiches dazu keiner Modifikation des Brenners bedarf.

Andererseits verursacht die Zugabe von n-Butanol als Biokomponente zu Heizöl EL im Gemisch einen Abfall des Flammpunktes. Im Gegensatz zu Heizöl EL bedürfen Gemische mit höheren n-Butanol-Konzentrationen besonderer Lagerbedingungen für entzündliche Flüssigkeiten. Diese liegen in vielen Industriebetrieben vor. Für den flächendeckenden Einsatz dürfen Heizölgemische den in der Spezifikation DIN 51603-6 angegebenen Flammpunkt von 55 °C jedoch nicht unterschreiten. Der flächendeckende Einsatz ist daher nur bis zu einer

⁶⁶ Fatty Acid Methyl Esther

Konzentration von 0,5 % (V/V) n-Butanol als Biokomponente in Heizöl EL in Kombination mit 10 % (V/V) FAME möglich. Für eine Erhöhung der Konzentration von n-Butanol ohne Unterschreitung des Flammpunktes besteht weiterer Forschungsbedarf. Allein durch den flächendeckenden Einsatz mit 0,5 % n-Butanol könnten in Deutschland pro Jahr etwa 100.000 t a^{-1} Heizöl EL substituiert werden. Bezogen auf den europäischen Bedarf wären es etwa 350.000 t a^{-1} .

Für die fermentative Herstellung von n-Butanol aus Reststroh liegen bislang ausschließlich experimentelle Ergebnisse vor. Auf dieser Grundlage wird ein Stoff- und Energiestrommodell als Ausgangspunkt für die wirtschaftliche und ökologische Bewertung des Einsatzes von n-Butanol entwickelt (siehe Kapitel 4). Das Modell bildet ein Basisszenario ab, das überwiegend industriell bewährte Prozesse einsetzt. Reststroh wird dabei mittels verdünnter Schwefelsäure vorbehandelt. Die anschließende Aufspaltung in nutzbare Zucker erfolgt enzymatisch und simultan zur semi-kontinuierlichen Fermentation. Mittels Gas-Stripping durch Fermentationsgase werden dabei in-situ die entstehenden Produkte abgetrennt. Das Ergebnis der Untersuchung ist ein Umweltvektor in Form aller ein- und ausgehenden Stoff- und Energieströme.

Die auf dem Umweltvektor aufbauende Investitionskostenschätzung der Modellanlage weist ein Fixed Capital Investment in Höhe von 252 Mio. € auf (siehe Kapitel 5). Die periodisierten Investitionskosten und bewerteten Stoff- und Energieströme des Basisszenarios verursachen Produktionskosten in einer Gesamthöhe von $1,21 \text{ € L}^{-1}$ n-Butanol. Bei einem angenommenen Marktpreis von 1.100 € t^{-1} n-Butanol decken die Umsatzerlöse in Höhe von $0,90 \text{ € L}^{-1}$ die Kosten nicht. Der Betrieb der Modellanlage ist im Basisszenario daher nicht wirtschaftlich. Neben der Bereitstellung von Weizenstroh ($0,42 \text{ € L}^{-1}$) tragen insbesondere Enzyme mit $0,29 \text{ € L}^{-1}$ zu den Gesamtkosten bei. Die Produktionskosten sind jedoch in Gegenüberstellung zu den ökologischen Vorteilen zu bewerten.

Die Erweiterung des Modells um eine ökologische Betrachtung basiert auf der Bewertung der identifizierten Stoff- und Energieströme. Diese werden mit Hilfe der Software GEMIS 4.7 ausgewertet (siehe Kapitel 6). Da Weizenstroh derzeit als Reststoff gilt, berücksichtigt die Betrachtung des Basisszenarios keine Anbauemissionen. Im Vergleich zu Heizöl EL stellt n-Butanol im Basisszenario in den Wirkungskategorien Treibhausgasemissionen und Ressourcenbeanspruchung den vorteilhafteren Brennstoff dar. Mit einer Treibhausgaseinsparung von $50,9 \text{ g CO}_{2\text{eq}} \text{ MJ}^{-1}$ gegenüber Heizöl EL entstehen durch den Einsatz von n-Butanol im Raumwärmemarkt jedoch CO_2 -Verminderungskosten in Höhe von $527 \text{ € t}^{-1} \text{ CO}_{2\text{eq}}$. Der Einsatz von FAME weist diesbezüglich deutlich geringere Kosten in Höhe von $101 \text{ € t}^{-1} \text{ CO}_{2\text{eq}}$ auf. Die erzielte Einsparung an CO_2 -Äquivalenten ist mit $29,7 \text{ g CO}_{2\text{eq}} \text{ MJ}^{-1}$ jedoch erkennbar geringer.

In der Wirkungskategorie Versauerung erhöht der Einsatz von n-Butanol im Basisszenario die Emissionen gegenüber Heizöl EL um etwa 67 %. Zwar stellt es damit relativ zu Heizöl EL die nachteiligere Variante dar, jedoch trägt FAME mit einer Erhöhung der

SO₂-Äquivalente von 544 % erheblich stärker zur Versauerung bei. In der Gegenüberstellung zu FAME verringert der Einsatz von n-Butanol die Gesamtemission daher auch in dieser Wirkungskategorie.

Die Ressourcenbeanspruchung geht durch den Einsatz von n-Butanol mit 0,39 MJ MJ⁻¹ im Vergleich sowohl zu Heizöl EL als auch FAME um 67 % beziehungsweise 24 % zurück. Es ist hervorzuheben, dass die Modellanlage in jeder der untersuchten Wirkungskategorien den jeweils größten Einfluss aufweist. Den Hauptanteil daran hat der Enzymeinsatz. Bezogen auf die Modellanlage verursachen Enzyme 81 % der Treibhausgasemissionen, 55 % der Versauerung und 81 % der Ressourcenbeanspruchung. In den genannten Wirkungskategorien ist der Transport von Weizenstroh mit 5 %, 3 % und 6 % von vergleichsweise geringer Bedeutung.

Die detaillierte Untersuchung des Basisszenarios zeigt, dass die größten Potentiale sowohl zur Reduzierung der Produktionskosten als auch zur Erhöhung der ökologischen Nachhaltigkeit in der Minimierung des Bedarfes an Enzymen, Schwefelsäure und elektrischer Energie sowie in der Erhöhung des Biomasse/Wasser-Verhältnisses bestehen (siehe Kapitel 7). Darüber hinaus wird am Beispiel von FAME verdeutlicht, dass der Anbau der Biomasse einen hohen Einfluss auf die ökologische Nachhaltigkeit haben kann. Durch die Kategorisierung des Reststrohs als Reststoff wird dieser Einfluss zurzeit nicht berücksichtigt.

Auf Basis dieser Erkenntnisse wird ein Fortschrittsszenario abgeleitet, das neben etablierten Technologien auch bislang großtechnisch nicht überprüfte Prozesse einsetzt. Dazu zählen beispielsweise die Immobilisierung und Mehrfachnutzung von Enzymen, in-situ-Produktabtrennung mittels Pervaporation und ein gegenüber dem Basisszenario erhöhtes Biomasse/Wasser-Verhältnis. Das Fortschrittsszenario senkt die Produktionskosten auf 0,99 € L⁻¹ beziehungsweise einen Marktpreis von 0,044 € MJ⁻¹ und verbessert die ökologische Nachhaltigkeit im Vergleich zum Basisszenario und der Referenz FAME in allen Wirkungskategorien (siehe Abbildung 8-1). Dies gilt auch unter der Berücksichtigung der anteiligen Anbauemissionen für Stroh. Es wird deutlich, dass darüber hinaus eine Optimierung einzelner Kriterien zwar möglich ist, jedoch im Hinblick auf das Gesamtoptimum einer engen Koordination technologischer und wirtschaftlicher Ziele bedarf.

Wie in Abbildung 8-1 abschließend deutlich wird, sinken die Emissionen an CO₂-Äquivalenten im Fortschrittsszenario in Bezug auf das Basisszenario deutlich ab und liegen damit etwa 60 % unterhalb derer von FAME und 73 % unterhalb derer von Heizöl EL. Die CO₂-Vermeidungskosten betragen im Fortschrittsszenario 266 € t⁻¹ CO_{2eq}, inklusive der Berücksichtigung des Anbaus 281 € t⁻¹ CO_{2eq}.

Die Emissionen an SO₂-Äquivalenten sinken jedoch auch im Fortschrittsszenario nicht unter die von Heizöl EL, sondern liegen fast 30 % darüber. Bezogen auf die Biokomponente FAME reduziert der Einsatz von n-Butanol jedoch die Emissionen an SO₂-Äquivalenten um 80 %.

Der Ressourcenverbrauch verringert sich gegenüber FAME um 53 % und liegt damit weit unter dem von Heizöl EL. Es zeigt sich, dass der Einfluss der anteiligen Anbauemissionen von Reststroh in allen Wirkungskategorien verhältnismäßig gering ist. Insbesondere im Vergleich zu den Anbauemissionen von FAME beträgt der Anstieg in den Treibhausgasemissionen, Versauerung und Ressourcenbeanspruchung lediglich 15, 17 und 9 %.

In Bezug auf Heizöl EL entstehen durch den Einsatz von FAME nur geringe technische Hindernisse. Eine Beimischung ist daher in Abhängigkeit des Brennertyps bis zu 20 % (V/V) möglich. Aus technischer Sicht können ebenfalls Beimischungen bis zu 20 % (V/V) n-Butanol eingesetzt werden, jedoch unterschreitet das Brennstoffgemisch bereits ab 0,5 % (V/V) die zulässige Flammpunktgrenze.

