

Charakterisierung und techno-ökonomische Analyse
von Verwertungspfaden für Sauerstoff als
Nebenprodukt der Wasserelektrolyse

Abschlussarbeit zur Erlangung des akademischen Grades
Master of Science (M.Sc.)

Paul Schlegel

Matrikelnummer: 2045925

Karlsruhe, den 30.09.2022

Betreuer:

Prof. Dr. rer. nat. Frank Gauterin
Prof. Dr. rer. pol. Martin Wietschel

Angeleitet von:

Dipl.-Ing. Friedrich Weise
Dr.-Ing. Martin Gießler
Felix Deufel (M.Sc.)

Eidesstattliche Erklärung

Paul Schlegel

geb. am 26.12.1996 in Frankfurt am Main

Matrikelnummer: 2045925

Am Breitengrad 7

63303 Dreieich

Hiermit versichere ich, dass ich die von mir vorgelegte Arbeit selbstständig verfasst habe, dass ich die verwendeten Quellen, Internet-Quellen und Hilfsmittel vollständig angegeben habe und dass ich die Stellen der Arbeit, einschließlich Tabellen, Karten und Abbildungen, die anderen Werken oder dem Internet im Wortlaut oder dem Sinn nach entnommen sind, auf jeden Fall unter Angabe der Quelle als Entlehnung kenntlich gemacht habe.

Karlsruhe, den 30. September 2022

Paul Schlegel

Kurzfassung

Power-to-Gas-Anlagen sind in der Lage, durch Elektrolyse elektrische Energie in Form von grünem Wasserstoff zu speichern und stellen daher ein zentrales Element eines klimaneutralen Energiesystems dar. Um den Hochlauf einer klimaneutralen Wasserstoffinfrastruktur zu unterstützen, muss durch konkurrenzfähige Preise eine stabile Nachfrage für grünen Wasserstoff geschaffen werden. Die Verwertung des bei der Elektrolyse als Nebenprodukt anfallenden Sauerstoffs durch Verkauf oder stoffliche Nutzung in Industrieprozessen bietet das Potenzial die Gestehungskosten des Hauptprodukts Wasserstoff zu senken und Teile des Energiesystems und der Industrie zu dekarbonisieren. In dieser Arbeit wird eine ganzheitliche, techno-ökonomische Analyse der Nutzung von Elektrolysesauerstoff durchgeführt. Ziel der Arbeit ist es zu klären, ob und unter welchen Bedingungen die Nutzung von Sauerstoff die Wirtschaftlichkeit von Elektrolyseuren verbessern kann. Zu diesem Zweck wurden die Sauerstoffnutzung aus der Elektrolyse sowie konkrete Verwertungspfade in *MATLAB/Simulink* modelliert. Die Verwertungspfade wurden anschließend hinsichtlich minimaler Wasserstoffgestehungskosten optimiert, um das Potenzial der Sauerstoffnutzung zur Kostenreduktion der Wasserstoffherzeugung zu untersuchen. In einem Geoinformationssystem wurde eine räumliche Sauerstoffpotenzialanalyse ausgewählter Branchen in Deutschland durchgeführt. Durch die Ergebnisse der Simulation konnten zunehmende Sauerstoffgestehungskosten für die Technologien der Gasreinigung, Speicherung und des Transports nachgewiesen werden. Die Optimierungsergebnisse zeigen Reduktionen der Wasserstoffgestehungskosten durch die Sauerstoffnutzung in allen untersuchten Verwertungspfaden auf. Durch die Sauerstoffnutzung konnten weiterhin in allen Szenarien Energie- und CO₂-Einsparungen sowie Verbesserungen des Wirkungsgrades des Elektrolyseurs erzielt werden.

Abstract

Characterization and techno-economic analysis of use cases for oxygen as by-product of water electrolysis

Power-to-Gas systems are able to store electrical energy by producing green hydrogen through electrolysis and therefore represent a critical element of a climate-neutral energy system. To support the ramp-up of a climate-neutral hydrogen infrastructure, a stable demand for green hydrogen must be created by obtaining competitive prices. Utilization of oxygen as a by-product of water electrolysis through sale or use in industrial processes offers the potential to lower the levelized cost of the main product hydrogen and decarbonize parts of the energy system and industry. In this work, a holistic techno-economic analysis of use cases for oxygen as by-product of water electrolysis is performed. The aim of the work is to clarify whether and under which conditions the use of oxygen can improve the economics of electrolyzers. For this purpose, oxygen utilization from electrolysis as well as specific utilization pathways were modeled in *MATLAB/Simulink*. The utilization pathways were then optimized with respect to minimum levelized cost of hydrogen to investigate the potential of oxygen utilization to reduce the cost of hydrogen production. A spatial analysis of oxygen potential of selected industries in Germany was performed in a geographic information system. The simulation results demonstrate increasing levelized cost of oxygen for gas purification, storage and transportation technologies. The optimization results show reductions in levelized cost of hydrogen by utilization of by-product oxygen in all investigated utilization pathways. Oxygen utilization further provided energy and CO₂ emission savings as well as improvements in electrolyzer efficiency in all scenarios.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	IV
Tabellenverzeichnis	V
Abkürzungsverzeichnis	VI
1 Einleitung	1
2 Stand der Technik	3
2.1 Power-to-Gas	3
2.2 Wasserstofferzeugung durch Elektrolyse	7
2.2.1 Grundlagen der Wasserelektrolyse	7
2.2.2 PEM-Elektrolyse	8
2.3 Sauerstofferzeugung	10
2.3.1 Kryogene Luftzerlegung	10
2.3.2 Druckwechseladsorption	11
2.3.3 Sauerstofferzeugungstechnologien im Vergleich	11
2.4 Sauerstoffkonditionierung	12
2.4.1 Gasreinigung	12
2.4.2 Verdichtung	13
2.5 Sauerstoffspeicherung	14
2.5.1 Kryogene Speicherung	14
2.5.2 Druckspeicherung	15
2.6 Sauerstofftransport	15
2.6.1 Kryogener Transport	16
2.6.2 Trailertransport von gasförmigem Sauerstoff	16
2.6.3 Transport per Pipeline	16
2.7 Sauerstoffanwendungen und Bedarfe	17
2.7.1 Sauerstoff als Industriegas	17
2.7.2 Nutzung in Verbrennungsprozessen	18
2.7.3 Stahlindustrie	19
2.7.4 Glasindustrie	20
2.7.5 Zementindustrie	22
2.7.6 Zellstoff- und Papierindustrie	23
2.7.7 Abwasserbehandlung	24

2.7.8	Medizinischer Sauerstoff	26
2.8	Sauerstoff als Nebenprodukt der Elektrolyse	27
2.8.1	Ökonomische Betrachtung von Sauerstoff als Kuppelprodukt	27
2.8.2	Studien zur Sauerstoffnutzung aus der Elektrolyse	28
3	Modellierung	31
3.1	Methodik	31
3.1.1	Modellierungsumgebung MATLAB/Simulink	31
3.1.2	Simulation des techno-ökonomischen Modells	32
3.1.3	Einzieloptimierung und evolutionärer Algorithmus	33
3.1.4	Berechnung der Wasserstoffgestehungskosten	34
3.1.5	Berechnung der Sauerstoffgestehungskosten	34
3.2	Auslegung der technischen Komponenten	35
3.3	Simulationsszenarien A	46
3.3.1	Teilszenario A0	47
3.3.2	Teilszenario A1	47
3.3.3	Teilszenario A2	48
3.3.4	Teilszenario A3	49
3.4	Optimierungsszenarien B	50
3.4.1	Teilszenario B1: Bestehende LZA in Teillastbetrieb	51
3.4.2	Teilszenario B2: Dimensionierung einer neuen LZA in Volllastbetrieb	52
3.4.3	Teilszenario B3: Substitution von LOX-Anlieferungen	52
3.4.4	Betriebsweisen des Elektrolyseurs	53
3.4.5	Übersicht über Teilszenarien der Optimierung	54
3.4.6	Räumliche Sauerstoffpotenzialanalyse in GIS	55
4	Auswertung der Ergebnisse	57
4.1	Ergebnisse der Simulationsszenarien A	57
4.1.1	Teilszenario A0	57
4.1.2	Teilszenario A1	61
4.1.3	Teilszenario A2	62
4.1.4	Teilszenario A3	64
4.2	Ergebnisse der Optimierungsszenarien B	67
4.2.1	Teilszenario B1	68
4.2.2	Teilszenario B2	72
4.2.3	Teilszenario B3	76
4.2.4	Auswertung der Optimierungsergebnisse	78
4.3	Ergebnisse der GIS-Potenzialanalyse	85

5	Diskussion	88
5.1	Beurteilung der Ergebnisse	88
5.2	Beurteilung der Methodik	90
6	Fazit	92
6.1	Zusammenfassung	92
6.2	Ausblick	94
	Literaturverzeichnis	95
	Anhang	101

Abbildungsverzeichnis

2.1	Übersicht über die Nutzungsmöglichkeiten von Wasserstoff nach [2]	5
2.2	Schematischer Aufbau einer PEM-Elektrolysezelle nach [13]	9
2.3	Luftzerlegungsanlage eines führenden Gaseherstellers nach [19]	10
2.4	Oberirdischer Tank zur Speicherung von Flüssigsauerstoff nach [31]	14
2.5	Verteilung des Sauerstoffbedarfs in Österreich nach Branchen (2010) [38] . . .	17
2.6	Dezentrales PtG-Konzept mit Sauerstoffnutzung auf Kläranlagen nach [62] . .	30
3.1	Flussdiagramm des Simulations- und Optimierungsprozesses	32
3.2	Exemplarisches Ergebnisdiagramm der Optimierung	33
3.3	Lastabhängiger, spezifischer Energieverbrauch des modellierten Elektrolyseurs	36
3.4	Spezifische Investitionen eines Elektrolyseurs nach [76]	37
3.5	Spezifischer Energieverbrauch der modellierten Luftzerlegungsanlage	43
3.6	Spezifische Investitionen einer LZA in Abhängigkeit der Kapazität	44
3.7	Teilszenario A0: schematische Darstellung des modellierten PtG-Systems . . .	47
3.8	Teilszenario A1: schematische Darstellung des modellierten PtG-Systems . . .	48
3.9	Teilszenario A2: schematische Darstellung des modellierten PtG-Systems . . .	49
3.10	Teilszenario A3: schematische Darstellung des modellierten PtG-Systems . . .	50
3.11	Schematische Übersicht über die Teilszenarien der Optimierung	54
4.1	Ergebnisse der Voroptimierung hinsichtlich minimaler LCOH	58
4.2	Relative Kostenanteile der LCOH in Abhängigkeit der Elektrolyseleistung . .	59
4.3	Speicherkosten in Abhängigkeit der Speicherdauer für $P_{EL} = 1$ MW	62
4.4	Kostenanteile der technischen Komponenten der Speicheroptionen	63
4.5	Speicherkosten in Abhängigkeit der Speicherdauer für $P_{EL} = 10$ MW	64
4.6	Transportkosten in Abhängigkeit der Speicherdauer für $P_{EL} = 1$ MW	65
4.7	Transportkosten in Abhängigkeit der Distanz und Elektrolyseleistung	66
4.8	B1: Deckung des Sauerstoffbedarfes durch LZA, Elektrolyse und Speicher . .	69
4.9	B2-H ₂ : Verlauf des Wasserstoffspeicherdruckes	75
4.10	Optimierungsergebnisse der untersuchten Teilszenarien und Betriebsweisen . .	79
4.11	Ergebnisse der GIS-Potenzialanalyse	87

Tabellenverzeichnis

2.1	Technologien der Sauerstofferzeugung im Vergleich	12
3.1	Datenbasis zur Berechnung der Investitionen einer Sauerstoffreinigungsanlage	39
3.2	Konstanten und Annahmen zur Berechnung der Kompressorleistung	39
3.3	Annahmen zur Berechnung der Transportkosten	46
3.4	Übersicht über die Bedarfe und Preisannahmen der Teilszenarien	55
3.5	Übersicht über die Branchen und Annahmen der GIS-Potenzialanalyse	56
4.1	Optimierungsvariablen der Voroptimierung	60
4.2	Vergleich der Simulationsergebnisse aus Teilszenario A1 mit A0	61
4.3	Teilszenario B1: Optimierungsergebnisse in Abhängigkeit der Betriebsweise . .	68
4.4	Teilszenario B2: Optimierungsergebnisse in Abhängigkeit der Betriebsweise . .	73
4.5	Teilszenario B3: Optimierungsergebnisse in Abhängigkeit der Betriebsweise . .	76
4.6	Übersicht über Leistungskennzahlen der Optimierungsergebnisse	84
A1	Optimierungsvariablen der einzelnen Teilszenarien der Optimierung	101
A2	Datengrundlage und resultierende Potenziale der GIS-Potenzialanalyse	103