Steigt die Flächenverfügbarkeit von Reststroh durch die optimierte Positionierung der Anlage um 20 %, ist der wirtschaftliche Betrieb der Modellanlage im Fortschrittsszenario zu Produktionskosten von 0,90 € L⁻¹ möglich. Die mittlere Transportstrecke beträgt in diesem Fall 83 km. Jedoch muss hervorgehoben werden, dass das Fortschrittsszenario im Vergleich zum Basisszenario auch auf bislang großtechnisch nicht etablierte Prozesse zurückgreift. Insbesondere für den Einsatz der in-situ-Produktabtrennung durch Pervaporation liegt noch kein Nachweis der industriellen Eignung vor. Um das volle Potential dieser Prozesskette auszuschöpfen, besteht daher noch Forschungsbedarf. Der Verringerung des Fixed Capital Investments kommt dabei eine doppelte Bedeutung zu. Mit den Investitionskosten sinkt die kostenoptimale Kapazität, so dass auch die Transportkosten sinken. Diese wiederum reduzieren die dabei entstehenden Kosten und erhöhen die ökologische Nachhaltigkeit.

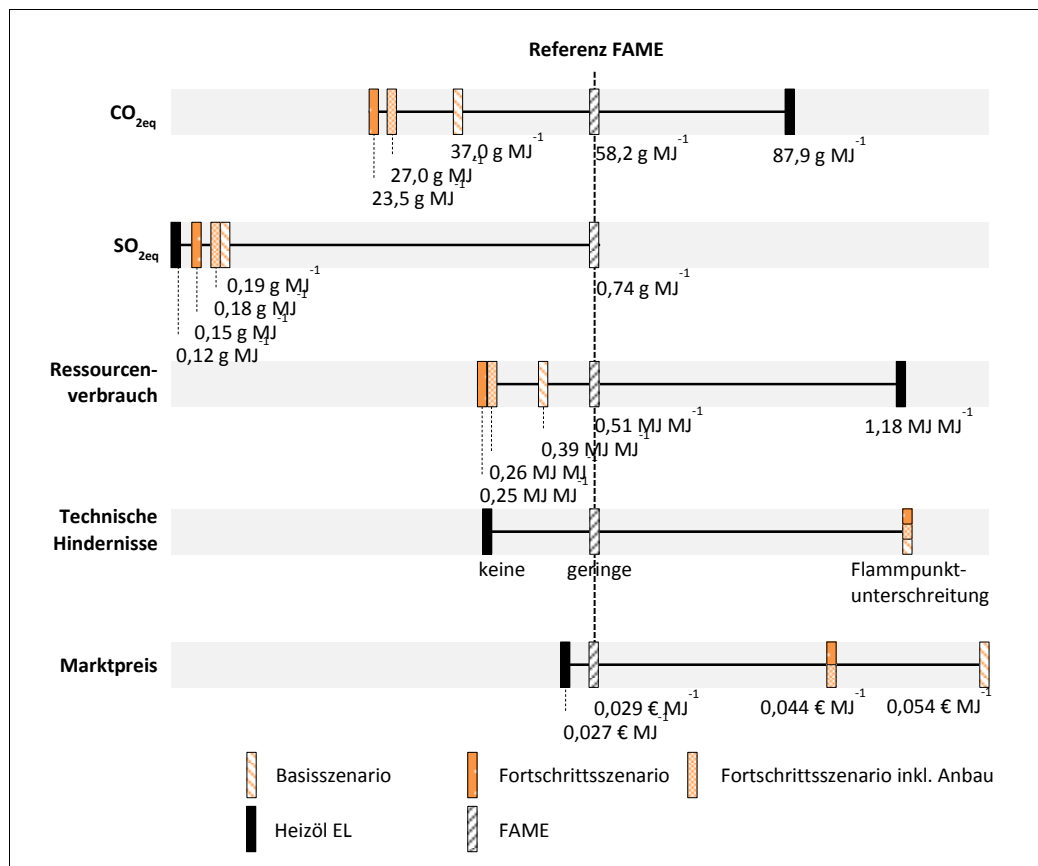


Abbildung 8-1: Zusammenfassende Darstellung der untersuchten Kriterien des Einsatzes von n-Butanol als Biokomponenten in Heizöl EL im Vergleich zur Referenz FAME

Die vorliegende Arbeit zeigt zum einen, dass sich n-Butanol für den Einsatz im Raumwärmemarkt technisch eignet und auf der Basis von Getreidestroh deutliche ökologische Vorteile aufweist. Zum anderen besteht für die Realisierung eines wirtschaftlichen Betriebs einer entsprechenden n-Butanol-Anlage noch Forschungsbedarf.

8.2 Ausblick

Im Zuge der Energiewende wird die Bereitstellung von erneuerbarer Energie im Raumwärmemarkt weiter an Bedeutung gewinnen. N-Butanol eignet sich in diesem Rahmen im Gegensatz zu anderen Technologien für den flächendeckenden Einsatz. Es ist keine Modifikation der bestehenden Distributionswege oder vorhandenen Endgeräte notwendig. Zur Nutzung entstehen daher keine direkten Investitionskosten. N-Butanol stellt als Biokomponente im Raumwärmemarkt aufgrund dessen eine ideale flächendeckende Übergangstechnologie dar.

Neben der Verwendung als Brennstoff eignet sich n-Butanol auch als Kraftstoff im Verbrennungsmotor und als Grundstoff der chemischen Industrie. Die vielseitigen Einsatz- und Absatzmöglichkeiten von n-Butanol tragen daher zu einer intensiven Forschung zur

Kommerzialisierung bei. Neben institutionellen Forschungseinrichtungen arbeiten bereits Unternehmen wie Butamax, Cobalt Technologies und Butalco an diesem Ziel. Für die Zukunft kann aus diesen Gründen eine deutliche Kostenverringerung erwartet werden.

Die Bereiche mit dem größten Verbesserungspotential in der Prozesskette liegen in der Biomassevorbereitung und in der in-situ-Produktabtrennung. Wie auch im Fortschrittsszenario diskutiert besteht für erstere ein erhebliches Potential zur Reduzierung des Einsatzes von Enzymen, Schwefelsäure und Calciumhydroxid. Insbesondere die Vorbehandlung mit Dampf (Dampfexplosion) und die Immobilisierung von Enzymen (Enzymrecycling) bieten hier Ansätze. In der in-situ-Produktabtrennung steht die Reduzierung des Energiebedarfs im Fokus. Dazu eignen sich insbesondere die Pervaporation und die Flüssig-Flüssig-Extraktion beispielsweise mit Oleylalkohol oder Mesitylen.

Der Biomassevorbereitung kommt dabei im Hinblick auf den technologischen Fortschritt eine besondere Rolle zu. Aufgeschlossene Lignocellulose eignet sich neben der Herstellung von n-Butanol auch für andere Fermentationsarten wie beispielsweise die Herstellung von Ethanol. Durch dieses nochmals erweiterte Einsatzspektrum und das erhöhte Marktpotential ist insbesondere für diesen Prozess eine zügige Entwicklung zu erwarten.

Durch die anteilig hohen Transportkosten eignen sich als Anlagenstandort speziell Anbaugelände mit deutlich überdurchschnittlichem Reststrohaufkommen. Es kann daher davon ausgegangen werden, dass in Deutschland vorerst nur ausgewählte Standorte in Frage kommen. Die ersten kommerziellen Anlagen werden voraussichtlich in Anbaugeländen wie Nordamerika, Osteuropa und China in Betrieb genommen werden können. Diese Regionen bieten durch ihr hohes lokales Aufkommen an Reststroh deutliche wirtschaftliche Vorteile gegenüber den heterogenen Getreideanbauflächen in Deutschland. Wie auch in anderen Technologien werden sich im Zuge der Realisierung Standardtechnologien und -Komponenten etablieren und zur Senkung des Fixed Capital Investment beitragen. Dadurch verringert sich zukünftig die kostenoptimale Kapazität und es werden ebenfalls Anbaugelände mit durchschnittlichem Strohaufkommen wirtschaftlich.

Für die Standortwahl kann darüber hinaus die Verfügbarkeit alternativer Substrate aus der Lebensmittelindustrie eine Rolle spielen. Neben der Einsetzbarkeit setzt dies ein hohes lokales Aufkommen der Substrate voraus. Im Raum Deutschland bieten sich dafür insbesondere extrahierte Zuckerrübenschnitzel aus der Zuckerherstellung an. Dabei ergibt sich ein zusätzlicher Wettbewerbsvorteil für die Zuckerherstellung. Da die Nassfermentation zur Herstellung von n-Butanol nicht auf getrocknete Substrate angewiesen ist, entfallen der aufwändige Trocknungsprozess und die Lagerung der Zuckerrübenschnitzel. Wie auch für die Realisierung des Fortschrittsszenarios besteht für den Einsatz dieses Substrates jedoch Forschungsbedarf.

Der Ausblick zeigt, dass die Treiber für die Kommerzialisierung von n-Butanol insbesondere in Einsatzgebieten außerhalb des Raumwärmemarktes und den Parallelen zur fermentativen

Ethanolproduktion liegen. Es ist daher weiterhin eine verstärkte Forschungstätigkeit zu erwarten, so dass sich die Kosten für den Einsatz von n-Butanol auch im Raumwärmemarkt künftig deutlich verringern werden.

9 Literaturverzeichnis

AACEI Association for the Advancement of Cost Engineering International International Recommended Practice No. 18R-97: Cost Estimation Classification System - As Applied in Engineering, Procurement and Construction for the Process Industries. - Morgantown, WV, USA : AACE, 2011.

Aerzener Maschinenfabrik Richtpreisangebot. - Aerzen, 2012.

Aichert D., Prinzing P. und Roedl R. Investitionskostenschätzung für Chemieanlagen. Chemie Ingenieur Technik. - 1985. - 1 : Bd. 57. - S. 8-14.

Allen D. H. Estimating Techniques. Short Cut Capital Cost Estimating. Processing. - 1976. - Bd. 43. - S. 21-22.