Abkürzungsverzeichnis

Abkürzungen

AEL	Alkalische Elektrolyse
AEMEL	Alkalische Membranelektrolyse
ANF	Annuitätenfaktor
BF	Hochofen
BHKW	Blockheizkraftwerk
BOF	Sauerstoffblasverfahren
BoP	Balance-of-Plant
BSB	Biochemischer Sauerstoffbedarf
CAPEX	Investitionsausgaben
CCS	CO ₂ -Abscheidung und Speicherung
CCU	CO ₂ -Abscheidung und Verwendung
EAF	Elektrolichtbogenofen
EE	Erneuerbare Energien
EU	Europäische Union
GIS	Geoinformationssystem
GPU	Gasreinigungsanlage
GuD	Gas und Dampf
LCOH	Wasserstoffgestehungskosten
LCOxy	Sauerstoffgestehungskosten
LOX	Flüssigsauerstoff
LZA	Luftzerlegungsanlage
MEA	Membrane Electrode Assembly
OEA	Sauerstoffangereicherte Luft
OPEX	Betriebskosten
PEM	Proton Exchange Membrane

PEMEL	PEM-Elektrolyse
PtG	Power-to-Gas
ppm	Parts-per-million
PTL	Porous Transport Layer
PSA	Pressure Swing Adsorption
PV	Photovoltaik
SNG	Synthetisches Erdgas
SOEL	Festoxid-Elektrolyse
TSA	Temperature Swing Adsorption
VLS	Volllaststunden
VPSA	Vacuum Pressure Swing Adsorption
WtE	Waste to Energy

Symbole

α_{Stack}	-	Kostenanteil des Stacks
Δ_{LCOH}	€/kg	Kostendifferenz der LCOH
η	%	Wirkungsgrad
κ	-	Isentropenexponent
d	km	Transportdistanz
D	h	Transportdauer
E	MWh	Energie
ΔG_R	kJ/mol	Freie Reaktionsenthalpie
ΔH_R	kJ/mol	Reaktionsenthalpie
H_i	MWh/t	Heizwert
i	€/MW, €/Nm ³ /h	Spezifische Investitionen
LT_{stack}	h	Stacklebensdauer
m	kg	Masse
\dot{m}	kg/h	Massenstrom
m_{cap}	kg	Kapazität eines LKWs
M	kg/mol	Molare Masse

n	Jahre	Lebensdauer
n_{trips}	-	Anzahl der benötigten Fahrten
n_{trucks}	-	Benötigte Anzahl an LKWs
p	Pa, bar	Druck
P	MW	Leistung
R	J/(mol · K)	Universelle Gaskonstante
ΔS_R	J/K	Reaktionsentropie
T	K, °C	Temperatur
t_{load}	h	Be- und Entladezeit
t_{run}	h	Laufzeit des Elektrolyseurs
t_u	h	Jährliche Auslastung der LKWs
U_{rev}	V	Reversible Zellspannung
U_{th}^0	V	Thermoneutrale Spannung
v_{ave}	km/h	Durchschnittsgeschwindigkeit
\dot{V}	Nm ³ /h	Normvolumenstrom
x_{grid}	€/MWh	Obere Preisgrenze des Netzstrombezugs
z	-	Zinsfuß

Chemische Formeln

CH ₄	Methan
CO	Kohlenstoffmonoxid
CO ₂	Kohlenstoffdioxid
H ₂	Wasserstoff
H ⁺	Proton
H ₂ O	Wasser
N ₂	Stickstoff
NO _x	Stickstoffoxid
O ₂	Sauerstoff
O ₃	Ozon

1 Einleitung

Motivation

Grüner Wasserstoff und dessen Syntheseprodukte werden in wissenschaftlichen Studien mit Zielsetzung der Klimaneutralität als ein zentrales Element des Energiesystems, der energiereichen Industrie und des Fernverkehrs behandelt [1]. Dies unterstreichen auch aktuelle politische Beschlüsse wie „Fit for 55“. Obwohl Elektrolyseure an Standorten außerhalb Deutschlands, die eine höhere Verfügbarkeit erneuerbarer Energien aufweisen, höhere Volllaststunden erreichen, ist die Sinnhaftigkeit der Integration dieser Anlagen in das deutsche Energiesystem wissenschaftlicher Konsens. Gründe hierfür sind die variable Anwendung der gewonnenen Energieträger in Prozessen, in denen eine direkte Stromnutzung schwer umsetzbar ist (Schifffahrt, Flugverkehr), das hohe Flexibilisierungspotenzial zur verstärkten Integration erneuerbarer Energien in das Energiesystem sowie die großskalige, nahezu verlustfreie Speicherung stofflicher Energie über einen Zeitraum von mehreren Tagen oder Monaten. Um die Etablierung einer Wasserstoffwirtschaft zu unterstützen, entwickelt das Fraunhofer-Institut für Solare Energiesysteme Simulationsmodelle zur Untersuchung von Wasserstoffherzeugungsanlagen, Infrastruktur und Versorgungsketten. Die Modelle reichen dabei von der Konzeption einer Wasserstoffherzeugungsanlage bis zur techno-ökonomischen Analyse und Optimierung internationaler Export- und Importketten.

Der Aufbau einer Wasserstoffinfrastruktur in Deutschland wird derzeit durch das Henne-Ei-Problem begrenzt: Solange keine zuverlässige Nachfrage für Wasserstoff mit geringen CO₂-Emissionen besteht, entwickelt sich kein Angebot - ohne zuverlässiges Angebot, keine Nachfrage. Einen Beitrag zum Hochlauf einer klimaneutralen Wasserstoffinfrastruktur könnte die Nutzung des als Nebenprodukt der Wasserelektrolyse anfallenden Sauerstoffs leisten. Die Verwertung des hochreinen Elektrolysesauerstoffs hat dabei das Potenzial durch Verkauf oder stoffliche Nutzung in Industrieprozessen die Herstellungskosten des Hauptprodukts Wasserstoff zu senken. Konkurrenzfähige Preise für grünen Wasserstoff können für die Entwicklung einer stabilen Nachfrage sorgen und somit Teile des Energiesystems und der Industrie dekarbonisieren. Sauerstoff ist mit einem weltweiten Verbrauch von ca. 500 Millionen Tonnen pro Jahr eines der am häufigsten benötigten Industriegase. Die konventionelle Erzeugung von Sauerstoff durch Luftzerlegungsanlagen ist energiereich und verursacht mitunter hohe Stromkosten und CO₂-Emissionen. Die Verwertung von Elektrolysesauerstoff kann daher Branchen mit Sauerstoffbedarf ökonomische sowie ökologische Anreize bieten und die Erzeugung von grünem Wasserstoff kostengünstiger gestalten. Der Einfluss der Sauerstoffnutzung auf die Wirtschaftlichkeit der Wasserstoffherzeugung durch die PEM-Elektrolyse wurde bisher

lediglich punktuell in Einzelfallbetrachtungen untersucht. Es gilt daher, den ökonomischen Einfluss modellbasiert in repräsentativen Anwendungsfällen zu quantifizieren, um universelle Aussagen über die Sinnhaftigkeit der Sauerstoffnutzung aus der Wasserelektrolyse abzuleiten.

Zielsetzung

Die Ergebnisse dieser Arbeit sollen Rückschlüsse auf das techno-ökonomische Potenzial der Sauerstoffnutzung aus der Elektrolyse liefern. Ein Schwerpunkt dieser Arbeit soll in der Erweiterung der bestehenden Modellbibliothek zur Simulation und Optimierung von Wasserstoffsystemen hinsichtlich der Gewinnung und Aufbereitung von Sauerstoff aus der Elektrolyse bestehen. Ziel der Abschlussarbeit ist es zu klären, ob, inwieweit und in welchen konkreten Anwendungsfällen eine Nutzung des Nebenprodukts Sauerstoff die Wirtschaftlichkeit von Elektrolyseuren verbessern kann. Hierfür soll die Sauerstoffnutzung und deren Einfluss auf die Elektrolyse techno-ökonomisch untersucht und konkrete Verwertungspfade für die Nutzung des Sauerstoffs lokalisiert werden. Insbesondere soll der potenzielle ökonomische Vorteil durch die Sauerstoffnutzung mittels Optimierung quantifiziert und die Bedingungen für eine kostenoptimale Wasserstofferzeugung aufgezeigt werden. Das in der Abschlussarbeit zu entwickelnde Modell zur techno-ökonomischen Analyse soll die ganzheitliche Untersuchung der Sauerstoffnutzung in verschiedenen, repräsentativen Verwertungspfaden ermöglichen und so über eine rein ökonomische, punktuelle Betrachtung eines einzelnen Anwendungsfalls hinausgehen.

Vorgehensweise

In dieser Arbeit wird eine ganzheitliche, techno-ökonomische Analyse der Nutzung von Sauerstoff als Nebenprodukt der Elektrolyse durchgeführt. Zu diesem Zweck werden zunächst die Ergebnisse der Literaturrecherche bezüglich Power-to-Gas-Systemen sowie der Erzeugung, Aufbereitung und Verwendung von Sauerstoff vorgestellt. Dabei werden diverse Branchen mit potenziellen Sauerstoffanwendungen beleuchtet und konkrete Verwertungspfade lokalisiert. Die bestehende Modellbibliothek in *MATLAB/Simulink* zur Simulation von Wasserstoffsystemen wird um die Modellierung der technischen Komponenten der Sauerstoffnutzung erweitert. Die technischen Komponenten der Wertschöpfungskette zur Sauerstoffnutzung sowie deren Einfluss auf die Elektrolyse werden simuliert und techno-ökonomisch untersucht. Anschließend werden die repräsentativen Verwertungspfade zur Sauerstoffnutzung aus der Elektrolyse modelliert und hinsichtlich minimaler Wasserstoffgesthungskosten optimiert, um Rückschlüsse auf das Potenzial zur Kostenreduktion der Wasserstofferzeugung zu ziehen. Basierend auf den Optimierungsergebnissen werden die Kostenstruktur und Leistungskennzahlen der Wasserstofferzeugung ermittelt. Abschließend wird eine räumliche Analyse der Sauerstoffpotenziale ausgewählter Branchen in Deutschland mithilfe eines Geoinformationssystems durchgeführt.

2 Stand der Technik

2.1 Power-to-Gas

Power-to-Gas (PtG) ist ein Speichersystem, in dem elektrische Energie in Form von gasförmigen Energieträgern gespeichert wird. Grundsätzlich wird aufgrund der unterschiedlichen Eigenschaften der Energieträger Wasserstoff (H_2) und Methan (CH_4) zwischen zwei verschiedenen PtG-Konzepten unterschieden [2]. Das PtG- CH_4 -System zeichnet sich durch den zusätzlichen Prozessschritt der Methanisierung (Sabatier-Prozess) aus, wobei der generierte Wasserstoff mit Kohlenstoffdioxid in die Produkte Methan und Wasser gewandelt wird. In dieser Arbeit soll ausschließlich das Speichersystem Power-to-Gas-Wasserstoff (PtG- H_2) betrachtet werden.

Power-to-Gas-Wasserstoff

Nach Sterner et al. bestehen Speichersysteme aus Einspeicher-, Speicher-, und Ausspeichertechnologien [2]. Die Einspeichertechnologien des PtG- H_2 -Systems umfassen die Verfahren der Wasserelektrolyse (AEL, PEMEL, AEMEL, SOEL). In Kapitel 2.2 wird die Technologie der Wasserelektrolyse zur Erzeugung von Wasserstoff als Einspeichertechnologie sowie die ihr zugrundeliegenden thermodynamischen Zusammenhänge näher erläutert. Der erzeugte Wasserstoff kann anschließend konditioniert und in flüssigem oder gasförmigem Zustand gespeichert und transportiert werden. Speicher- und Transporttechnologien des PtG- H_2 -Systems werden in den Kapiteln 2.5 und 2.6 vorgestellt. Ausspeichertechnologien des PtG- H_2 -Systems sind unter anderem die Brennstoffzelle, Verbrennungstechnologien wie Gasturbinen, GuD- und BHKW-Kraftwerke sowie die stoffliche Verwertung des Wasserstoffs.

PtG-Systeme zeichnen sich im Allgemeinen durch ein hohes Potenzial hinsichtlich ihrer Systemintegration aus, da vorhandene Infrastruktur genutzt und konventionelle Energieträger im Verkehrs-, Strom- und Wärmesektor substituiert werden können [2]. Das PtG- H_2 -System sowie der Energieträger Wasserstoff erlangten durch die fortschreitende Energiewende in Deutschland große Aufmerksamkeit und können in vielen Sektoren zur Dekarbonisierung beitragen. Laut einer Studie von Quaschnig [3] sind PtG-Systeme essenziell für die Stabilität der Elektrizitätsversorgung im zukünftigen Energiesystem, um den nötigen Speicherbedarf des Systems sicherzustellen. In Zeiten negativer Residuallast infolge von Stromüberschüssen durch fluktuierende Energien kann der Stromüberschuss für die Erzeugung von Wasserstoff über den Prozess der Wasserelektrolyse genutzt und die Energie so gespeichert werden. Die PtG-Speichertechnologie bietet somit die Möglichkeit der Lastflexibilisierung und übernimmt ne-

ben Batteriespeichern und weiteren Speichertechnologien potenziell Systemdienstleistungen, die derzeit überwiegend fossile Großkraftwerke durch bedarfsgerechte Energiebereitstellung erbringen [3]. In Zeiten positiver Residuallast, in denen die Nachfrage größer als das Stromangebot ist, kann der gespeicherte Wasserstoff in flexiblen Gasturbinen, Blockheizkraftwerken oder Brennstoffzellen energetisch genutzt und rückverstromt werden. Die PtG-Technologie stellt somit ebenfalls eine mögliche Option zur Erzeugungsflexibilität im zukünftigen Energiesystem mit hohem Anteil an erneuerbaren Energien (EE) dar.