Allen D. H. und Page R. C. Revised Technique for Predesing Cost Estimating. Chemical Engineering. - 1975. - S. 142-150.

Arantes V. und Saddler J. N. Cellulose accessibility limits the effectiveness of minimum cellulase loading on the efficient hydrolysis of pretreated lignocellulosic substrates. Biotechnology for Biofuels. - 2011. - 3 : Bd. 4. - S. 1-16.

Baasel W. D. Preliminary Chemical Engineering Plant Design. - New York : Reinhold, 1990.

Bach N. G. How to get more accurate Plant Cost Estimates. Chemical Engineering. - 1958. - 65. - S. 155-159.

BAFA Bundesamt für Wirtschaft und Ausfuhr Amtliche Mineralöl-daten. - Eschborn : Bundesamt für Wirtschaft und Ausfuhr, 2009-2012.

BAFU Bundesamt für Umwelt Method der ökologischen Knappheit - Ökofaktoren 2006. - Bern : Bundesamt für Umwelt BAFU; Öbu – Netzwerk für nachhaltiges Wirtschaften, 2009.

Beesch S. C. Acetone-Butanol Fermentation of Starches. Applied Microbiology. - 1952. - 2 : Bd. 1. - S. 85-95.

Belkacemi K. [et al.] Ethanol Production from AFEX-Treated Forages and Agricultural Residues. Applied Biochemistry and Biotechnology. - 1998. - 1 : Bde. 70-72. - S. 441-462.

Beltran A. [et al.] Poly(octylmethylsiloxane)/oleyl alcohol supported liquid membrane for the pervaporative recovery of 1-butanol from aqueous and ABE model solutions. Journal of Industrial and Engineering Chemistry. - 2012. - 1 : Bd. 19. - S. 182-189.

- Bibliographisches Institut GmbH** Duden online - Nachhaltigkeit. - Bibliographisches Institut GmbH, 2012. - 10. 09 2012. -
<http://www.duden.de/rechtschreibung/Nachhaltigkeit>.
- Bielig T.** Nicht-intendierte Outputs bei der Gewinnung und Verstromung von Braunkohle. - Berlin : Universitätsverlag der TU Berlin, 2010.
- BMU Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit** Kurzinfo Bioenergie. - 2011. - 11. 12 2012. - http://www.erneuerbare-energien.de/erneuerbare_energien/bioenergie/kurzinfo/doc/4759.php.
- BMVBS Bundesministerium für Verkehr, Bau und Strassenentwicklung** Wohnen und Bauen in Zahlen 2011/2012. - Bonn : Druckerei des BMVBS, 2012.
- BRD Bundesrepublik Deutschland** Nationaler Aktionsplan für erneuerbare Energie gemäß der Richtlinie 2009/28/EG zur Förderung der Nutzung von Energie aus erneuerbaren Quellen. - Berlin : Bundesregierung, 2010.
- Bundesregierung** Energiekonzept. Erneuerbare Energien. - 23. 11 2011. - 19. 09 2012. - <http://www.bundesregierung.de/Content/DE/StatischeSeiten/Breg/Energiekonzept/1-Energie%20erzeugen/23-11-11-biomasse.html>.
- Bundestag Deutscher** Abschlußbericht der Enquete-Kommission „Schutz des Menschen und der Umwelt - Ziele und Rahmenbedingungen einer nachhaltig zukunftsverträglichen Entwicklung. Drucksache 13/112200.: Deutscher Bundestag, 1998.
- Butamax** Butamax Technology. - Butamax Advanced Biofuels LLC, 2012. - 30. 10 2012. - <http://www.butamax.com/butamax-technology/technology-development.ashx>.
- CARMEN C.A.R.M.E.N. e.V.** Heizen mit Getreide. - Straubing : C.A.R.M.E.N. e.V., 2010.
- Chilton C. H.** Cost Data Correlated. Chemical Engineering. - 1949. - 56. - S. 97-106.
- Chilton C. H.** Sixth-Tenth-Factor applies to Complete Plant Cost. Chemical Engineering. - 1950. - 4 : Bd. 57. - S. 112-114.
- Cho D. H. [et al.]** Detoxification of model phenolic compounds in lignocellulosic hydrolysates with peroxidase for butanol production from *Clostridium beijerinckii*. Applied Microbiology and Biotechnology. - 2009. - 3 : Bd. 83. - S. 1035-1043.
- Clerk J.** Multiplying Factors give installed Cost of Process Equipment. Chemical Engineering. - 1963. - 70. - S. 162-163.
- Cobalt Technologies** Cobalt And The Naval Air Warfare Center Team Up To Produce A Renewable Jet Fuel From Bio N-Butanol. - 2012. - 17. 12 2012. - <http://www.cobalttech.com/news/news-item/cobalt-and-the-naval-air-warfare-center-team-up-to-produce-a-renewable-jet/>.

- COFELY Refrigeration GmbH** Kühltürme von COFELY. - Lindau : COFELY Refrigeration GmbH, 2009.
- Cooker A. K.** Ludwig's Applied Process Design for Chemical and Petrochemical Plants. - Burlington : Elsevier, 2007.
- Couper J.R.** Process Engineering Economics. - New : Marcel Dekker, 2003.
- Daenzer W.F. und Huber F.** Systems Engineering - Methodik und Praxis. - Zürich : Industrielle Organisation, 1999.
- DBFZ Deutsches Biomasse Forschungszentrum** Basisinformationen für eine nachhaltige Nutzung von landwirtschaftlichen Reststoffen zur Bioenergiebereitstellung. - Berlin : Projektträger Jülich- Forschungszentrum Jülich GmbH, 2012.
- DECHEMA** Pilotprojekt "Lignocellulose-Bioraffinerie". - Frankfurt : DECHEMA e.V., 2009.
- DESTATIS Statistisches Bundesamt** Gebiet und Bevölkerung - Fläche und Bevölkerung. - 2012. - 05. 09 2012. - http://www.statistik-portal.de/statistik-portal/de_jb01_jahrtab1.asp.
- Dhillon B. S.** Life Cycle Costing: Techniques, Models and Applications.: Routledge, 1989.
- DIHK Deutscher Industrie- und Handelskammertag** Deutscher Industrie- und Handelskammertag. - 11. 07 2011. - 23. 01 2012. - <http://www.dihk.de/presse/meldungen/2011-07-04-hebesaetze>.
- DIN Deutsches Institut für Normung** DIN 31051, Grundlagen der Instandhaltung. - Berlin : Beuth Verlag, 2003.
- DIN Deutsches Institut für Normung e.V.** DIN 51603. - Berlin : Beuth Verlag, 2011. - S. 8. - Flüssige Brennstoffe-Heizöl-Teil 1: Heizöl EL, Mindestanforderungen.
- DIN Deutsches Institut für Normung e.V.** DIN 51603-6. - Berlin : Beuth Verlag, 2011.
- DIN Deutsches Institut für Normung e.V.** EN ISO 14044 - Umweltmanagement. Ökobilanz. Grundsätze und Rahmenbedingungen. - Berlin : Beuth Verlag, 2006. - S. 5-14. - Umweltmanagement-Ökobilanz-Anforderungen und Anleitungen.
- DIN Deutsches Institut für Normung e.V.** Vornorm-Verfahrensregeln. - Deutsches Institut für Normung, 2012. - 17. 12 2012. - <http://www.spec.din.de/cmd?level=tpl-rubrik&menuid=81501&cmsareaid=81501&menurubricid=88245&cmsrubid=88245&languageid=de>.
- DüV Düngeverordnung** Düngeverordnung in der Fassung der Bekanntmachung vom 27. Februar 2007 (BGBl. I S. 221), die zuletzt durch Artikel 5 Absatz 36 des Gesetzes vom 24. Februar 2012 (BGBl. I S. 212) geändert worden ist. - 2006.
- Dykhoff H. und Spengler T.** Produktionswirtschaft. Eine Einführung. - Berlin : Springer, 2010.

- Dysert L. R.** Sharpen Your Cost Estimation Skills. Cost Engineering. - 2003. - 6 : Bd. 45.
- EEG Erneuerbare-Energien-Gesetz** Gesetz für den Vorrang erneuerbarer Energien. - 2012.
- EEWärmeG Erneuerbare-Energien-Wärme-gesetz** Gesetz zur Förderung Erneuerbarer Energien im Wärmebereich. - 2011.
- EG Europäisches Parlament und Europäischer Rat der Europäischen Union** Richtlinie 2009/28/EG des Europäischen Parlamentes und des Rates. - Brüssel, 2009. - S. 17, 46, 55, 56. - EPREU Abkürzung für Europäisches Parlament und der Rat der europäischen Union.
- Ellinger T. und Haupt R.** Produktions- und Kostentheorie. - Stuttgart : Poeschel, 1996.
- EnergieStG** Energiesteuergesetz. - 2012.
- Engels B.** Integrierte Logistik- und Verwertungsplanung beim Produktrecycling - Dargestellt am Beispiel von Gerätebatterien. - Düsseldorf : VDI Verlag, 2003.
- EWärmeG Erneuerbare-Wärme-Gesetz** Gesetz zur Nutzung erneuerbarer Wärmeenergie in Baden-Württemberg. - 2007.
- EZB Europäische Zentralbank** Devisen-Durchschnittskurse 2011 -Euro foreign exchange reference rates. - 2012a. - 29. 11 2012. -
<http://www.ecb.int/stats/exchange/eurofxref/html/eurofxref-graph-usd.en.html>.
- EZB Europäische Zentralbank** Money market interest rates. - 2012b. - 20. 11 2012. -
<http://sdw.ecb.europa.eu/reports.do?node=100000175>.
- Ezeji T. C., Qureshi N. und Blaschek H. P.** Microbial production of a biofuel (acetone-butanol-ethanol) in a continuous bioreactor: impact of bleed and simultaneous product removal. Bioprocess and Biosystems Engineering. - 2012.
- Ezeji T. C. und Blaschek H. P.** Butanol production from agricultural residues. Impact of degradation products on Clostridium beijerinckii growth and butanol fermentation. Biothechnology and Bioengineering. - 2007. - Bd. 97. - S. 1460-1469.
- Fandel Günther** Aktivitätsanalytische Fundierung der Produktionstheorie. - Hagen : Fernuniversität, Fachbereich Wirtschaftswissenschaften, 1990.
- Fandel Günther** Produktion I, Produktions- und Kostentheorie. - Berlin : Springer Verlag, 1996.
- Ferreira Santos A., Kawase K. und Vieira Coelho G.** Enzymatic saccharification of lignocellulosic materials after treatment with supercritical carbon dioxide. The Journal of Supercritical Fluids. - 2011. - 3 : Bd. 56. - S. 277-282.
- Fertecon** Sulphuric Acid Report 11. July 2012. - Turnbridge Wells, UK : Fertecon, 2012.

- FfE Forschungsstelle für Energiewirtschaft** CO₂-Verminderung in Deutschland. Teil I - Methodik und Zusammenfassung. - München : Forschungsstelle für Energiewirtschaft e.V., 2009.
- Frey W.** Gebläse für Belebungsanlagen. - Leobendorf : AAB Frey, 2012.
- Fritsche U.R. und al. et** Stoffstromanalyse zur nachhaltigen energetischen Nutzung von Biomasse. Endbericht F&E-Vorhaben. - verschiedene : Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit, 2004.
- Futterer E. und Lohe B.** Stationäre Flowsheet-Simulation. - Weinheim : VHC Verlag, 1995. - Bd. Prozeßsimulation.
- Gabler Wirtschaftslexikon** Gabler Wirtschaftslexikon. Stichwort: Abschreibung. - Gabler Verlag, 2012a. - 23. 01 2012.
- Gabler Wirtschaftslexikon** Gabler Wirtschaftslexikon. Stichwort: CML-Methode. - Gabler Verlag, 2012b. - 11. 09 2012. - <http://wirtschaftslexikon.gabler.de/Archiv/222023/cml-methode-v5.html>.
- Gabler Wirtschaftslexikon** Gabler Wirtschaftslexikon. Stichwort: Eco-Indikator 99. - Gabler Verlag, 2012c. - 11. 09 2012. - <http://wirtschaftslexikon.gabler.de/Archiv/222020/eco-indicator-99-v5.html>.
- Galbe M. und Zacchi G.** Pretreatments: The key to efficient utilization of lignocellulosic materials. Biomass and Bioenergy. - 2012. - 11 : Bd. 46. - S. 70-78.
- Garret D. E.** Chemical Engineering Economics. - New York : Nostrand Reinhold, 1989.
- GIG Karasek** Eindampftechnologie. - Gloggnitz-Stuppach : GIG Karasek, 2012.
- Goedkoop M.** The Eco-indicator 99 LCIA methodology - an introduction / Hrsg. Baumgartner T. und Braunschweig A.. - Zürich : ETH Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, 2000.
- Goldemberg J. [et al.]** Ethanol learning curve. The Brazilian experience. Biomass and Bioenergy. - 2004. - 26. - S. 301-304.
- Green Biologics** Markets. - 2012. - 17. 12 2012. - <http://www.greenbiologics.com/markets.php>.
- Guo T. [et al.]** Clostridium beijerinckii mutant with high inhibitor tolerance obtained by low-energy ion implantation. Journal of Industrial Microbiology and Biotechnology. - 2012. - 6 : Bd. 39. - S. 401-407.
- Guthrie K. M.** Capital and Operating Cost for 54 Chemical Processes. Chemical Engineering. - 1977. - Bd. 77. - S. 140-156.
- Guthrie K. M.** Process Plant Estimating, Evaluation and Control. - Solana Beach : Craftsman Book Company of America, 1974.

- Haase M.** Entwicklung eines Energie- und Stoffstrommodells zur ökonomischen und ökologischen Bewertung der Herstellung chemischer Grundstoffe aus Lignocellulose. - Karlsruhe : KIT Scientific Publishing , 2012.
- Hady L. und Wozny G.** Modulare Anlagenplanung - Stand der Technik? -7. (Berlin-Aachener) Symposium. Informationstechnologien für Entwicklung und Produktion in der Verfahrenstechnik. - Aachen, 2010.
- Hamelinck C. N., van Hooijdonk G. und Faaij A. P. C.** Ethanol from lignocellulosic biomass: techno-economic performance in short-, middle- and long-term. Biomass and Bioenergy. - 2005. - 4 : Bd. 28. - S. 384-410.
- Hand W. E.** From Flowsheet to Cost Estimate. Petroleum Refiner. - 1958. - 37. - S. 331-334.
- Haselbarth J. E. und Berk J. M.** Three Estimates show Importance of Definition. Chemical Engineering. - 1960. - 8 : Bd. 67. - S. 194.
- Hauff V.** Unsere gemeinsame Zukunft. Der Brundtland-Bericht der Weltkommission für Umwelt und Entwicklung. - Greven : Eggenkamp Verlag, 1987.
- Heijungs R.** Environmental Life Cycle Assessment of products. Guide and Backgrounds. - Leiden : Centre of Environmental Science (CML), Leiden University, 1992.
- Herbert V. D. und Bisio A.** The Risk and the Benefit. Part I: The Price. Chem. Technology. - 1976. - S. 174-179.
- Heredia A., Jimenez A. und Guillen R.** Composition of plant cell walls. Zeitschrift für Lebensmitteluntersuchung und -Forschung. - 1995. - 1 : Bd. 200. - S. 24-31.
- Hoffmann H., Dohn N. und v. Rheinberg O.** Alternative flüssige Energieträger im Raumwärmemarkt - Experimentelle Überprüfung von n-Butanol als Beimischung zu Heizöl EL. - Aachen : URBAN-VERLAG Hamburg/Wien GmbH, 2012. - S. 1-3. - Erdöl Erdgas Kohle 128 Jg. 2012, Heft 2.
- Hoitsch H.** Produktionswirtschaft. - München : Vahlen, 1993.
- Holland J. A., Watson F. A. und Wilkinson J. K.** Process Economics. Fixed Capital-Cost Estimation. - New York : McGraw-Hill, 1988. - Bd. Perry's Chemical Engineering Handbook 6th Edition.
- ICIS** ICIS pricing Acetone. - ICIS pricing, 27. 04 2012a. - 30. 06 2012. - http://www.icispricing.com/il_shared/Samples/SubPage132.asp.
- ICIS** ICIS pricing Ethanol. - ICIS pricing, 25. 04 2012b. - 30. 06 2012. - http://www.icispricing.com/il_shared/samples/subpage108.asp.
- ICIS** ICIS pricing Oxo-alcohols. - ICIS pricing, 27. 04 2012c. - 2012. 06 30. - http://www.icispricing.com/il_shared/Samples/SubPage203.asp.
- IFA Institut für Arbeitsschutz der Deutschen Gesetzlichen Unfallversicherung** GESTIS Stoffdatenbank. Stichwort: Calciumsulfat. - Berlin : IFA, 2012a.

- IFA Institut für Arbeitsschutz der Deutschen Gesetzlichen Unfallversicherung** GESTIS
Stoffdatenbank. Stichwort: Natriumsulfat. - Berlin : IFA, 2012b.
- IFA Institut für Arbeitsschutz der Deutschen Gesetzlichen Unfallversicherung** GESTIS
Stoffdatenbank: Stichwort Ethanol. - Berlin : IFA, 2012c.
- IFA Institut für Arbeitsschutz der Deutschen Gesetzlichen Unfallversicherung** GESTIS
Stoffdatenbank: Stichwort Heizöl EL. - Berlin : IFA, 2012d.
- IFA Institut für Arbeitsschutz der Deutschen Gesetzlichen Unfallversicherung** GESTIS
Stoffdatenbank: Stichwort n-Butanol. - Berlin : IFA, 2012e.
- IPCC Intergovernmental Panel on Climate Change** Fourth Assessment Report: Climate
Change 2007. - Genf : IPCC Intergovernmental Panel on Climate Change, 2007.
- IWO Institut für wirtschaftliche Ölheizung** Bioheizöl: Flüssiger Brennstoff mit Potential.
Brennstoffspiegel und Mineralölrundschau. - 2011. - 10. - S. 2-9.
- IWO Institut für wirtschaftliche Ölheizung** Bioheizöl: Wärme aus pflanzlichen
Rohstoffen. - Institut für wirtschaftliche Ölheizung, 2012. - 17. 12 2012. -
<http://www.oelheizung.info/brennstoff/heizoel/bioheizoel.html>.
- Jones D. T. und Woods D. R.** Acetone-Butanol Fermentation Revisited. Microbiological
Reviews. - 1986. - 4 : Bd. 50. - S. 484-524.
- Jurado M. [et al.]** Laccase detoxification of steam-exploded wheat straw for second
generation bioethanol. Bioresource Technology. - 2009. - 08 : Bd. 100. - S. 6378-6384.
- Kabel M. A. [et al.]** Standard Assays Do Not Predict the Efficiency of Commercial Cellulase
Preparations Towards Plant Materials. Biotechnology and Bioengineering. - 2006. - 1 :
Bd. 93. - S. 56-63.
- Kaparaju P. [et al.]** Bioethanol, biohydrogen and biogas production from wheat straw in a
biorefinery concept. Bioresource Technology. - 2009. - 1 : Bd. 100. - S. 2562-2568.
- Kappler O. G.** Systemanalytische Untersuchung zum Aufkommen und zur Bereitstellung von
energetisch nutzbarem Reststroh und Waldrestholz in Baden-Württemberg. -
Karlsruhe : Forschungszentrum Karlsruhe, 2008.
- Kazi K. [et al.]** Techno-Economic Analysis of Biochemical Scenarios for Production of
Cellulosic Ethanol. - Golden, Colorado : National Renewable Energy Laboratory, 2010.
- Kerdoncuff P.** Modellierung und Bewertung von Prozessketten zur Herstellung von
Biokraftstoffen der zweiten Generation. - Karlsruhe : Universitätsverlag Karlsruhe,
2008.
- Kleinert T.** Organosolv Pulping and Recovery Process. - United States Patent, 15. 06 1971.
- Klein-Marcuschamer D. [et al.]** Technoeconomic analysis of biofuels: A wiki-based
platform for lignocellulosic Biorefineries. Biomass & Bioenergy. - 2010. - 10. - S. 1914-
1921.