Zwar erreichen Elektrolyseure mit erneuerbaren Energiequellen in Regionen außerhalb Deutschlands mit hoher Verfügbarkeit jener Energiequellen höhere Volllaststunden. Trotzdem erweist sich deren Integration in das deutsche Energiesystem im Sinne einer kostenoptimalen Systemtransformation als sinnvoll [1]. Neben den oben dargestellten Möglichkeiten zur Last- und Erzeugungsflexibilisierung können PtG-Produkte darüber hinaus in Anwendungen eingesetzt werden, in denen eine direkte Stromnutzung schwer umsetzbar ist. Beispiele hierfür sind Kraftstoffe für die Schifffahrt, den Flugverkehr oder den Schwerlastverkehr [1]. Anwendungen des Verkehrssektors, die schwer direkt elektrifizierbar sind, können mit Brennstoffzellen betrieben und somit indirekt elektrifiziert werden. Brennstoffzellenfahrzeuge bieten gegenüber batterieelektrischen Fahrzeugen Vorteile in der Reichweite und der Betankungsdauer, zeichnen sich jedoch durch eine 2,5-fach geringere Effizienz im Hinblick auf die Menge des benötigten Stroms und somit durch höhere Betriebskosten aus [3]. Ein Beispiel für eine indirekte Elektrifizierung des Personenverkehrs via Brennstoffzelle stellt die geplante Umstellung von dieselbetriebenen Regionalbahnen auf Brennstoffzellenzüge bei Frankfurt am Main dar [4].

Möglichkeiten zur Nutzung von Wasserstoff

Grundsätzlich kann der erzeugte Wasserstoff stofflich oder energetisch genutzt werden. Darüber hinaus kann die bereits oben erwähnte, energetische Nutzung ferner in die Verwendung in einer reinen Wasserstoffinfrastruktur und in die Verwendung in bestehender Gasinfrastruktur unterteilt werden [2]. Eine Übersicht über die Nutzungsmöglichkeiten von Wasserstoff stellt Abbildung 2.1 dar.

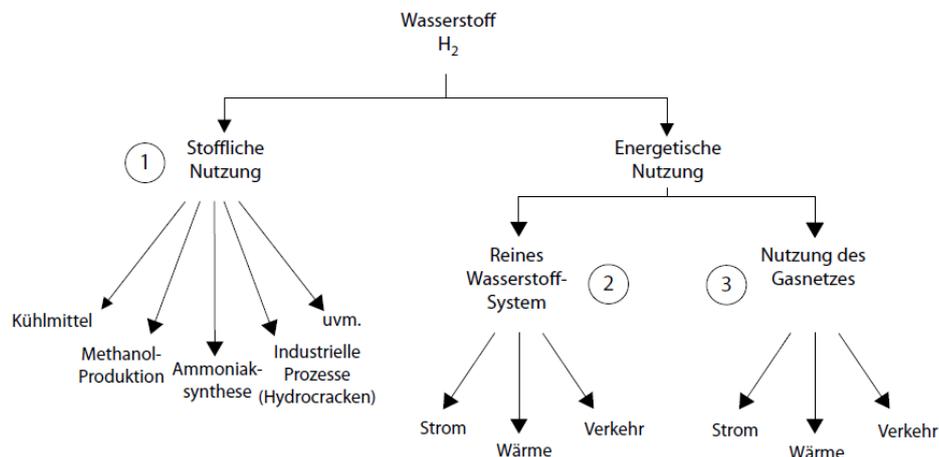


Abbildung 2.1: Übersicht über die Nutzungsmöglichkeiten von Wasserstoff nach [2]

Stoffliche Nutzung

Ein Beispiel für die stoffliche Nutzung von Wasserstoff stellt das Direktreduktionsverfahren zur Roheisenherstellung dar, welches das CO_2 -intensive und somit klimaschädliche Hochofenverfahren in der Eisen- und Stahlindustrie ersetzen könnte. Im Direktreduktionsverfahren wird Wasserstoff benötigt, um dem Eisenerz Sauerstoff zu entziehen und somit Roheisen zu erzeugen. Des Weiteren wird Wasserstoff in der chemischen Industrie als Grundstoff benötigt, wie zum Beispiel in der Ammoniak-synthese zur Herstellung von Düngemitteln, der Methanolsynthese oder in Raffinerieprozessen zur Herstellung von Kraftstoffen [5]. Dabei stellen die heutigen Anwender von Wasserstoff ihre Bedarfe zum größten Teil selbst her, sodass mit 4% nur eine relativ geringe Menge global gehandelt wird [6]. Die Produktion von Wasserstoff in Deutschland beläuft sich jährlich auf circa 19,3 Milliarden Normkubikmeter und entfällt hauptsächlich auf die großen Produzenten von Industriegasen [5]. Der heute produzierte Wasserstoff wird vorwiegend durch Dampfreformierung von Erdgas erzeugt [5].

Energetische Nutzung

Wird im Zuge der Energiewende und der Dekarbonisierung der Industrie zukünftig eine Wasserstoffwirtschaft aufgebaut, kann der Wasserstoff direkt in einer reinen Wasserstoffinfrastruktur genutzt werden. Der Aufbau einer Wasserstoffinfrastruktur in Deutschland wird derzeit durch das Henne-Ei-Problem begrenzt: Solange keine zuverlässige Nachfrage für Wasserstoff mit geringen CO₂-Emissionen besteht, entwickelt sich kein Angebot - ohne zuverlässiges Angebot, keine Nachfrage. Der industrielle Sektor eignet sich aufgrund des bereits bestehenden Wasserstoffbedarfs und des praktisch konstanten Verbrauchprofils im Jahresverlauf dabei am besten für eine Einführung von Wasserstoffinfrastrukturen [7].

Bei Nutzung des Wasserstoffs in bestehender Gasinfrastruktur fallen anfängliche Investitionen deutlich geringer aus, da vorhandene Technologie genutzt werden kann [2].

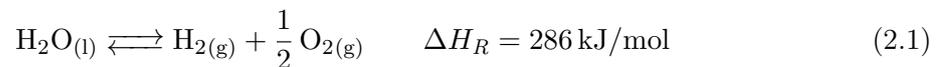
Es besteht die Möglichkeit, Wasserstoff begrenzt in das Erdgasnetz und in entsprechende Speicher einzuspeisen. Der gesetzlich maximal zulässige Anteil für die Beimischung von Wasserstoff in das Gasnetz liegt derzeit bei 5 Vol.-% [8]. Das eingespeiste Gasgemisch kann anschließend flexibel genutzt werden, etwa durch Rückverstromung, Wärmeerzeugung, im Verkehr oder durch stoffliche Nutzung. Es sei jedoch angemerkt, dass eine Beimischung von Wasserstoff in das Erdgasnetz im Sinne des Klimaschutzes nur bedingt sinnvoll ist, da die Emissionen bei gleichzeitig stark ansteigenden Gaspreisen nur geringfügig sinken und eine Wasserstoffnutzung durch private Haushalte durch Beimischung für das Erreichen der EU-Klimaziele nicht ausreicht [7].

Neben der Beimischung von Wasserstoff in das Erdgasnetz ist technisch auch eine zukünftige Umwidmung des Erdgasnetzes auf reinen Wasserstoff möglich. Einzelne Stränge von Erdgasleitungen, die oftmals aus mehreren parallelen Leitungen entlang der Trasse bestehen, können sukzessiv umgewidmet werden. So müssten in Deutschland etwa 600 km neue H₂-Pipelines gebaut werden, um über zwei parallel existierende Infrastrukturen für Erdgas und Wasserstoff zu verfügen [9]. Gleichzeitig wäre die Umwidmung der Gasverteilnetze jedoch mit großen Investitionen verbunden, die sich bis 2050 auf 3,1 bis 6,2 Milliarden Euro belaufen würden [9].

2.2 Wasserstofferzeugung durch Elektrolyse

2.2.1 Grundlagen der Wasserelektrolyse

Allgemein bezeichnet die Elektrolyse die Zersetzung eines festen, flüssigen oder schmelzflüssigen Ionenleiters (Elektrolyt) durch eine Redoxreaktion, welche von einem von außen angelegten elektrischen Strom erzwungen wird [10]. Eine Elektrolysezelle besteht aus zwei Halbzellen. Die Kathode bildet den Minuspol, an dem die Reduktion stattfindet. An der Anode, dem Pluspol, erfolgt die Oxidation. An der Kathode bildet sich Wasserstoff, während an der Anode Sauerstoff entsteht. Bei der Wasserelektrolyse wird Wasser mithilfe elektrischer Energie in seine Bestandteile Wasserstoff und Sauerstoff nach der in Gleichung 2.1 dargestellten Reaktionsgleichung zersetzt [10].



Die Spaltung von Wasser ist ein endothermer Prozess, dem Energie zugeführt werden muss. Bei Standardbedingungen (298,15 K und 101,325 kPa) beträgt der für die Wasserspaltung benötigte Energieaufwand $\Delta H_R^0 = 286 \text{ kJ/mol}$ und entspricht damit dem Brennwert von Wasserstoff [11]. Die Reaktionsenthalpie setzt sich nach der Gibbs-Helmholtz-Gleichung aus zwei Teilen zusammen:

$$\Delta H_R = \Delta G_R + T \Delta S_R \quad (2.2)$$

Die freie Reaktionsenthalpie (Gibbs-Energie) ΔG_R stellt die erforderliche Mindestenergie dar, die der Reaktion als elektrische Energie zugeführt werden muss. Bei Standardbedingungen entspricht sie dem Heizwert von Wasserstoff und beträgt $\Delta G_R^0 = 237,2 \text{ kJ/mol}$ [11]. Mithilfe der Faraday'schen Gesetze kann aus ΔG_R^0 die minimal erforderliche (reversible) Zellspannung bei Standardbedingungen errechnet werden. Sie beträgt $U_{rev}^0 = 1,23 \text{ V}$ [10, 11].

Das Produkt aus Temperatur T und Reaktionsentropie ΔS_R muss der Reaktion als thermische Energie zugeführt werden. Da bei Niedertemperaturverfahren (alkalische Elektrolyse und PEM-Elektrolyse) im Gegensatz zur Hochtemperaturelektrolyse keine thermische Energie aus der Umgebung genutzt werden kann, muss die fehlende Wärmeenergie zusätzlich als elektrische Energie zugeführt werden. In diesem Fall beschreibt die thermoneutrale Spannung die erforderliche Spannung zur Zersetzung des Wassers. Bei Standardbedingungen errechnet sich diese aus ΔH_R^0 mithilfe der Faraday'schen Gesetze (analog zu U_{rev}^0) und beträgt $U_{th}^0 = 1,48 \text{ V}$ [11]. Es sei angemerkt, dass die oben genannten Werte für Reaktionsenthalpien und Zersetzungsspannungen nur unter Standardbedingungen gelten, jedoch einer Temperatur- und Druckabhängigkeit unterliegen [11]. In der Praxis können die errechneten, idealen Zellspannungen aufgrund der Konzentrationsabhängigkeit der Spannung und auftretenden Verlustmechanismen jedoch nicht erreicht werden. Aufgrund von ohmschen Verlusten in der Zelle sowie an

Kontakten, kinetischen Verlusten und Verluste durch Massentransportlimitierungen erhöht sich die reale Zellspannung gegenüber der idealen Zellspannung.

Neben diversen sich in der Entwicklung befindenden Verfahren zur Wasserspaltung, sind die heute technisch relevanten Verfahren die alkalische Elektrolyse mit einem flüssigen, basischen Elektrolyten (AEL), die saure Elektrolyse mit einem polymeren Festelektrolyten (PEMEL), die alkalische Membranelektrolyse (AEMEL) und die Hochtemperaturelektrolyse mit einer Festoxidkeramik als Elektrolyt (SOEL) [11, 12]. Die zwei zuletzt genannten Technologien AEMEL und SOEL versprechen großes Potenzial, befinden sich derzeit jedoch noch im Entwicklungsstadium [12]. Obwohl die alkalische Elektrolyse von allen Technologien die längste Lebensdauer aufweist [11], sprechen vor allem das sehr begrenzte dynamische Verhalten bei Start- und Abschaltvorgängen sowie die geringe Stromdichte gegen diese Technologie. Insbesondere das adynamische Verhalten resultiert in einer mangelnden Kompatibilität der AEL mit fluktuierenden, erneuerbaren Energien, die in PtG-Konzepten zukünftiger Energiesysteme benötigt werden [12]. Aufgrund ihrer Marktreife, der hervorragenden Kompatibilität mit erneuerbaren Energien und ihrer Skalierbarkeit bis in den MW-Bereich soll in dieser Arbeit ausschließlich die Technologie der PEM-Elektrolyse betrachtet werden.