- Kloock J.** Betriebswirtschaftliche Input-Output-Modelle - -Ein Beitrag zur Produktionstheorie. - Wiesbaden : Gabler, 1969.
- Knorr D. [et al.]** Food application of high electric electric field pulses. Trends in Food Science and Technology. - 1994. - 3 : Bd. 5. - S. 71-75.
- Knorr D.** Recycling of Nutrients from Food Wastes -Sustainable Food Systems. - Westport : AVI Publishing Company Inc., 1983.
- Knorr D. und Angersbach A.** Impact of high-intensity electric field pulses on plant membrane permeabilization. Trends in Food Science and Technology. - 1998. - 5 : Bd. 9. - S. 185-191.
- Kölbel H. und Schulze J.** Projektierung und Vorkalkulation in der chemischen Industrie. - Berlin : Springer, 1982.
- Kootstra A. M. J. [et al.]** Comparison of dilute mineral and organic acid pretreatment for enzymatik hydrolysis of wheat straw. Biochemical Engineering Journal. - 2009. - 46. - S. 126-131.
- Kraemer K. [et al.]** Separation of butanol from acetone–butanol–ethanol fermentation by a hybrid extraction–distillation process. Computers and Chemical Engineering / Hrsg. 949-963. - 2011. - Bd. 35. - S. .
- Kruse A. und Vogel H.** Heterogene Katalyse in überkritischen Medien- 1. Kohlendioxid. Chemie Ingenieur Technik. - 2008a. - 6 : Bd. 79. - S. 707-720.
- Kruse A. und Vogel H.** Heterogene Katalyse in überkritischen Medien-Teil 2: Nah- und überkritisches Wasser. Chemie Ingenieur Technik. - 2008b. - 5 : Bd. 80. - S. 567-572.
- Kruse A. und Vogel H.** Heterogene Katalyse in überkritischen Medien-Teil 3: Sonstige. Chemie Ingenieur Technik. - 2008c. - 7 : Bd. 80. - S. 911-917.
- Kumar D. und Murthy G. S.** Impact of pretreatment and downstream processing technologies on economics and energy in cellulosic ethanol production. Biotechnology for Biofuels. - 2011. - 4:27. - S. 2-19.
- Kumar P. [et al.]** Methods for Pretreatment of Lignocellulosic Biomass for Efficient Hydrolysis and Biofuel production. Industrial and Engineering Chemical Research. - 2009. - 8 : Bd. 48. - S. 3713-3729.
- Kumar P. [et al.]** Pulsed Electric Field Pretreatment of Switchgrass and Wood Chip Species for Biofuel Production. Industrial and Engineering Chemical Research. - 2011. - 19 : Bd. 50. - S. 10996-11001.
- Küpper H.** Das Input-Output-Modell als allgemeiner Ansatz für die Produktionsfunktion in der Unternehmung. - München, 1977. - Bd. In Jahrbücher für Nationalökonomie und Statistik.

- Lang H. J.** Simplified Approach to Preliminary Cost Estimates. Chemical Engineering. - 1948. - 55. - S. 112-113.
- Lange S.** Systematische Untersuchung zu Schnellpyrolyse als Prozessschritt bei der Produktion von Synthesekraftstoffen aus Stroh und Waldrestholz. - Karlsruhe : Universitätsverlag Karlsruhe, 2007.
- Lawrence G. R.** Stage Gated Approval Processes - A Practical Way to Develop an Filter Capital Investment Ideas. Pharmaceutical Engineering. - 2008. - 2 : Bd. 28.
- Lawther J. M., Sun R. C. und Banks W. B.** Characterization of dissolved Lignins in Two-Stage Organosolv Delignification of Wheat Straw. Journal of Wood Chemistry and Technology. - 1996. - 4 : Bd. 16. - S. 439-457.
- Lee J.** Biological conversion of lignocellulosic biomass to ethanol. Journal of Biotechnology. - 1997. - 1 : Bd. 56. - S. 1-24.
- Lehmann D.** Neue Einblicke in den Gärungsstoffwechsel von Clostridium acetobutylicum. - Rostock : Universität Rostock, 2012.
- Leible L. [et al.]** Energie aus biogenen Rest- und Abfallstoffen: Bereitstellung und energetische Nutzung organischer Rest- und Abfallstoffe sowie Nebenprodukte als Einkommensalternative für die Land- und Forstwirtschaft – Möglichkeiten, Chancen und Ziele; - Karlsruhe : Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, 2003.
- Lenz T. und Moreira A.** Economic Evaluation of the Acetone-Butanol Fermentation. Industrial & Engineering Chemistry. - 1980. - Bd. 19. - S. 478-483.
- Leontief W. W.** The Structure of the American Economy, 1919-1939 : An Empirical Application of Equilibrium Analysis. - New York : White Plains, 1953.
- Lindedam J. [et al.]** Cellulosic ethanol: interactions between cultivar and enzyme loading in wheat straw processing. Biotechnology for Biofuels. - 2010. - 3 : Bd. 25.
- Liska M.** Untersuchung der brennstoffspezifischen Einflüsse auf die Betriebssicherheit von Ölheizungsanlagen : Dissertation. - Aachen, 2009.
- Liu J., Wu M. und Wang M.** Simulation of the Process for Producing Butanol from Corn Fermentation. Industrial & Engineering Chemistry. - 2009. - Bd. 48. - S. 5551-5557.
- Lohe B. und Futterer E.** Stationäre Flowsheet-Simulation / Hrsg. Schuler H.. - Weinheim : VCH, 1995. - Bd. Prozeßsimulation.
- Lu C.** Butanol Production from Lignocellulosic Feedstocks by Acetone-Butanol-Ethanol Fermentation with Integrated Product Recovery. - Collumbus, Ohio : The Ohio Stat University, 2011.
- Mach E.** Planung und Errichtung chemischer Anlagen. - Aarau : Sauerländer, 1971.
- MacLean H. und Spatari S.** The contribution of enzymes and process chemicals to the life cycle of ethanol. Environmental Research Letters. - 2009. - 1 : Bd. 4.

- Malherbe S. und Cloete T.** Lignocellulose biodegradation: Fundamentals and applications. Reviews in Environmental Science and Biotechnology. - 2002. - 2 : Bd. 1. - S. 105-114.
- MAN Diesel & Turbo** Richtpreisangebot. - Oberhausen, 2012.
- Mandali P. und Dalaly B.** Immobilization of Cellulase and Hemicellulases on Porous Glass Beads. Journal of ASTM International. - 2010. - 6 : Bd. 7.
- Mansur M. C. [et al.]** ABE Fermentation of sugar in Brazil. - Philadelphia : University of Pennsylvania, 2010.
- Mariano P. A. [et al.]** Energy Requirements for Butanol Recovery Using the Flash Fermentation Technology. Energy & Fuels.: ACS Publications, 2011. - 25. - S. 2437-2355.
- Marquardt W.** Modellbildung als Grundlage der Prozesssimulation. - Weinheim : VHC Verlag, 1995. - Bd. Prozeßsimulation.
- Matthes F.C.** CO₂-Vermeidungskosten – Konzept, Potentiale und Grenzen eines Instrumentes für politische Entscheidungen. - Freiburg : Ökoinstitut, 1998.
- Matthes W.** Funktionalistische Produktionstheorie / Hrsg. Kern W.. - Stuttgart : J. Weber, 1996. - Bd. Handwörterbuch der Produktionswirtschaft.
- Melin T. und Rautenbach R.** Membranverfahren. Grundlagen der Modul- und Anlagenauslegung. - Berlin, Heidelberg : Springer, 2007.
- Miller C. A.** New Cost Factors give Quick, Accurate Estimates. Chemical Engineering. - 1965. - 72. - S. 226-236.
- Mirschel S., Rollberg R. und Steinmetz U.** Technologische Fundierung der Produktionsfunktionen vom Typ D mit Hilfe von Verbrauchs- und Erzeugungsfunktionen. - Greifswald : Ernst-Moritz-Arndt-Universität Greifswald, 2003.
- MWV Mineralölwirtschaftsverband e.V.** Jahresbericht Mineralöl-Zahlen 2010. - Berlin : Ruth Printmedien GmbH, 2011. - S. 67-68.
- MWV Mineralölwirtschaftsverband** Statistiken-Preise. - MWV, 2012. - 03. 12 2012. - <http://www.mwv.de/index.php/daten/statistikenpreise/?loc=9>.
- Nichols W.T.** Capital Cost Estimating. Ind. Eng. Chem. - 1951. - 21 : Bd. 43. - S. 2295-2298.
- Nielsen A. M.** Senior Life Cycle Economist, Novozymes A/S -Persönliche Mitteilung an Haase, M.; veröffentlicht von Haase, M. (2012). - 2009.
- Nieves R. A. [et al.]** Technical Communication: Survey and analysis of commercial cellulase preparations suitable for biomass conversion to ethanol. World Journal of Microbiology & Biotechnology. - 2 1998. - Bd. 14. - S. 301-304.