2.2.2 PEM-Elektrolyse

Die PEM-Elektrolyse (engl.: *Proton Exchange Membrane*) ist ein Niedertemperaturverfahren zur Erzeugung von Wasserstoff. Der schematische Aufbau einer PEM-Elektrolysezelle ist in Abbildung 2.2 dargestellt. Beide Halbzellen werden durch eine protonenleitende Membran getrennt, die als polymerer Festelektrolyt dient. Die Membran ist beidseitig mit einer Katalysatorschicht als Elektrode beschichtet. Auf der Anodenseite entsteht Sauerstoff, während kathodenseitig Wasserstoff erzeugt wird. Die Kombination aus Membran und Elektroden bildet die *Membrane-Electrode-Assembly* (MEA). Angrenzend an die Elektroden werden jeweils poröse Stromverteiler bzw. Transportschichten (*porous transport layer*, PTL) angepresst, die den elektrischen Strom an die Elektroden heranführen und abführen. Zusätzlich gewährleistet die poröse Struktur der Schicht die Versorgung der Anode mit Eduktwasser und den Abtransport der Produktgase an beiden Elektroden. Anschließend an die PTL sorgt das Flowfield für eine gleichmäßige Verteilung des Eduktwassers und den Abtransport der produzierten Gase. Das Flowfield ist häufig in elektrisch gut leitende und gasdichte Bipolarplatten integriert, die die elektrische Verbindung zwischen den einzelnen Zellen herstellen und so die Bildung eines Stacks aus mehreren Zellen ermöglichen. Alternativ können mehrlagige Streckmetalle als Flowfield verwendet werden [11].

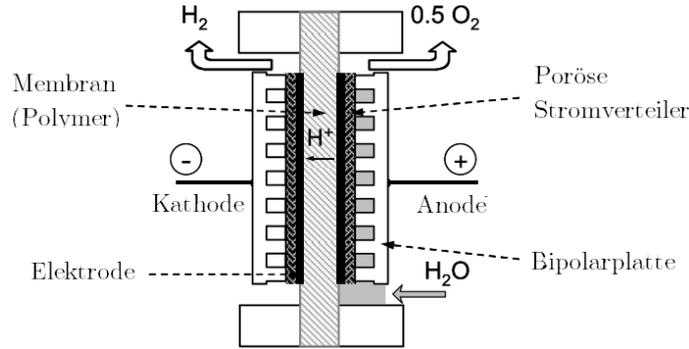
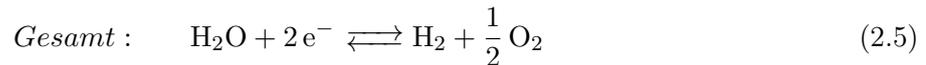
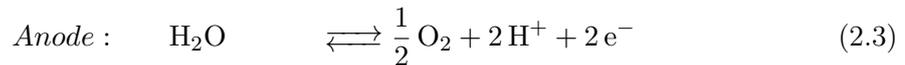


Abbildung 2.2: Schematischer Aufbau einer PEM-Elektrolysezelle [13]

Anodenseitig wird das zugeführte Eduktwasser bei Anlegen einer ausreichend hohen elektrischen Spannung in ein halbes Sauerstoffmolekül und zwei Wasserstoffprotonen gespalten (Gleichung 2.3). Die Protonen gelangen durch die protonenleitende Membran an die Kathode, wo sie mit zwei Elektronen zu einem Wasserstoffmolekül rekombinieren (Gleichung 2.4) [11].



Mit dem für die Energiewende erforderlichen Ausbau erneuerbarer Energien nimmt die wissenschaftliche und kommerzielle Relevanz der PEM-Technologie aufgrund ihrer Kompatibilität mit fluktuierenden Energien gegenüber anderen Elektrolyseverfahren zu. War die PEM-Elektrolyse vor einiger Zeit noch eine Nischenanwendung im unteren kW-Bereich, so sind mittlerweile Elektrolysestacks mit einer elektrischen Leistungsaufnahme bis ca. 1,5 MW am Markt erhältlich [14]. PEM-Elektrolyseure können durch ihre kompakte Bauweise hohe Stromdichten von ca. 2,0 A/cm² und somit hohe Leistungsdichten erreichen [11]. Aufgrund der vergleichsweise geringen thermischen Masse, erreicht ein PEM-Elektrolysestack innerhalb weniger Minuten seine Betriebstemperatur. Die PEM-Elektrolyse ermöglicht im Vergleich zur AEL weiterhin einen größeren Teillastbereich und zeichnet sich durch eine hohe Gasreinheit und Dynamik aus [13], die es erlaubt innerhalb von Zehntelsekunden auf Lastsprünge zu reagieren [15], was die geeignete Kopplung mit erneuerbaren Energien erklärt.

Nachteilig sind die derzeit deutlich höheren Kosten der Komponenten des PEM-Elektrolyseurs im Vergleich zur alkalischen Elektrolyse, die durch die protonenleitende Membran stark saure und somit potenziell korrosive Umgebung und die im Vergleich zur AEL weniger fortgeschrittene Kommerzialisierung der PEMEL [11, 16]. Der Betriebstemperaturbereich der PEM-Elektrolyse liegt bei 50-80 °C [11].

Der Betriebsdruck liegt typischerweise bei bis zu 50 bar und kann im Differenzdruckbetrieb entweder zwischen den Elektrodenseiten variieren oder im Gleichdruckbetrieb beidseitig iden-

tisch sein [17]. In dieser Arbeit sowie in allen ihr zugrundeliegenden Modellen soll ein PEM-Elektrolyseur im Gleichdruckbetrieb mit 35 bar und einer maximalen Betriebstemperatur von 65 °C betrachtet werden.

2.3 Sauerstofferzeugung

2.3.1 Kryogene Luftzerlegung

Sauerstoff wird in Deutschland zum überwiegenden Teil (ca. 90 %) durch kryogene Luftzerlegungsanlagen (LZA) nach dem Linde-Verfahren hergestellt [18]. Das Verfahren beruht auf dem Prinzip der Destillation, indem die unterschiedliche Siedetemperatur der Fraktionen ausgenutzt wird. Zunächst wird Umgebungsluft angesaugt, gefiltert und mithilfe des Hauptkompressors auf ca. 5 bar verdichtet. Anschließend wird die Luft von Verunreinigungen befreit und erneut komprimiert. Im Hauptwärmeübertrager wird die Luft im Gegenstromprinzip teilweise verflüssigt. Ein Teil des Luftstroms wird vor der Verflüssigung abgenommen und in einer Turbine entspannt, um dem Prozess zusätzlich Wärme zu entziehen. Die Trennung der Fraktionen geschieht in zwei aufeinanderfolgenden Rektifikationskolonnen mit unterschiedlichen Druckniveaus. Je nach Ausführung der LZA können entweder gasförmiger oder flüssiger Sauerstoff, Stickstoff sowie gegebenenfalls Edelgase produziert werden. Abbildung 2.3 zeigt eine großindustrielle Luftzerlegungsanlage eines führenden Gaseherstellers [19].



Abbildung 2.3: Luftzerlegungsanlage eines führenden Gaseherstellers [19]

Die kryogene Luftzerlegung ist ein großtechnischer und energieintensiver Prozess. Kryogene Luftzerlegungsanlagen weisen große Produktionskapazitäten auf und werden für die zentrale Sauerstoffproduktion durch Gasehersteller mit anschließendem Transport zum Kunden oder für die dezentrale Produktion, z.B. auf dem Werksgelände eines Industrieunternehmens (On-

Site), genutzt. Die Sauerstoffkapazität der Anlagen reicht von 4000 bis ca. 350 000 Nm³/h, wobei der Großteil der Anlagen in Deutschland eine Kapazität von ca. 50 000 Nm³/h aufweist [18]. Die kryogene Luftzerlegung ist das Verfahren der Wahl, wenn hohe Sauerstoffreinheiten erforderlich sind. Die Reinheit des Sauerstoffs beträgt hier mindestens 99,5 % [20].

Kryogene Luftzerlegungsanlagen weisen einen hohen spezifischen Energieaufwand von ca. 0,46 kWh/Nm³ auf [21], sodass die operativen Kosten der kryogenen Sauerstofferzeugung ebenso hoch ausfallen. Die geschätzte Anschlussleistung kryogener Luftzerlegungsanlagen in Deutschland beträgt rund 930 MW [22] und somit ca. 0,5 % der Anschlussleistung deutscher Kraftwerke am Strommarkt [23]. Luftzerlegungsanlagen stellen daher eine vielbetrachtete Option zur Lastflexibilisierung und Dekarbonisierung dar. Die Anlagen haben einen typischen Lastbereich von 75 bis 100 % und können durch technische Weiterentwicklungen auf 50 bis 100 % erweitert werden [22]. Mögliche Laständerungsraten der Anlagen liegen, bezogen auf die installierte Leistung, bei etwa 1 bis 3 % pro Minute [18].

2.3.2 Druckwechseladsorption

Sind die benötigten Mengen und Reinheiten geringer, kann der Sauerstoff via Druckwechseladsorption (engl.: *pressure swing adsorption, PSA*) bzw. Vakuumdruckwechseladsorption (engl.: *vacuum pressure swing adsorption, VPSA*) erzeugt werden. Das PSA- bzw. VPSA-Verfahren basiert auf der Fähigkeit bestimmter Materialien, sogenannter Molekularsiebe, im Überdruckbereich (6 bis 10 bar) bevorzugt Stickstoff zu adsorbieren. Als Adsorbens werden zumeist poröse Stoffe wie Zeolithe oder Aktivkohle eingesetzt. Die notwendige Regeneration des Adsorbens im Festbettreaktor kann durch Erhitzung (engl.: *temperature swing adsorption, TSA*) oder Druckreduzierung (PSA/VPSA) im Reaktorbett erreicht werden, sodass das Adsorbens im nächsten Zyklus wieder volle Adsorptionskapazität besitzt. Das Druckwechselverfahren wird dabei aufgrund von kürzeren Zykluszeiten bevorzugt [24]. Das VPSA-Verfahren weist im Vergleich zum PSA-Verfahren einen deutlich geringeren Energieverbrauch auf (siehe Tabelle 2.1) und wird daher präferiert. Die Reinheit des Sauerstoffs beträgt bei beiden Verfahren typischerweise 93 bis 95 % [24]. Die Sauerstoffkapazität des PSA- bzw. VPSA-Verfahrens liegt im Bereich von 300 bis 5000 Nm³/h [20].

2.3.3 Sauerstofferzeugungstechnologien im Vergleich

Tabelle 2.1 gibt einen Überblick über die Prozessparameter der oben vorgestellten Verfahren der konventionellen Sauerstofferzeugung und vergleicht diese mit der Erzeugung von Sauerstoff als Nebenprodukt der PEM-Wasserelektrolyse. Es sei angemerkt, dass der Energieverbrauch der Sauerstofferzeugung mittels PEM-Elektrolyse hier mit null angegeben wird, da Sauerstoff als kostenloses Nebenprodukt der Elektrolyse angesehen werden kann, bei dessen Erzeugung also keine zusätzliche Energie aufgewendet werden muss. Wird in der Realität allerdings die Nutzung des Nebenprodukts Sauerstoff angestrebt, sollten die Erzeugungskosten wertschöpfungsgetreu bilanziert werden. Eine ökonomische Betrachtung des Sauerstoffs als werthaltiges

Kuppelprodukt wird in Kapitel 2.8.1 diskutiert.

Es existieren neben den vorgestellten Technologien weitere, weniger gängige Verfahren zur Sauerstoffproduktion wie Membranprozesse, chemische Luftzerlegung und Ionentransport-Verfahren. Diese sollen in dieser Arbeit nicht betrachtet werden.

Tabelle 2.1: Technologien der Sauerstofferzeugung im Vergleich

	O₂-Kapazität	O₂-Reinheit	Energieverbrauch	Lastbereich
	[Nm ³ /h]	[Vol.-%]	[kWh/Nm ³]	[%]
LZA	4000-350000 [18]	> 99 [20]	> 0,46 [21]	50-100 [22]
PSA	300-5000 [20]	< 95 [24]	> 0,90 [21]	30-100 [20]
VPSA	300-5000 [20]	< 95 [24]	> 0,36 [21]	30-100 [20]
PEMEL	0-10000 ¹	> 99 [25]	0 ²	0-100 [2]

¹ Berechnung auf Basis der bisher größten, angekündigten Anlage mit 100 MW [26]

² Sauerstoff wird hier als kostenloses Nebenprodukt angesehen

2.4 Sauerstoffkonditionierung

2.4.1 Gasreinigung

Der an der Anode des PEM-Elektrolyseur entstehende Sauerstoff weist bereits vor der Gasreinigung eine hohe Reinheit von meist über 99 % auf [25]. Der Anodengasstrom verlässt den Elektrolyseur wasserdampfgesättigt und beinhaltet neben Sauerstoff und Wasser auch geringe Anteile an Wasserstoff, der nicht von der Anode auf die Kathodenseite diffundiert ist. Da Sauerstoffprodukte je nach Industrie genaue Anforderungen bezüglich der maximal zulässigen Verunreinigungen aufweisen, ist zumeist sowohl eine Trocknung des Sauerstoffs als auch eine Wasserstoffentfernung nötig. Wasserstoffentfernung und Trocknung werden meist in einer Gasreinigungsanlage integriert.