- NREL National Renewable Energy Laboratory** Techno-Economic Analysis of Biochemical Scenarios for Production of Cellulosic Ethanol. - Colorado : National Renewable Energy Laboratory, 2010.
- Öko-Institut e.V.** GEMIS. - 2008. - <http://www.gemis.de/>.
- Öko-Institut** **Öko-Institut e.V.** GEMIS 4.4 Handbuch. - Darmstadt : Öko-Institut e.V., 2007.
- Otto Heinrich** Oberbauleiter BEKW Emsland. - 12. 12 2012.
- Oudshoorn A., van der Wielen L. A. M. und Straathof A. J. J.** Assessment of Options for Selective 1-Butanol Recovery from Aqueous Solution. Industrial & Engineering Chemistry Research. - 2009. - Bd. 48. - S. 7325-7336.
- PE International** GaBi Product Sustainability Performance. - Leinfelden-Echterdingen : PE International, 2012.
- Penkuhn T.** Umweltintegriertes Stoffstrommanagement in der Prozessindustrie: dargestellt am Beispiel der operativen Produktionsplanung der Ammoniaksynthese. - Frankfurt : Peter Lang, 1997. - Bde. Europäische Hochschulschriften - Reihe V; #2080.
- Peters M. S., Timmerhaus K. D. und West R. E.** Plant Design and Economics for Chemical Engineers. - New York : McGraw-Hill, 2004. - Bd. International Edition.
- Piechota R. B.** Untersuchungen zur nachhaltigen thermischen Nutzung fester regenerativer Energieträger. - Berlin : Logos, 2011.
- Pré Consultants** Putting the metrics behind sustainability. - Amersfoort : Pré Consultants, 2012.
- Purwadi R., Niklasson C. und Taherzadeh M. J.** Kinetic study of detoxification of dilute-acid hydrolyzates by $\text{Ca}(\text{OH})_2$. Journal of Biotechnology. - 11 2004. - Bd. 114. - S. 187-198.
- Putnoki H. und Hilgers B.** Große Ökonomen und ihre Theorien. - Weinheim : Wiley-VCH, 2007.
- Qurehsi N.** 33rd Symposium of Biotechnology for Fuels and Chemicals -Butanol productivity enhancers in wheat straw hydrolyzate: Employing potential of enhanced reaction rate. - Seattle, 2011.
- Qureshi N. [et al.]** Butanol production from wheat straw by simultaneous saccharification and fermentation using *Clostridium beijerinckii*: part I – batch fermentation. Biomass Bioenergy. - 2007a. - Bd. 32. - S. 168-175.
- Qureshi N. [et al.]** Effect of cellulosic sugar degradation products (furfural and hydroxymethylfurfural) on acetone-butanol-ethanol (ABE) fermentation using *Clostridium beijerinckii* P260. Journal of Food and Bioproducts Processing. - 2012a. - 7 : Bd. 90. - S. 533-540.

- Qureshi N. [et al.]** Energy-efficient recovery of butanol from model solutions and fermentation broth by adsorption. *Bioprocess and Biosystems Engineering*. - 2005. - 4 : Bd. 27. - S. 215-222.
- Qureshi N. [et al.]** Production of butanol (a biofuel) from agricultural residues: part I – use of barley straw hydrolysate [Artikel]. - 2010a. - Bd. 34. - S. 559-565.
- Qureshi N. [et al.]** Removal of fermentation inhibitors from alkaline peroxide pretreated and enzymatically hydrolyzed wheat straw: Production of butanol from hydrolyzate using *Clostridium Beijerinckii* in batch reactors. *Biomass and Bioenergy*. - 2008a. - Bd. 32. - S. 1353-1358.
- Qureshi N.** Agricultural residues and energy crops as potentially economical and novel substrates for microbial production of butanol (a biofuel). *CAB reviews: perspectives in agriculture, veterinary science, nutrition and natural resources*. - 2010b. - 5 : Bd. 59. - S. 1-8.
- Qureshi N.** Persönliche Mitteilung. - Email, 24. 05 2012b.
- Qureshi N. und Blaschek H. P.** Production of Acetone Butanol Ethanol (ABE) by a Hyper-Producing Mutant Strain of *Clostridium beijerinckii* BA101 and Recovery by Pervaporation. *Biotechnology Progress*. - 2008b. - 4 : Bd. 15. - S. 594-602.
- Qureshi N. und Blaschek H.P.** Butanol recovery from model solution/fermentation broth by pervaporation: evaluation of membrane performance. *Biomass and Bioenergy*. - 1999. - 2 : Bd. 17. - S. 175-184.
- Qureshi N. und Ezeji T.** Butanol, ‘a superior biofuel’ production from agricultural residues (renewable biomass): recent progress in technology. *Biofuels, Bioproducts and Biorefining*. - 2008c. - 4 : Bd. 2. - S. 319-330.
- Qureshi N. und Maddox I.** Reduction in Butanol Inhibition by Perstraction : Utilization of Concentrated Lactose/Whey Permeate by *Clostridium acetobutylicum* to Enhance Butanol Fermentation Economics. *Food and Bioproducts Processing*. - 2005. - 1 : Bd. 83. - S. 43-52.
- Qureshi N., Saha B. C. und Cotta M. A.** Butanol production from wheat straw by simultaneous saccharification and fermentation using *Clostridium beijerinckii*: part II – fedbatch fermentation. *Biomass Bioenergy*. - 2007b. - Bd. 32. - S. 176-183.
- Qureshi N. [et al.]** Production of butanol (a biofuel) from agricultural residues: part II – use of corn stover and switchgrass hydrolysates. *Biomass Bioenergy*. - 2010c. - 4 : Bd. 34. - S. 559-565.
- Qureshi N., Saha B. C. und Cotta M. A.** Butanol production from wheat straw hydrolysate using *Clostridium beijerinckii*. *Bioprocess and Biosystems Engineering*. - 2007c. - 6 : Bd. 30. - S. 419-427.

- Rakopoulos D.C. [et al.]** Investigation of the performance and emissions of bus engine operating on butanol/diesel fuel blends -Fuel. - 2010. - 10 : Bd. 89. - S. 2781-2790.
- Ranjan A. und Moholkar S.** Biobutanol: science, engineering, and economics. International Journal of Energy Research. - 2012. - 3 : Bd. 36. - S. 277-323.
- Ray M. [et al.]** Brown rot fungal early stage decay mechanism as a biological pretreatment for softwood biomass in biofuel production. Biomass and Bioenergy. - 2010. - 8 : Bd. 34. - S. 1257-1262.
- Reimelt S.** Erarbeitung eines Modells für die Planung und Gestaltung von Fabriken im Bereich der Getreide verarbeitenden Industrie. - Berlin : Eigenverlag, 2008.
- Remmers J.** Zur Ex-ante-Bestimmung von Investitionen bzw. Kosten für Emissionsminderungstechniken und den Auswirkungen der Datenqualität in meso-skaligen Energie-Umwelt-Modellen. - Karlsruhe, 1991.
- Rentz O. [et al.]** Integrierter Umweltschutz in der Metallerzeugung: Simulationsgestützte operative Produktionsplanung zur Optimierung metallurgischer Abfallverwertungsprozesse. - Karlsruhe : Universitätsverlag Karlsruhe, 2006.
- Richmond C. B. S.** Effects of ferulic acid and syringaldehyde on solvent production by Clostridium beijerinckii NCIMB 8052. - Columbus, Ohio : The Ohio State University, 2010.
- Richter M.** Modelle wissensintensiver Dienstleistungen. - Wiesbaden : Gabler, 2012.
- Richter W.** Handbuch für Heizungstechnik. - Berlin : Buderus, 2002.
- Rosgaard L [et al.]** Evaluation of Minimal Trichoderma reesei Cellulase Mixtures on Differently Pretreated Barley Straw Substrates. Biotechnology Progress. - 2007b. - 23. - S. 1270-1276.
- Rosgaard L. [et al.]** Effects of Substrate Loading on Enzymatic Hydrolysis and Viscosity of Pretreated Barley Straw. Applied Biochemistry and Biotechnology. - 2007a. - 143. - S. 27-40.
- Rudd D. F. und Watson C. C.** Strategy of Process Engineering. - New York : Wiley, 1968.
- Saha B.C. [et al.]** Dilute acid pretreatment, enzymatic saccharification and fermentation of wheat straw to ethanol. Elsevier. - 2005. - S. 3693-3700.
- Sattler K. und Kasper W.** Verfahrenstechnische Anlagen. Planung, Bau und Betrieb. - Weinheim, New York : Wiley-VCH, 2000.
- Schacht C., Zetzl C. und Brunner G.** From plant materials to ethanol by means of supercritical fluid technology. The Journal of Supercritical Fluids. - 2008. - 3 : Bd. 46. - S. 299-321.
- Schembra M.** Daten und Methoden zur Vorkalkulation des Anlagekapitalbedarfs von Chemieanlagen. - Berlin : TU Berlin, 1993b.