Für die Wasserstoffentfernung wird der Anodengasstrom erwärmt und in einem Reaktor katalytisch gereinigt. Die Katalysatorschüttung im Reaktor besteht meist aus Aluminiumoxid, die mit geringen Mengen Platin oder Palladium als Katalysatoren versetzt ist. An der katalytischen Oberfläche reagieren der Restwasserstoff und der Sauerstoff zu Wasser. Das Prozessgas und der Reaktor erwärmen sich durch die exotherme Reaktion auf Temperaturen über 100 °C. In einem Kondensator wird das Wasser in einem ersten Trocknungsschritt auskondensiert und der wasserstoffarme Gasstrom gekühlt. Das kondensierte Wasser wird über einen Kondensatabscheider im Anschluss abgeführt und kann erneut für die PEM-Elektrolyse genutzt werden. Im folgenden Schritt wird der feuchte Sauerstoffstrom im TSA-Verfahren adsorptiv getrocknet. Als Adsorbens werden Silicagele oder Molekularsiebe im Reaktorbett eingesetzt, die die Wassermoleküle aufgrund dort wirkender Van-der-Waals-Kräfte adsorbieren. Die Adsorptionskräfte sind für Sauerstoff wesentlich geringer als für Wasser, sodass der Sauerstoff am

Reaktorbett vorbeiströmen kann. Die Regeneration des Adsorbens erfolgt durch die externe Erhitzung des Reaktors, wodurch die Wassermoleküle vom Adsorbens gelöst und mit einem trockenen Regenerationsgasstrom abgeführt werden können. Um die Gasreinigung nicht zu unterbrechen, ist ein zweiter, redundanter Reaktor vorgesehen.

Mit Gasreinigungsanlagen können Verunreinigungen auf unter 10 ppm, in speziellen Anwendungen sogar auf unter 1 ppm begrenzt werden. Der Reinheitsgrad technischer Gase wird meist durch die Punkt-Notation spezifiziert. So erhält das technische Gas als Spezifikationszusatz zwei durch einen Punkt getrennte Zahlen. Die Zahl vor dem Punkt gibt die Anzahl der Neunen in der Prozentangabe der Gasreinheit an, während die zweite Zahl die erste von Neun abweichende Zahl angibt. *Sauerstoff 5.0* entspricht somit einem minimalen Reinheitsgrad von 99,999 %, während *Sauerstoff 3.5* eine Reinheit von 99,95 % bedeutet.

2.4.2 Verdichtung

Der Sauerstoff aus der PEM-Elektrolyse besitzt je nach Ausführung der Elektrolyse typischerweise einen Druck von bis zu 50 bar [17]. Der in dieser Arbeit betrachtete Elektrolyseur arbeitet im Gleichdruckbetrieb bei 35 bar. Wird der Sauerstoff anschließend an die Erzeugung nicht sofort genutzt, z.B. durch Einspeisung in einen Industrieprozess, wird der Sauerstoff für die spätere Nutzung gespeichert oder weitertransportiert. Die Speicherung des Sauerstoffs kann in gasförmigem oder in flüssigem Zustand erfolgen (siehe 2.5). Soll der Sauerstoff in gasförmigem Zustand gespeichert oder transportiert werden, muss der Sauerstoff auf höhere Drücke verdichtet werden, um eine effiziente Speicherung bzw. effizienten Transport zu ermöglichen. Liegt der erforderliche Druck des Transportmediums über dem des Speichers, muss zwischen Sauerstoffspeicher und -transport ebenfalls eine Verdichtung erfolgen. Auch im Falle des Transports per Sauerstoffpipeline muss der Sauerstoff auf den Betriebsdruck der Pipeline verdichtet werden, sollte dieser über dem Erzeugungsdruck der Elektrolyse liegen. Die geforderten Sauerstoffreinheiten implizieren meist auch Fettfreiheit des Sauerstoffs, sodass bei der Konstruktion des Kompressors auf Schmierstoffe wie Öl verzichtet werden muss. Zur Anwendung kommen daher meist trockenlaufende Kolben- oder Membrankompressoren. Die Verdichter werden meist mehrstufig ausgeführt, da sich die Verdichtungsarbeit durch die mehrstufige Verdichtung mit Zwischenkühlung reduziert und so die Energieeffizienz der Verdichtung erhöht wird. Für die mehrstufige, isentrope Verdichtung idealer Gase wird die isentrope Verdichtungsarbeit minimiert, wenn das Stufendruckverhältnis Ψ_{Stufe} aller Stufen gleich ist [27].

2.5 Sauerstoffspeicherung

2.5.1 Kryogene Speicherung

Im Falle der zentralen Produktion in großen Luftzerlegungsanlagen der Gasehersteller wird der Sauerstoff in der Regel in flüssiger Form erzeugt, gespeichert und zum Kunden transportiert. Die kryogene, flüssige Speicherung des Sauerstoffs bietet einige Vorteile. Zum einen wird der Sauerstoff zumeist bei tiefen Temperaturen bis -183 °C in Luftzerlegungsanlagen erzeugt, sodass der Sauerstoff ohnehin teilweise in flüssiger Form zur Verfügung steht und kaum energetischer Mehraufwand für Verflüssigung und Kühlung besteht. Zum anderen können durch die hohe Dichte des tiefkalt verflüssigten Sauerstoffs (engl.: *liquid oxygen*, *LOX*) im Vergleich zur Druckspeicherung deutlich größere Mengen gespeichert werden. So kann bei der Speicherung von Flüssigsauerstoff im Vergleich zur Druckspeicherung bei 200 bar etwa die vierfache Masse Sauerstoff gespeichert werden [28]. Die kryogene Speicherung wird daher vor allem bei der Erzeugung großer Mengen Sauerstoff genutzt. Flüssigsauerstoff wird in oberirdischen Tanks, wie in Abbildung 2.4 dargestellt, gespeichert. Um die Eigenverdampfung (engl.: *boil-off*) des flüssigen Sauerstoffs durch Wärmeeintrag und somit unerwünschte Druckanstiege sowie stoffliche Verluste weitestgehend zu verhindern, muss der Tank eine ausreichende, meist doppelwandige Vakuumisolierung aufweisen. Die Eigenverdampfung von flüssigem Sauerstoff in großen Tanks beträgt etwa 0,3 bis 0,5 % des Tankvolumens pro Tag [29]. Das Volumen oberirdischer Tanks für die Speicherung von Flüssigsauerstoff beträgt zwischen 3000 und 80000 Liter [30].



Abbildung 2.4: Oberirdischer Tank zur Speicherung von Flüssigsauerstoff [31]

Die Verflüssigung von Sauerstoff ist sehr energie- und kostenintensiv. Zusätzlich sind technische Lösungen zur Verflüssigung von gasförmig erzeugtem Sauerstoff aufgrund der vorwiegend kryogenen Erzeugung von Flüssigsauerstoff wenig verbreitet. Für die Erzeugung von Sauerstoff durch die Wasserelektrolyse bietet sich die Speicherung in flüssiger Form daher nicht an, da sich die erzeugten Mengen im kleinen bis mittleren Bereich bewegen und die Verflüssigung des Elektrolysesauerstoffs aufgrund der benötigten Energie für die Kühlung hohe Kosten verursachen würde.

2.5.2 Druckspeicherung

Soll der Sauerstoff gasförmig gespeichert bzw. transportiert werden, erfolgt meist eine Druckspeicherung in Druckgefäßen mit vorausgehender Verdichtung, um größere Mengen in handhabbaren Tankvolumina speichern zu können. So kann bei einer Verdichtung auf 200 bar im Vergleich zu gasförmigem Sauerstoff bei Umgebungsdruck etwa die 200-fache Menge gespeichert werden. Die Druckbehälter unterscheiden sich in ihrem geometrischen Volumen, dem verwendeten Werkstoff und ihren Betriebsdrücken. In größeren Mengen kann gasförmiger Sauerstoff in oberirdischen Tanks bei moderaten Drücken von etwa 80 bar gespeichert werden. Da die Speichereffizienz jedoch im Vergleich zur kryogenen Speicherung um den Faktor 4 geringer ist und bei großen Sauerstoffmengen das Volumen und somit die Materialkosten des Tanks hoch ausfallen, ist die Druckspeicherung großer Mengen in Tanks seltener.

In kleineren bis mittleren Mengen wird der Sauerstoff in Stahlflaschen unterschiedlicher Größe bei Betriebsdrücken von 200 oder 300 bar gespeichert und transportiert. Kleinere Mengen Sauerstoff sind auf dem Markt zumeist in diesen Stahlflaschen erhältlich. Gängige Volumina solcher Stahlflaschen sind 10, 20 und 50 Liter. Werden größere Mengen technischer Gase benötigt, können mehrere Stahlflaschen in Bündeln zusammengefasst werden und so als Speicher- oder Transportmedium fungieren. Stahlflaschenbündel werden häufig mit zwölf Flaschen à 50 Liter angeboten und stellen mit $0,6\text{ m}^3$ damit die größte flaschenbasierte Speichereinheit dar. Vorteilhaft ist der niedrige Preis für (gebündelte) Stahlflaschen, da diese ein Standardprodukt der Industrie darstellen. Ein weiterer Vorteil der Bündelspeicher ist die Kombination mehrerer Flaschenbündel zu einer großvolumetrischen, flexiblen Speichereinheit. Es sei darauf hingewiesen, dass mit steigendem Speicherdruck zwar größere Gasmengen gespeichert und spezifische Speicherkosten gesenkt werden können, gleichzeitig aber die Kompressionsarbeit und somit die Kosten für die Verdichtung auf hohe Drücke steigen.

2.6 Sauerstofftransport

Im Folgenden werden diverse Optionen des Sauerstofftransports vorgestellt. Die Wirtschaftlichkeit der Transporttechnologie hängt dabei von verschiedenen Faktoren ab, wie beispielsweise von der zu transportierenden Menge, der Transportdistanz sowie der Investitionsausgaben und Betriebskosten.

2.6.1 Kryogener Transport

Wird der Sauerstoff in großen Mengen produziert, schließt sich an die kryogene Speicherung aufgrund der hohen Transportkapazität fast ausnahmslos der kryogene Transport an. Dabei wird der meist zentral erzeugte, flüssige Sauerstoff in isolierten, kryogenen Behältern per Tankwagen zum Kunden transportiert. Ein kryogener Tank für den Transport per LKW fasst typischerweise etwa 10 bis 20 m³ und kann so bis zu 22 Tonnen Sauerstoff transportieren [32]. Auch beim Transport von Flüssigsauerstoff ist die Eigenverdampfung des Sauerstoffs zu berücksichtigen. Beim Abnehmer angelangt, wird der Sauerstoff entweder in Flüssigtanks gespeichert oder mittels luftbeheiztem Verdampfer zu Gas umgewandelt und anschließend genutzt oder in gasförmigem Zustand gespeichert.

2.6.2 Trailertransport von gasförmigem Sauerstoff

Gasförmig kann der Sauerstoff entweder in Stahlflaschenbündeln per Flaschenwagen oder in großen, stählernen Röhren, sogenannten *steel tubes*, transportiert werden. Auf einem Flaschenwagen können je nach Abmessung der Flaschenbündel und des Trailers mehrere Bündel transportiert werden. Bei einer Grundfläche von 0,77 m² pro Bündel (12 x 50 L) können pro Trailer etwa 20 Bündel und somit ca. 3400 kg Sauerstoff transportiert werden [28]. Auch durch den Trailertransport mehrerer gestapelter Stahlröhren können, ähnlich wie beim Transport von Erdgas, bei einem Speicherdruck von 200 bis 500 bar sehr große Mengen Sauerstoff transportiert werden. Im Gegensatz zum Flaschentransport verbleiben die Stahlröhren nach dem Transport meist auf dem Trailer und werden lediglich entleert.

2.6.3 Transport per Pipeline

Wird Sauerstoff kontinuierlich und in größeren Mengen benötigt, kann Sauerstoff per Pipeline wirtschaftlich transportiert werden. Sauerstoffpipelines sind vor allem für die Versorgung von großindustriellen Abnehmern wie Stahlwerke geeignet und werden meist mit Drücken von etwa 40 bar betrieben [33]. Die hohen Investitionen für den Bau von Pipelines können durch vergleichsweise geringe Betriebskosten und eine lange Lebensdauer kompensiert werden [34]. Beim Betrieb von Rohrleitungen ist auf den Druckabfall über die gesamte Pipelinelänge sowie auf maximale Strömungsgeschwindigkeiten des Sauerstoffs zu achten. Fällt der Druck in der Pipeline unter den zulässigen Minimaldruck, muss gegebenenfalls eine Zwischenverdichtung vorgenommen werden. Der Druckabfall in der Pipeline lässt sich mit der isothermen Eulerschen Gleichung für kompressible Medien abschätzen. Die Dimensionierung und Kostenabschätzung von Sauerstoffpipelines orientiert sich unter Berücksichtigung der stofflichen Kenngrößen an Erdgas- und Wasserstoffpipelines [34].