- Schembra M.** Schätzung der Investitionskosten bei der Prozessentwicklung. Chemie Ingenieur Technik. - 1993a. - 1 : Bd. 65. - S. 41-47.
- Schleef H. J.** Zur Techno-Ökonomischen Bewertung des gestuften Ausbaus von Kombikraftwerken. - Karlsruhe : Universität Karlsruhe, 1999.
- Schlegel H. G.** Allgemeine Mikrobiologie. - Stuttgart, New York : Georg Thieme Verlag, 1992.
- Schmidt A. und Thomsen A.** Optimization of wet oxidation pretreatment of wheat straw. Bioresource Technology. - 1998. - 2 : Bd. 64. - S. 139-151.
- Schmidt-Bleek F.** Wieviel Umwelt braucht der Mensch?. - Berlin : Birkhäuser, 1994.
- Schulmann F.** Stoffstrombasiertes Produktionsmanagement. Betriebswirtschaftliche Planung und Steuerung industrieller Kreislaufwirtschaftssysteme. - Berlin : Erich Schmidt Verlag, 2003.
- Schwanfelder W.** Internationale Anlagengeschäfte. Anbieterkonsortium, Projektabwicklung, Projektcontrolling. - Wiesbaden : Gable, 1989.
- Schwarze G.** Digitale Simulation. Konzepte - Werkzeuge - Applikationen. - Berlin : Akademie-Verlag, 1990.
- Schweyer H.E.** Capital Ratio Analyzed. Chem. Eng.. - 1952. - Bd. 59. - S. 164.
- Schwind H.** Kostenvorausberechnung von Apparaten und Anlagen - Möglichkeiten und Grenzen. Chemie Ingenieur Technik.: Wiley, März 1979. - 3 : Bd. 51. - S. 166-173.
- Seiffert M** Methodische Vorgehensweise zur Standortidentifikation und Planung der Biomassebereitstellung für Konversionsanlagen am Beispiel von Bio-SNG-Produktionsanlagen;. - Leipzig : Technische Universität Hamburg-Harburg, 2010.
- Shell** Hauswärme-Studie, nachhaltige Wärmeerzeugung für Wohngebäude. - Hamburg, 2011. - S. 6,30,54,69,70.
- Spengler T.** Industrielles Stoffstrommanagement: betriebswirtschaftliche Planung und Steuerung von Stoff- und Energieströmen in Produktionsunternehmen. - Berlin : Erich Schmidt, 1998.
- Stallworthy E. A.** The Viewpoint of a Large Chemical Manufacturing Company. The Chemical Engineer. - 1970. - S. 182-189.
- Statista** Entwicklung der Industriestrompreise in Deutschland in den Jahren 2000 bis 2011 (in Euro-Cent pro Kilowattstunde). - 2012. - 17. Juli 2012. - <http://de.statista.com/statistik/daten/studie/155964/umfrage/entwicklung-der-industriestrompreise-in-deutschland-seit-1995/>.
- Statistisches Bundesamt** Verdienste und Arbeitskosten. Jahr 2011. - Wiesbaden : Statistisches Bundesamt, 2012.

- Steele B. [et al.]** Enzyme Recovery and Recycling Following Hydrolysis of Ammonia Fiber Explosion-Treated Corn Stover. Applied Biochemistry and Biotechnology. - 2005. - 1-3 : Bd. 124. - S. 901-910.
- Steven M.** Produktionstheorie. - Wiesbaden : Gabler, 1998.
- Strauch U.** Modulare Kostenschätzung in der chemischen Industrie. - Berlin : Fakultät III – Prozesswissenschaften, 2008.
- StromStG § 3** Steuertarif. - 2012.
- Swana J. [et al.]** An Analysis of net energy production and feedstock availability for biobutanol and bioethanol. Bioresource Technology. - 2010. - 102. - S. 2112-2117.
- Szwaja S. und Naber J.** Combustion of n-butanol in a spark-ignition IC engine. Fuel. - 2010. - 7 : Bd. 89. - S. 1573-1582.
- Tapin S. [et al.]** Feruloyl Esterase Utilization for Simultaneous Processing of Nonwood Plants into Phenolic Compounds and Pulp Fibers. Journal of Agriculture and Food Chemistry. - 2006. - 4 : Bd. 54. - S. 3697-3703.
- Taylor J. H.** The Process Step Scoring Method for Making Quick Capital Estimates. Process and Engineering Economics. - 1977. - 2. - S. 259-267.
- Testo AG** Telefonat. - 20. 10 2011.
- Teymouri F. [et al.]** Optimization of The Ammonia Fiber Explosion (AFEX) Treatment Parameters for Enzymatic Hydrolysis of Corn Stover. Bioresource Technology. - 2005. - 18 : Bd. 96. - S. 2014-2018.
- Thomsen M. H., Thygesen A. und Thomsen A. B.** Identification and characterization of fermentation inhibitors formed during hydrothermal treatment and following SSF of wheat straw. Applied Microbiology and Biotechnology. - 2009. - 2 : Bd. 83. - S. 447-455.
- Thongchai S. [et al.]** Feasibility Study of Using High Butanol-Diesel Blends in Common Rail Engines -E-AEC-011365. - Chinag Mai, 2009.
- Thostrup L.** Marken - en stor solfanger. - Københavns Universitet, 11 2006. - 05. 12 2012. - http://www.life.ku.dk/forskning/online_artikler/artikler/marken_en_stor_solfanger.a.spx.
- Thrän D. und al. et** Globale und regionale Verteilung von Biomassepotenzialen. Status-quo und Möglichkeiten der Präzisierung. - verschiedene : Bundesministerium für Verkehr, Bau und Stadtentwicklung, 2011.
- TLL Thüringer Landesanstalt für Landwirtschaft** Düngung mit Presskuchen und Strohasche. Auswertung 14jähriger Versuchsergebnisse. - Jena : Thüringer Landesanstalt für Landwirtschaft, 2010.

- Tu M. [et al.]** Immobilization of b-glucosidase on Eupergit C for lignocellulose hydrolysis. Biotechnology Letters. - 2006. - 3 : Bd. 28. - S. 151-156.
- Tu M., Chandra R. P. und Saddler J. N.** Evaluating the Distribution of Cellulases and the Recycling of Free Cellulases during the Hydrolysis of Lignocellulosic Substrates. Biotechnology Progress. - 2007. - 2 : Bd. 23. - S. 398-406.
- UBA Umweltbundesamt** Bewertung in Ökobilanzen. Methode des Umweltbundesamtes zur Normierung von Wirkungsindikatoren, Ordnung (Rangbildung) von Wirkungskategorien und zur Auswertung nach ISO 14042 und 14043 (Version'99). - Berlin : UBA Umweltbundesamt, 1999.
- UBA Umweltbundesamt** Stickstoff - zu viel des Guten?. - Dessau-Roßlau : Umweltbundesamt, 2011.
- UFOP Union zur Förderung von Oel- und Proteinpflanzen e.V.** UFOP-Martkinformation Oktober 2012. - Berlin : UFOP, 2012.
- Umberto ifu Hamburg.** Umberto. - ifu Hamburg, 2012. - 25. 10 2012. - <http://www.ifu.com/de/>.
- Unbehauen R.** Systemtheorie. Eine Darstellung für Ingenieure. - München u.a. : Oldenbourg, 1983.
- USGS US Geological Survey** Mineral Commodity Yearbook 2012. - Reston, Virginia : U.S. Geological Survey, 2012.
- van der Merwe A. B.** Evaluation of Different Process Designs for Biobutanol Production from Sugarcane Molasses. - Stellenbosch : University of Stellenbosch, 2010.
- Van Gigch J. P.** System Design Modeling and Metamodeling. - Berlin : Springer, 1991.
- VDI Gesellschaft Konstruktion und Entwicklung** Angebotserstellung in der Investitionsgüterindustrie. - Düsseldorf : VDI-Verlag, 1983.
- VDI Verein Deutscher Ingenieure** Betriebswirtschaftliche Berechnungen für Investitionsgüter und Anlagen. - Düsseldorf : Beuth Verlag, 1996.
- VDI Verein Deutscher Ingenieure e.V.** VDI 4600: Kumulierter Energieaufwand (KEA). Begriffe. Berechnungsmethoden. - Düsseldorf : Beuth Verlag, 2012.
- Wannenwetsch Helmut** Integrierte Materialwirtschaft und Logistik. - Berlin : Springer, 2002.
- Wasserbetriebe Berlin** Tarife. - 2012. - 17. Juli 2012. - <http://www.bwb.de/content/language1/html/204.php>.
- Wasserscheid P. und Keim W.** Ionic Liquids - New "Solutions" for transition metal catalysis. Angewandte Chemie. - 2000. - 11 : Bd. 39. - S. 3772-3789.

- Weiten M.** Wissensbasierte Verwaltung von Forschungsergebnissen in den Prozesswissenschaften auf der Grundlage von Ontologien mit dem Schwerpunkt auf Modellentwicklung. - Berlin : Fakultät III - Prozesswissenschaften, 2009.
- Wietschel M.** Stoffstrommanagement. - Frankfurt am Main : Peter Lang, 2002.
- Williams R. Jr.** Sixth-Tenth Factor. Aids in Approximating Cost. Chem. Eng.. - 1947. - Bd. 54. - S. 124-125.
- Wilson G. T.** Capital Investment for Chemical Plant. Brit. Chem. Eng.. - 1971. - Bd. 16. - S. 931-934.
- Winton J. M.** Plant Sites. Chemical Week. - 1977. - 24. - S. 120.
- Wroth W. F.** Factors in Cost Estimating. Chemical Engineering. - 1960. - 67. - S. 204.
- Wu H. [et al.]** Acetone–butanol–ethanol (ABE) fermentation using *Clostridium acetobutylicum* XY16 and in situ recovery by PDMS/ceramic composite membrane. Bioprocess and Biosystems Engineering. - 2012. - 7 : Bd. 35. - S. 1057-1065.
- Wu M. [et al.]** Life-Cycle Assessment of Corn-Based Butanol as a Potential Transportation Fuel. - Argonne, Illinois, 2007.
- Zverlov V., Berezina O. und Velikodvorskaya G., Schwar, W.** Bacterial acetone and butanol production by industrial fermentation in the Soviet Union: use of hydrolyzed agricultural waste for biorefinery. Applied Microbiology and Biotechnology. - 2006. - 5 : Bd. 71. - S. 587-597.