2.7 Sauerstoffanwendungen und Bedarfe

2.7.1 Sauerstoff als Industriegas

Sauerstoff ist mit einem weltweiten Verbrauch von ca. 500 Millionen Tonnen pro Jahr eines der am häufigsten benötigten Industriegase. Der Begriff Industriegas geht dabei im Gegensatz zum Begriff des technischen Gases mit keiner Spezifizierung der Stoffreinheit einher, sondern bezeichnet lediglich alle im großindustriellen Maßstab erzeugten oder in der Industrie eingesetzten Gase. Technische Gase werden in technischem Maßstab eingesetzt und weisen meist einen durch Normen spezifizierten, hohen Reinheitsgrad auf. Von Industriegasen sind weiterhin Lebensmittelgase und medizinische Gase abzugrenzen, die ausschließlich zu spezifizierten Zwecken und Reinheitsstufen verwendet werden. Preise für industriellen Sauerstoff rangieren je nach Reinheitsgrad und Abnahmemenge deutlich und liegen für einen Großabnehmer inflationsbereinigt in etwa bei 60 bis 80 €/t [35, 36].

Im Jahr 2015 betrug der Bedarf an Sauerstoff in Deutschland ca. 6580 Millionen Normkubikmeter pro Jahr [37]. Abbildung 2.5 zeigt die prozentuale Verteilung des Sauerstoffbedarfs in Österreich auf einzelne Branchen für das Jahr 2010 [38]. Die prozentuale Verteilung des Sauerstoffbedarfs in Österreich auf die einzelnen Branchen ist auf Deutschland nur bedingt übertragbar. Gleichwohl bietet die Verteilung aufgrund der ähnlichen Zusammensetzung der deutschen und österreichischen Industrielandschaften und der in beiden Ländern umsatzstarken Stahlindustrie einen groben Überblick über die Bedarfsverteilung in Deutschland. Besonders auffällig ist der große Anteil des Sauerstoffbedarfes, der auf die österreichische Stahlindustrie entfällt, nämlich ca. 54%. Die folgenden Unterkapitel geben einen Überblick über die Nutzung und Bedarfe von Sauerstoff in ausgewählten Anwendungen und Branchen.

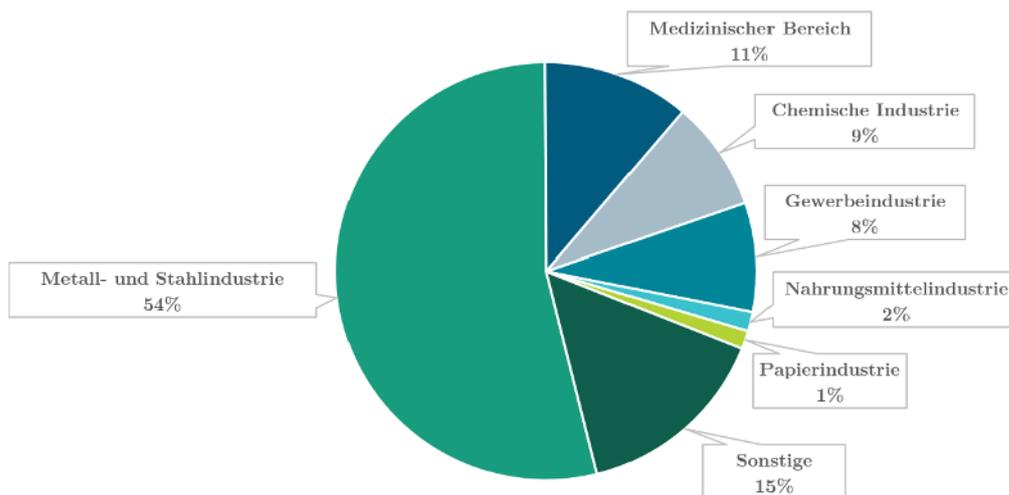


Abbildung 2.5: Verteilung des Sauerstoffbedarfs in Österreich nach Branchen (2010) [38]

2.7.2 Nutzung in Verbrennungsprozessen

In diversen Industrien wird Sauerstoff als Oxidationsmittel in Verbrennungsprozessen zur Effizienzsteigerung und zur Schadstoffminimierung verwendet [39]. Grundsätzlich werden drei Konzepte der Sauerstoffnutzung in Verbrennungsprozessen unterschieden, die im Folgenden kurz erläutert werden.

Luftanreicherung

Beim Verfahren der Luftanreicherung (engl.: *Oxygen Enriched Air, OEA*) wird der Verbrennungsluft reiner Sauerstoff beigemischt. Die Vermischung der Verbrennungsluft mit dem Sauerstoff geschieht dabei vor dem Kontakt der Luft mit dem Brennstoff. Der Sauerstoff wird typischerweise mithilfe eines Diffusors injiziert, um eine ausreichende Vermischung zu ermöglichen. Der Vorteil dieses Verfahrens liegt in der einfachen und kostengünstigen Adaption bestehender Vorrichtungen zur Verbrennung. Der Sauerstoffeintrag führt üblicherweise zu einer Verkleinerung der Flamme und höheren Flammentemperaturen, die für Brennstoffeinsparungen genutzt werden können. Limitiert wird der Sauerstoffeintrag durch die erhöhte thermische Belastung der Brennerkomponenten sowie durch die Zunahme der NO_x-Emissionen bei höheren Temperaturen. Günstige Verbrennungsverhältnisse ergeben sich bei einer Anreicherung der Luft von ca. 5% [39].

Sauerstoffflanzen

Beim Injizieren von Sauerstoff mithilfe von Sauerstoffflanzen wird der Sauerstoff beim Verbrennungsprozess direkt in die Flamme oder in die Brennkammer eingebracht. Vorausgehend findet die Vermischung des Brennstoffes mit der Verbrennungsluft sowie die Verbrennung des Luft-Brennstoff-Gemischs statt. Ein Vorteil dieser Methode besteht darin, dass keine Veränderungen am bestehenden Brennersystem vorgenommen werden müssen und die Sauerstofflanze jederzeit nachgerüstet werden kann. Lediglich eine Injektionsöffnung in der Brennkammer muss bei Nachrüstung vorgesehen werden. Ein weiterer Vorteil besteht in der Reduktion der NO_x-Emissionen durch die entstehende Luftstufung [39]. Es stellt sich in Abhängigkeit der Position der Lanze weiterhin ein Streckungseffekt der Flamme ein, welcher in einem verbesserten Wärmeübergang und einer geringeren thermischen Belastung des Brenners resultiert [39]. Anwendung finden Sauerstoffflanzen zum Beispiel in der Metallurgie und Stahlindustrie.

Oxyfuel-Verfahren

Das dritte, für Industrieprozesse relevanteste Verfahren zur Verwendung von Sauerstoff in Verbrennungsprozessen ist das Oxyfuel-Verfahren. Das Grundprinzip der Oxyfuel-Technologie ist die Verbrennung kohlenstoffhaltiger Brennstoffe mit reinem Sauerstoff anstelle von Luft, wodurch besonders hohe Flammentemperaturen erreicht werden können. Im Vergleich zu den vorher genannten Verfahren werden beim Oxyfuel-Verfahren die größten Mengen an Sauerstoff

verbraucht [39]. Das Verfahren stellt daher je nach Methode der Sauerstofferzeugung auch das kostenintensivste Verfahren dar. Das Oxyfuel-Verfahren bietet gleichzeitig jedoch das größte Potenzial zur Verbesserung des Verbrennungsprozesses. Durch den fehlenden Luftstickstoff enthält das entstehende Rauchgas im Wesentlichen Kohlendioxid und Wasserdampf, in der Theorie also keine NO_x-Emissionen. Dies ist für den Anlagenbetreiber vorteilhaft für das Erreichen gesetzlicher Vorgaben zur Reduktion von Abgasen. Das Verfahren stellt daher auch ein favorisiertes Verfahren zur Abscheidung von CO₂ aus Gasgemischen dar wie etwa bei der Abgasbehandlung in Großkraftwerken zur Erzeugung von Elektrizität oder Wärme.

In diversen Industrieprozessen wird das Oxyfuel-Verfahren aufgrund des Erreichens höherer Flammentemperaturen und geringen NO_x-Emissionen genutzt, etwa in sogenannten Oxyfuel-Wannen in der Glasindustrie zur Reduktion des Primärenergiebedarfs, in Oxyfuel-Brennern in der Aluminium- und Kupferindustrie zum Schmelzen der Metalle oder in fossilen Großkraftwerken zur Erleichterung der CO₂-Abscheidung.

Das Luft-Oxyfuel-Verfahren stellt als weiteres Verfahren eine Variation der drei vorher genannten Verfahren dar. Beim Luft-Oxyfuel-Verfahren werden Verbrennungsluft und Sauerstoff separat in den Brennstoffstrom injiziert.

2.7.3 Stahlindustrie

In Deutschland werden jährlich ca. 42 Millionen Tonnen Stahl erzeugt [40]. Die Stahlproduktion in Deutschland umfasst zwei Pfade: die Hochofenroute (Primärroute) und die Elektrolichtbogenroute (Sekundärroute). Bei der Primärerzeugung wird Rohstahl auf Basis von Eisenerz erzeugt, welches in Form von Pellets oder Sinterteilen im Hochofen (engl.: *blast furnace*, *BF*) mithilfe von Koks und Sauerstoff unter Energiezufuhr zu Roheisen (engl.: *hot metal*) reduziert wird. Anschließend wird dem Roheisen im Sauerstoffkonverter (engl.: *basic oxygen furnace*, *BOF*) Kohlenstoff entzogen und so zu Rohstahl oxidiert. In der Sekundärroute wird Rohstahl aus Stahlschrott im Elektrolichtbogenofen (engl.: *electric arc furnace*, *EAF*) erzeugt. Im Jahr 2015 wurden etwa 70 % des in Deutschland produzierten Rohstahls über die Primärroute erzeugt, während 30 % über die Sekundärroute aus Stahlschrott erzeugt wurden [40].

In beiden Verfahren werden große Mengen Sauerstoff als Prozessgas benötigt. In der Hochofenroute wird Sauerstoff zunächst im Hochofen eingesetzt, um Koks exotherm zu verbrennen und somit das eigentliche Reduktionsmittel Kohlenstoffmonoxid (CO) freizusetzen, das die Eisenoxide zu Roheisen reduziert und dabei zu Kohlenstoffdioxid (CO₂) reagiert [41]. In diesem ersten Schritt der Hochofenroute werden pro Tonne erzeugtem Rohstahl etwa 100 kg Sauerstoff benötigt [42]. Im zweiten Schritt wird das Roheisen im Sauerstoffkonverter durch Einbringen von Sauerstoff (Sauerstofffrischen) oxidiert und der Kohlenstoffanteil so auf unter 2 % reduziert. Auch hier reagiert der gelöste Kohlenstoff in der Schmelze mit dem eingeblasenen Sauerstoff zu CO₂. Der Druck des eingeblasenen, technisch reinen Sauerstoffs ($\geq 99,5\%$) beträgt dabei 12 bis 15 bar [43]. In diesem Schritt werden erneut 100 kg Sauerstoff pro Tonne Rohstahl benötigt, sodass bei der gesamten Stahlerzeugung via Hochofenroute ca. 200 kg

Sauerstoff pro Tonne Rohstahl benötigt werden [42].

In der Elektrolichtbogenroute wird Sauerstoff sowohl aus metallurgischen Gründen als auch zur Steigerung der Produktivität des Verfahrens eingesetzt. Zum einen wird Sauerstoff zur Dekarbonisierung der Schmelze und zum Entfernen von ungewünschten Elementen wie Phosphor und Silizium benötigt. Zum anderen erhöht das Einblasen von Sauerstoff in die Schmelze mithilfe von Sauerstofflanzen den Energieeintrag des Lichtbogens in die Schmelze („foamy slag-Technik“) und unterstützt so den Schmelzprozess [42]. Zusätzlich kann Sauerstoff zur Nachbehandlung der entstandenen Abgase von oben in den Lichtbogenofen injiziert werden [42]. Remus et al. geben den Sauerstoffbedarf im Elektrolichtbogenverfahren mit 40 kg pro Tonne Rohstahl an [42].

Anhand der in Deutschland pro Jahr produzierten Menge Stahl, der oben genannten Verteilung der Produktionsverfahren in Deutschland und der entsprechenden Sauerstoffbedarfe der Erzeugungspfade lässt sich der Sauerstoffbedarf der deutschen Stahlindustrie abschätzen. Nach eigenen Berechnungen beträgt dieser rund 4467 Mio. Nm³/a, was einem Anteil von 68 % des deutschen Sauerstoffbedarfs entsprechen würde. Die Stahlindustrie wäre somit der größte Abnehmer von Sauerstoff in Deutschland und überträfe damit sogar den Anteil der Stahlindustrie in Österreich von ca. 54 %.

Die Stahlindustrie ist weiterhin die Branche mit dem größten Anteil an Treibhausgasemissionen in der Industrie mit rund 30 % der industriellen Emissionen und rund 6 % der Gesamtemissionen in Deutschland [44]. Um die Stahlindustrie zu dekarbonisieren soll die Primärerzeugung in Deutschland zukünftig auf die Direktreduktion mit Wasserstoff umgestellt und der Anteil der Sekundärerzeugung durch die Elektrolichtbogenroute gesteigert werden. So können durch die Direktreduktion mit grünem Wasserstoff anstelle der Stahlerzeugung über die Hochofenroute bis zu 95 % der CO₂-Emissionen eingespart werden [45]. Laut eines Experten aus der Stahlindustrie, der für diese Arbeit befragt wurde, werden für die Stahlerzeugung durch Direktreduktion mit Wasserstoff weiterhin große Mengen Sauerstoff benötigt. Wird nun im Falle einer Umstellung auf dieses Verfahren ein Elektrolyseur zur Erzeugung von grünem Wasserstoff betrieben, kann bei der Stahlerzeugung eine duale, simultane Nutzung von Wasserstoff und dem Nebenprodukt Sauerstoff erfolgen, was die Wertschöpfung gegenüber der reinen Wasserstoffnutzung aus der Elektrolyse erhöhen würde. Der Effekt dieser dualen Nutzung von Wasserstoff und Sauerstoff als Nebenprodukt der Wasserelektrolyse soll in dieser Arbeit untersucht werden.

2.7.4 Glasindustrie

Die Glasindustrie ist ein weiterer Abnehmer von industriellem Sauerstoff. In Deutschland existieren ca. 90 Hüttenstandorte mit einer Schmelzleistung von mehr als 20 Tonnen Glas pro Tag [35]. Im Jahr 2020 wurden nach Angaben des Umweltbundesamtes 7,4 Mio. t Glas produ-

ziert [46]. Die Glasindustrie lässt sich grob in die Bereiche Behälterglas, Flachglas, Spezialglas, Wirtschaftsglas und Faserglas einteilen, wobei über 80 % der Gesamtproduktionsmenge auf Behälterglas und Flachglas entfallen [35].

Mit Temperaturen der Schmelzöfen von über 1400 °C ist die Glasherstellung ein energieintensives Verfahren, das zumeist mit fossilen Energieträgern (Erdgas, Erdöl) oder elektrisch beheizt wird [35]. Die Schmelzwannen, in denen das Gemenge (Siliziumoxid, Soda, Pottasche, Kalk, etc.) geschmolzen wird, haben typischerweise eine Kapazität von ca. 50 bis 700 Tonnen Glas pro Tag [35]. Die Vielzahl der produzierten Glasarten erfordert eine entsprechende Vielzahl an Schmelztechniken, die sich hinsichtlich der eingesetzten Energieträger, der Art der Beheizung, des Oxidationsmediums sowie der Methode der Wärmerückgewinnung unterscheiden [35]. Neben konventionell beheizten Glasschmelzwannen mit regenerativer oder rekuperativer Luftvorwärmung, Elektroöfen und Spezialausführungen kommen unter anderem Brennstoff-Sauerstoff-beheizte Schmelzaggregate (Oxyfuel-Wannen) zum Einsatz, die einer kontinuierlichen Sauerstoffzufuhr bedürfen (siehe Kapitel 2.7.2). Der Einsatz der Oxyfuel-Feuerung ist bisher auf ausgewählte Sparten der Glasindustrie begrenzt und findet vor allem in der Spezialglas-, der Faserglas- und bedingt in der Behälterglasindustrie Anwendung. Im Spezialglasbereich fand dabei eine nahezu vollständige Umstellung von konventioneller Beheizung auf Oxyfuel-Feuerung statt [35].

Die Substitution von Luft mit reinem Sauerstoff als Oxidationsmittel bietet in der Glasproduktion gleich mehrere Vorteile. Zum einen wird das CO₂ im Abgas nicht mit N₂ verdünnt, sodass eine Aminwäsche des Abgases entfallen kann [47]. Des Weiteren können NO_x-Emissionen um 80-95 % reduziert werden [47]. Der Primärenergieverbrauch kann um bis zu 50 % reduziert werden, wodurch die absoluten CO₂-Emissionen des Hüttenstandorts ebenfalls gesenkt werden können [35]. Die für den Bau einer Oxyfuel-Wanne entstehenden Investitionen sind als gering, häufig sogar geringer als konventionell befeuerte Wannen einzuschätzen [35]. Gleichzeitig kann durch die Oxyfuel-Technik die Kapazität der Schmelzöfen erhöht und die Produktqualität verbessert werden [47]. Sauerstoffbedarfe von Oxyfuel-Wannen zur Glasproduktion sind abhängig von der Schmelzleistung der Wanne und liegen im Bereich von ca. 600 bis 3000 Nm³/h. Eine mittelgroße Oxyfuel-Wanne mit einer Schmelzleistung von 200 t/d besitzt einen Sauerstoffbedarf von etwa 1750 Nm³/h [35]. Pro Tonne Glasschmelze werden somit rund 300 kg Sauerstoff benötigt.

Trotz dieser Vielfalt an positiven Effekten wird die Oxyfuel-Technik weltweit in ca. 100 und in Deutschland in nur ca. 5 Schmelzwannen eingesetzt [47]. Grund dafür sind vor allem die hohen Betriebskosten der Oxyfuel-Wanne durch den hohen Stromverbrauch der Sauerstofferzeugung durch Luftzerlegung, die den geringeren Investitionen im Vergleich zur konventionellen Wanne gegenüberstehen. Die Kosten für die elektrische Energie der Luftzerlegung bestimmen demnach maßgeblich die Wirtschaftlichkeit. Sauerstoff als Nebenprodukt der Elektrolyse kann daher eine lukrative Alternative zum Sauerstoff aus der Luftzerlegung bieten und die Umstel-

lung auf Oxyfuel-Feuerung begünstigen. Durch den Einsatz von Sauerstoff in der Glasindustrie können so bessere Glasqualitäten, Reduktionen der Schadstoffemissionen (CO_2 , NO_x , Ruß), eine deutliche Reduktion des (fossilen) Primärenergiebedarfs sowie eine kostengünstigere Produktion am Hüttenstandort erzielt werden.

Ähnlich wie die Stahlindustrie soll die Glasindustrie zukünftig durch den Einsatz von grünem Wasserstoff anstelle von fossilen Energieträgern, hauptsächlich Erdgas, dekarbonisiert werden. So hat sich beispielsweise der Spezialglashersteller Schott AG Klimaneutralität bis 2030 zum Ziel gesetzt und bereits erfolgreich die Glasherstellung mit Wasserstoff in einem Pilotprojekt getestet [48]. Bei Nutzung von grünem Wasserstoff aus der Wasserelektrolyse könnte in der Glasindustrie perspektivisch auch der Sauerstoff als Nebenprodukt im Schmelzprozess mit Oxyfuel-Wannen genutzt werden und so eine duale Nutzung der Produktgase ermöglichen. Da die Sauerstoffbedarfe bei Oxyfuel-Wannen in der Glasproduktion in der Regel geringer sind als die der Stahlproduktion, könnte potenziell eine vollständige Deckung des Sauerstoffbedarfs durch die (PEM-)Elektrolyse gewährleistet sein.

2.7.5 Zementindustrie

Die Herstellung von Zement ist ein äußerst energieintensiver Prozess, der ebenso mit hohen CO_2 -Emissionen behaftet ist. Etwa 2% der gesamten deutschen Treibhausgasemissionen werden durch die Zementherstellung verursacht [49]. Die Herstellung von Zement erfolgt in zwei wesentlichen Schritten. Zuerst wird das Rohmaterial, maßgeblich Kalkstein, bei Temperaturen von ca. 1450°C zu Zementklinker gebrannt [50]. Bei diesem Schritt entsteht der Großteil der CO_2 -Emissionen des Herstellungsprozesses. Anschließend wird der Zementklinker mit unterschiedlichen Zuschlagstoffen und Klinkerersatzstoffen (Gips, Kalkstein, Hüttensand, etc.) zu Zement vermahlen.

Um die Zementindustrie zu dekarbonisieren werden derzeit Anstrengungen unternommen, um die Energie- und Rohstoffeffizienz zu verbessern. Diese konzentrieren sich vor allem auf Konzepte zur Abscheidung und Nutzung (engl.: *carbon capture and utilization*, *CCU*) bzw. Speicherung (engl.: *carbon capture and storage*, *CCS*) von CO_2 im Zementwerk. Bei diesen Verfahren kann die Verwendung von Sauerstoff einen wesentlichen Beitrag zur Dekarbonisierung leisten.

In Zementwerken gibt es drei grundsätzliche Methoden zur Kohlenstoffabscheidung (CCU bzw. CCS): Das Pre-Combustion-Verfahren, das Post-Combustion-Verfahren und das Oxyfuel-Verfahren. Das Pre-Combustion-Verfahren zeichnet sich durch die Abtrennung von Kohlenstoff aus dem Brennstoff vor der Verbrennung aus. Bei der Post-Combustion-Technologie wird das entstehende CO_2 nach der Verbrennung aus dem Abgasstrom entfernt. Da beide Verfahren keinen reinen Sauerstoff benötigen, werden diese Verfahren nicht weiter betrachtet. Bei der Oxyfuel-Technik wird, ähnlich wie in der Glasindustrie, reiner Sauerstoff anstelle von Luft für die Verbrennung verwendet, sodass der entstehende Abgasstrom fast

ausschließlich aus CO_2 und Wasserdampf besteht. Es wird angestrebt, das CO_2 im Abgas auf bis zu 80 Vol.-% anzureichern [50], was die Abtrennung von CO_2 aus dem Abgas enorm vereinfacht [39]. Ein weiterer Vorteil der Verbrennung mit reinem Sauerstoff ist die steigende adiabatische Verbrennungstemperatur durch das Entfernen des thermischen Ballasts des Stickstoffs [39]. Dadurch kann bei der Verbrennung auf hochkalorische Brennstoffe wie Erdgas verzichtet und auch niedrigkalorische Brennstoffe wie Biomasse eingesetzt werden. Es sei jedoch angemerkt, dass derzeit kein Zementwerk mit Oxyfuel-Technologie im industriellen Maßstab betrieben wird. Im Jahr 2019 wurde der Start der Testphase zweier europäischer Zementwerke mit Oxyfuel-Technologie angekündigt [51]. Auch die Verbrennung mit sauerstoffangereicherter Luft (OEA) in der Zementindustrie ist ein erprobtes Verfahren und führt nachweislich zur Effizienzsteigerung und höheren Produktionsraten [52]. Der benötigte, vergleichsweise geringe Sauerstoffstrom für die Luftanreicherung kann dabei durch die Wasserelektrolyse gedeckt werden.

Der für die Oxyfuel-Technik benötigte Sauerstoff kann zum Beispiel aus der Luftzerlegung oder als Nebenprodukt aus der Wasserelektrolyse erzeugt werden. Die Klinkerproduktion mit reinem Sauerstoff als Oxidationsmittel besitzt einen Sauerstoffbedarf von $0,2 \text{ Nm}^3/\text{kg}$ Klinker [53]. Bei einer mittleren Anlage mit einer Tagesleistung von 3000 t Klinker pro Tag entspricht dies einem Sauerstoffbedarf von $25\,000 \text{ Nm}^3/\text{h}$. Ein derartig hoher Sauerstoffbedarf kann heute von keinem PEM-Elektrolyseur alleine gedeckt werden. Es wäre jedoch zukünftig möglich, dass die Wasserelektrolyse einen Teilstrom des Sauerstoffbedarfs eines Oxyfuel-befeuerten Zementwerks zur Erhöhung des CO_2 -Abscheidungspotenzials liefert.

2.7.6 Zellstoff- und Papierindustrie

Die Papierindustrie zählt zu den fünf energieintensivsten Industrien in Deutschland [54]. Trotz Effizienzsteigerung und erhöhter Altpapierquote sind die absoluten Emissionen von fossilem CO_2 zwischen 1995 und 2008 durch steigende Produktionsmengen auf 18,5 Mio. t gestiegen [54]. Die fossilen Emissionen entstehen hauptsächlich durch die Erzeugung von Elektrizität und Dampf und durch die Beheizung von Kalköfen mit fossilen Energieträgern wie Erdgas, Heizöl oder Kohle zum Brennen von Kalziumkarbonat. Ein großer Teil der in Form von Elektrizität und Dampf eingesetzten Energie wird jedoch häufig vor Ort aus dem Rohstoff Holz gewonnen und wird damit als klimaneutral angesehen [54].

Der Faserstoff zur Papierherstellung kann chemisch oder mechanisch aus Frischfasern oder durch die Aufbereitung von Altpapier erzeugt werden. Die zwei Hauptarten des Zellstoffverfahrens sind das saure Sulfit- und das alkalische Sulfatverfahren. Es existieren vielzählige Variationen zur Zellstoffherstellung, auf die in dieser Arbeit aufgrund der Vielfalt und Komplexität nicht weiter eingegangen werden soll. Ein wesentlicher Verfahrensschritt beider Verfahren ist das Entfernen des pflanzlichen Stoffes Lignin durch einen chemischen Aufschluss, bei dem das Lignin größtenteils wird. Lignin ist ein pflanzliches Bindemittel, das die Fasern in

der Pflanze zusammenhält und für die Papierherstellung aufgrund der Papierfärbung entfernt werden muss. Um die Faserstofffestigkeit zu erhalten, muss das Lignin auf selektive Weise durch Bleichvorgänge, z.B. mittels Chlorbleiche, Sauerstoff oder Ozon (O_3) entfernt werden.