Anhang A Abbildungen zu Versuchen

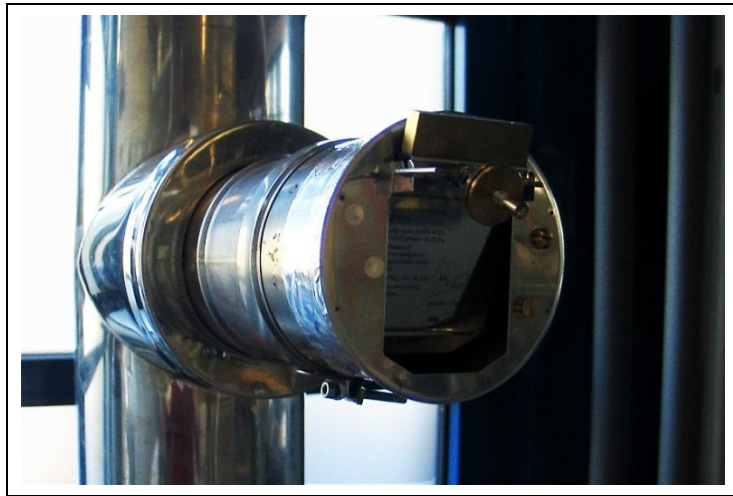


Abbildung 9-1: Verwendeter Zugbegrenzer am Abgasrohr

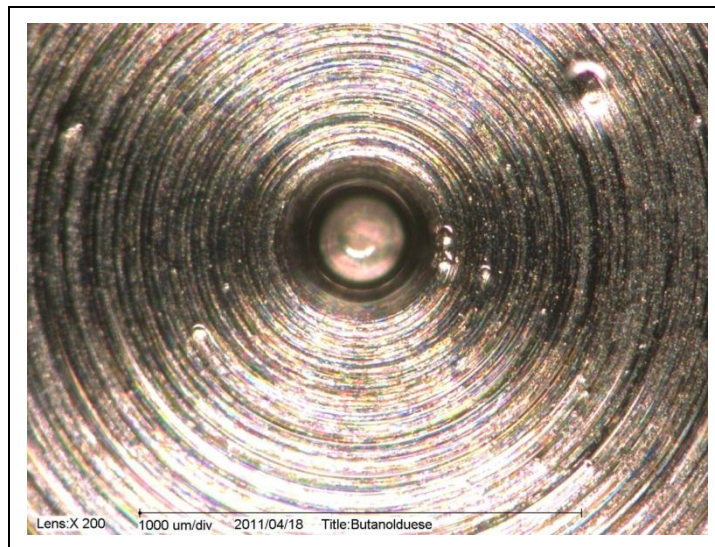


Abbildung 9-2: Eingesetzte Düse des Typs Fluidics 0,4 60° HF nach Beendigung aller Versuchsreihen. Die Düse weist weder Ablagerungen noch Verkokungen auf

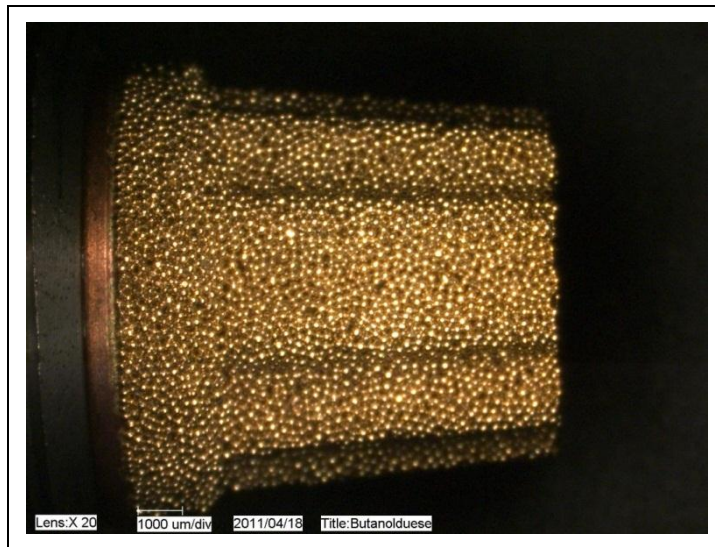


Abbildung 9-3: Eingesetzter Düsenfilter des Typs Fluidics 0,4 60° HF nach Beendigung aller Versuchsreihen. Der Filter zeigt keine Ablagerungen

Anhang B Investitionskostenabschätzung

Tabelle 9-1: Komponenten einer Modellanlage zur fermentativen Herstellung von n-Butanol im Basisszenario, Basiskapazität (BK), Zielkapazität (ZK), Basisjahr (BJ), Zieljahr (ZJ)

Apparate und Maschinen	Investition (BK, BJ)	BK	ZK	Einheit	BK/ZK	Exponent	Investition (ZK, BJ)	BJ	CEPCI BJ	Investition (ZK, ZJ)	Investition (ZK, ZJ)	Quelle
Aktivität 1							\$11.228.163			8.598.027 €		
Bandförderer	\$450.000	31,57	58,06	t h ⁻¹	1,8	0,6	\$648.645	2010	550,8	\$679.028	519.969 €	Kumar et al. (2011)
Schredder	\$639.000	31,57	58,06	t h ⁻¹	1,8	0,6	\$921.075	2010	550,8	\$964.219	738.356 €	Kumar et al. (2011)
Wärmetauscher 1	\$564.000	148,50	387,94	t h ⁻¹	2,6	0,78	\$1.192.776	2010	550,8	\$1.248.647	956.158 €	Kumar et al. (2011)
Hydrolisereaktoren	\$2.659.000	102,85	387,94	t h ⁻¹	3,8	0,6	\$5.897.380	2010	550,8	\$6.173.619	4.727.482 €	Klein-Marcuschamer et al. (2010)
Bandfilter	\$235.000	25,33	387,94	t h ⁻¹	15,3	0,6	\$1.208.189	2010	550,8	\$1.264.781	968.513 €	Kumar et al. (2011)
Neutralisierung	\$83.000	110,07	332,87	t h ⁻¹	3,0	0,71	\$182.094	2010	550,8	\$190.623	145.971 €	Kumar et al. (2011)
Hydrozyklon & Vakuumfilter	\$199.000	110,07	332,87	t h ⁻¹	3,0	0,39	\$306.396	2010	550,8	\$320.747	245.614 €	Kumar et al. (2011)
Wärmetauscher 2	\$76.000	147,36	382,80	t h ⁻¹	2,6	0,78	\$160.031	2010	550,8	\$167.527	128.285 €	Kumar et al. (2011)
Pumpen	\$99.000	148,50	382,80	t h ⁻¹	2,6	0,79	\$209.173	2010	550,8	\$218.971	167.678 €	Kumar et al. (2011)
Aktivität 2							\$13.557.815			10.381.971 €		
Gebäude (5)	\$2.350.620	2,40	14,74	MW	6,1	0,5	\$5.824.876	2010	550,8	\$6.097.719	4.669.361 €	(Aerzener Maschinenfabrik, 2012)
Fermenter (5)	\$3.865.000	19521	44133	m ³	2,3	0,71	\$6.897.331	2010	550,8	\$7.220.409	5.529.067 €	Kumar et al. (2011)
Kondensator ABE-Produkte	\$132.800	12,53	16,58	t h ⁻¹	1,3	0,68	\$160.665	1997	386,5	\$239.688	183.542 €	(NREL, 2010)
Aktivität 3							\$3.207.764			2.456.363 €		
Butanol Kolonne	\$752.122	14,71	16,58	t h ⁻¹	1,1	0,68	\$815.884	2010	550,8	\$854.101	654.032 €	Mansur et al. (2010)
Pumpe Butanol Kolonne	\$12.450	18,82	16,58	t h ⁻¹	0,9	0,68	\$11.423	2010	550,8	\$11.958	9.157 €	Mansur et al. (2010)
Aceton Kolonne	\$1.215.870	5,82	8,71	t h ⁻¹	1,5	0,68	\$1.599.173	2010	550,8	\$1.674.079	1.281.935 €	Mansur et al. (2010)
Pumpe Aceton Kolonne	\$12.450	5,82	8,71	t h ⁻¹	1,5	0,68	\$16.375	2010	550,8	\$17.142	13.126 €	Mansur et al. (2010)

Apparate und Maschinen Fortsetzung Aktivität 3	Investition (BK, BJ)			Einheit	BK/ZK	Exponent	Investition (ZK, BJ)			CEPCI BJ	Investition (ZK, ZJ)		Quelle
	BK	ZK					BJ				ZK, ZJ		
Ethanol Kolonne	\$177.000	17,30	4,58	t h ⁻¹	0,3	0,68	\$71.736	2010	550,8		\$75.097	57.506 €	Kumar et al. (2011)
Pumpe Ethanol Kolonne	\$12.450	5,82	4,58	t h ⁻¹	0,8	0,79	\$10.309	2010	550,8		\$10.792	8.264 €	Mansur et al. (2010)
Tanklager	\$340.000	11,09	12,50	t h ⁻¹	1,1	0,71	\$370.155	2010	550,8		\$387.493	296.725 €	Klein-Marcuschamer et al. (2010)
Molekularsiebe	\$1.155.000	8,24	0,53	t h ⁻¹	0,1	0,7	\$169.178	2010	550,8		\$177.103	135.617 €	Kumar et al. (2011)
Aktivität 4											\$44.380.810	33.984.846 €	
Verdampfer	\$8.488.350	80,00	313,52	t h ⁻¹	3,9	0,68	\$21.487.448	2011	585,7		\$21.153.598	16.198.482 €	GIG Karasek (2012)
Verbrennung & Boiler	\$7.312.000	18,10	27,79	t h ⁻¹	1,5	0,75	\$10.087.902	2010	550,8		\$10.560.429	8.086.706 €	Kumar et al. (2011)
Turbogenerator, Kondensator	\$19.588.500	60,00	28,22	MW	0,5	0,71	\$11.465.130	2009	521,9		\$12.666.783	9.699.658 €	(MAN Diesel & Turbo, 2012)
Nicht aufgelistete Positionen	\$9.075.000	32,36	49,93	t a ⁻¹	1,5	0,6	\$11.772.220	2010	550,8		\$12.323.642	9.436.896 €	Kumar et al. (2011)
Summe Apparate und Maschinen											\$84.698.194	64.858.101 €	