Das Entfernen des Restlignins durch Sauerstoff wird Sauerstoffdelignifizierung genannt. Etwa die Hälfte des verbleibenden Lignins kann aus dem ungewaschenen Zellstoff durch Sauerstoffzugabe zur alkalischen Fasersuspension entfernt werden. Dabei werden Sauerstoff, oxidierte Weißlaug und Magnesiumsulfat in einem Reaktor mit dem Zellstoff vermischt [55]. Die Sauerstoffdelignifizierung wird auch als Sauerstoffbleiche bezeichnet und kann ein- oder zweistufig erfolgen. Vorteile der Sauerstoffdelignifizierung sind die Reduktion des Chemikalienbedarfs für das abschließende Bleichen, die Senkung der Kosten für Bleichchemikalien sowie die Reduktion der Schadstofffracht des Abwassers der Bleichanlage [55]. Der Sauerstoffbedarf für die Sauerstoffdelignifizierung kann mit etwa $11 \text{ Nm}^3/\text{t}$ Zellstoff angegeben werden [56].

Ein noch höherer Delignifizierungsgrad wird durch das Bleichen mit Ozon erreicht. Ozon kann durch stille elektrische Entladung in einem Sauerstoffstrom mittels Ozongeneratoren erzeugt werden. Aufgrund der hohen Investitionen für die Ozonerzeugung und die hohen Betriebskosten für die Sauerstoff- sowie für die Energieversorgung der Ozongeneratoren ist das Verfahren nicht sehr weit verbreitet [55].

Um die Dekarbonisierung der Papierindustrie zu erreichen, müssen zukünftig fossile Energieträger durch regenerative Energieträger substituiert werden. Ein Ansatz bietet die Implementierung der Wasserelektrolyse zur Erzeugung von Wasserstoff in Papiermühlen, um Wasserstoff als Energieträger für die Dampf- und Stromerzeugung sowie für die Befuerung der Kalköfen zu nutzen. Der bei der Wasserelektrolyse entstehende Sauerstoff kann simultan für die Sauerstoffdelignifizierung oder die Ozonproduktion für das Bleichen mit Ozon genutzt werden.

2.7.7 Abwasserbehandlung

Kläranlagen sind in Deutschland mit 4,2 TWh pro Jahr die größten Stromverbraucher im kommunalen Bereich und haben einen höheren Strombedarf als z.B. Schulen oder Straßenbeleuchtung [57]. Die biologische Reinigungsstufe ist neben der mechanischen und der chemischen Stufe eine der drei Hauptstufen von Kläranlagen und ist der größte Stromverbraucher kommunaler Kläranlagen. In der biologischen Reinigungsstufe, genauer im Belebungsbecken, findet der Abbau des biochemischen Sauerstoffbedarfs (BSB) durch Nitrifikanten (aerobe Bakterien) statt. Für ihre Stoffwechselaktivität benötigen die Mikroorganismen im Belebtschlamm Sauerstoff. In der Regel wird dafür Sauerstoff aus der Umgebungsluft genutzt, die durch eine Gebläsestation angesaugt wird. Das Gebläse ist der Hauptstromverbraucher der biologischen Reinigungsstufe und verursacht etwa 45-75 % des gesamten Stromverbrauchs einer Kläranlage [58]. Neben der Funktion der Sauerstoffversorgung für die Mikroorganismen erfüllen die Gebläse auch den Zweck, eine genügend große Turbulenz zu erzeugen, um die Biomasse aus

dem System austragen zu können.

Im Falle der luftbegasten Kläranlage muss zusätzlich zum Sauerstoff auch der Stickstoff in der Luft, die zu rund 79 % aus Stickstoff besteht, unnötigerweise angesaugt und komprimiert werden. Dadurch steigt der Energieverbrauch für die Komprimierung erheblich, ohne dass der angesaugte Stickstoff die Reinigungsleistung des Verfahrens verbessert. Hierin wird das Potenzial der Reinsauerstoffbegasung deutlich: der Energieaufwand für die Sauerstoffversorgung kann im Vergleich zur Luftbegasung deutlich reduziert werden [59]. Verfahrenstechnische Vorteile beim Eintrag von Reinsauerstoff in die Belebungsbecken der biologischen Reinigungsstufe im Vergleich zu luftbegasten Anlagen sind außerdem ein geringeres benötigtes Gasvolumen für die Versorgung der Mikroorganismen, die Verringerung von Geruchsemissionen aufgrund geringerer Aerosolbildung sowie Leistungssteigerung bei gleichem Beckenvolumen bzw. Verkleinerung des Belebungsbeckens bei gleicher Leistung [59, 60]. Die Versorgung der Mikroorganismen mit Sauerstoff kann ebenso durch den zusätzlichen Schritt der Ozonierung erfolgen. Aufgrund des hohen Energieaufwandes für die Erzeugung des Sauerstoffs durch Luftzerlegung konnte der Einsatz von Reinsauerstoff bisher nur in Gebieten mit temporären Frachterhöhungen wie Weinbau- oder Tourismusgebieten wirtschaftlich sinnvoll realisiert werden [61]. Bei der Reinsauerstoffbegasung ist weiterhin zu beachten, dass der eingebrachte Reinsauerstoffstrom zur hydraulischen Umwälzung des Belebungsbeckens ausreicht. Dies konnte in Studien nicht nachgewiesen werden [61]. Gegebenenfalls muss daher zusätzlich ein Aggregat zur Durchmischung des Beckens installiert werden.

Um den Einsatz von Reinsauerstoff in Kläranlagen ökonomisch zu gestalten, müssen die Kosten für die Sauerstoffversorgung im Vergleich zur Luftzerlegung möglichst reduziert werden. Eine Option zur Reduzierung der Sauerstofferzeugungskosten bietet die (PEM-)Wasserelektrolyse. Unter Nutzung des erzeugten Wasserstoffs, entweder durch Verkauf oder durch stoffliche bzw. energetische Nutzung, kann der Sauerstoff als Nebenprodukt in der biologischen Reinigungsstufe eingesetzt werden.

Auch im Zuge der vielzitierten Sektorkopplung kann die Elektrolyse-Technologie in Kläranlagen eingesetzt werden. Aufgrund der gleichmäßigen räumlichen Verteilung kommunaler Kläranlagen in Deutschland, wobei sich Standortwahl und Kapazität der Anlagen hauptsächlich nach der Bevölkerungsdichte der Regionen richten, bieten Kläranlagen einen hervorragenden Standort für die Sektorenkopplung. So können Elektrolyseure, die in Kläranlagen errichtet werden, in Zeiten negativer Residuallast (Stromüberschuss) Wasserstoff erzeugen und durch Rückverstromung (Brennstoffzelle, Wasserstoffmotor) ebenso positive Regelleistung zur Verfügung stellen. Der produzierte Wasserstoff kann zu Mobilitätszwecken auf kommunaler Ebene, z.B. im Personennahverkehr, in Müllfahrzeugen oder in der Fahrzeugflotte des Kläranlagenpersonals, genutzt werden oder gewinnbringend verkauft werden. Der als Nebenprodukt erzeugte Sauerstoff kann hingegen in den Belebungsbecken der biologischen Reinigungsstufe eingesetzt werden, um so die Energiekosten für das Gebläse

zu sparen.

Marktanalysen haben gezeigt, dass ein ausreichendes Interesse und ein potenzieller Bedarf für die Anwendung von Reinsauerstoff existiert. Die meisten Anwendungen bewegten sich dabei in einem Leistungsbereich von ca. 350 bis 1400 Nm³/h [59]. Eine typische Kläranlage mittlerer Ausbaugröße von 48.000 Einwohnerwerten besitzt beispielsweise einen mittleren Sauerstoffbedarf von ca. 355 Nm³/h [62]. Anwendungen im unteren bis mittleren Leistungsbereich könnten in Zukunft durch die PEM-Elektrolyse gedeckt werden. So erzeugt der heute größte PEM-Elektrolyseur (10 MW) unter Vollast ca 800 Nm³/h [63]. Studien zur Implementierung von integrierten PtG-Konzepten zur simultanen Wasserstofferzeugung und Sauerstoffnutzung in der biologischen Reinigungsstufe von Kläranlagen werden in Kapitel 2.8.2 vorgestellt.

2.7.8 Medizinischer Sauerstoff

Sauerstoff wird ebenfalls in großen Mengen in der Humanmedizin als therapeutisches Gas eingesetzt. Dies verdeutlichte nicht zuletzt die zum Zeitpunkt des Anfertigens dieser Arbeit herrschende COVID-19-Pandemie, in der medizinischer Sauerstoff als lebensrettendes und gleichzeitig knappes Arzneimittel galt. Insbesondere in Ländern des globalen Südens wie Indien und Brasilien herrschte großer Mangel an Sauerstoff durch die Pandemie. So lag der tägliche Bedarf an medizinischem Sauerstoff in Indien 2021 bei etwa 11,8 Millionen Normkubikmetern [64].

Medizinischer Sauerstoff wird sowohl in der Notfallmedizin als auch im privaten Bereich zur Behandlung von akutem Sauerstoffmangel (Hypoxie), von chronischen Atemwegs- und Lungenerkrankungen und bei Cluster-Kopfschmerzen eingesetzt [65]. Die Erzeugung von medizinischem Sauerstoff erfolgt aufgrund der hohen erforderlichen Reinheit in der Regel zentral durch Luftzerlegungsanlagen und anschließende Aufbereitung. Der medizinische Sauerstoff wird dann zumeist in flüssiger Form per Tankwagen oder komprimiert per Flaschenwagen an Krankenhäuser, Pharmaziebetriebe oder Händler geliefert. Die dezentrale Produktion von medizinischem Sauerstoff via (Vakuum-)Druckwechseladsorption ist dagegen seltener, kann in kleineren Maßstäben und in Fällen fehlender Erzeugungs- und Transportinfrastruktur (z.B. in Entwicklungs- und Schwellenländern) jedoch eine sinnvolle Alternative darstellen. In Krankenhäusern wird der Sauerstoff entweder in flüssiger Form in Tanks bzw. Dewargefäßen oder gasförmig in Sauerstoffflaschen gespeichert. An die Patientenbetten wird der gasförmige Sauerstoff dann entweder über Rohrleitungssysteme oder mithilfe von Gasflaschen transportiert und mit Druckminderern sowie Dosierhilfen dem Patienten verabreicht.

Medizinischer Sauerstoff in abgefüllten Gasflaschen gilt in Deutschland als Fertigarzneimittel im Sinne des Arzneimittelgesetzes und weist entgegen der Erwartung nicht zwangsläufig einen höheren Reinheitsgrad im Vergleich zu den meisten technischen Gasen auf. Die erforderliche Reinheit von medizinischem Sauerstoff als Fertigarzneimittel beträgt mindestens 99,5 %, während handelsübliche, technische Gase häufig höhere Reinheiten aufweisen (siehe Kapitel 2.4.1).

Allerdings ist bei Anwendung und Verkauf von medizinischem Sauerstoff Fett- und Schadstofffreiheit durch entsprechende Gasbehandlung sicherzustellen.

Der Bedarf an medizinischem Sauerstoff in deutschen Krankenhäusern ist aufgrund der vielfältigen Behandlungsmethoden und Krankheitsverläufen schwer abzuschätzen. Auf Basis von zwölf untersuchten, spanischen Krankenhäusern in den Jahren 2008 bis 2016 haben Gómez-Chaparro et al. eine Formel für die Korrelation zwischen der Anzahl der Betten und dem jährlichen Sauerstoffbedarf eines Krankenhauses herleiten können [66]. Wird diese Formel auf ein mittelgroßes deutsches Krankenhaus mit 200 Betten angewandt, resultiert daraus ein jährlicher Sauerstoffbedarf von ca. 120 000 Nm³.

Die Preise für medizinischen Sauerstoff liegen deutlich über denen für industriellen Sauerstoff. So werden in der Literatur Preise für medizinischen Sauerstoff in Italien ab Werk mit 2,9 bis 6,5 und im pharmazeutischen Handel mit 4,6 bis 10,2 €/kg angegeben [67].

Zur Vermeidung von Versorgungsengpässen sowie aus Autarkiegründen kann Sauerstoff auch mittels Elektrolyse-Technologie dezentral am Krankenhaus bzw. am Verwendungsort erzeugt werden. Neben der Versorgungssicherheit durch zureichende Produktion sowie Speicherkapazität müssen dabei außerdem die Reinheit sowie die Fett- und Schadstofffreiheit des Sauerstoffs durch Gasreinigung und strenge Kontrollen gewährleistet sein. Da Sauerstoff aus der Elektrolyse bereits vor der Gasreinigung eine hohe Reinheit (i.d.R. mindestens 99 % [25]) aufweist und die Produkte der Elektrolyse bei Einsatz von destilliertem Wasser lediglich Wasserstoff, Sauerstoff und Wasser enthalten, ist die Wasserelektrolyse für die Produktion von medizinischem Sauerstoff grundsätzlich gut geeignet. Rechtliche Fragen zur Zulassung des Elektrolysesauerstoffs als Arzneimittel und zum Einsatz in Krankenhäusern sind in weiteren Studien zu klären. Der Wasserstoff aus der Elektrolyse kann in Kombination mit einer Brennstoffzelle die Notstromversorgung des Krankenhauses anstelle von dieselbetriebenen Aggregaten sicherstellen oder zur Lastflexibilisierung genutzt werden. Die Wirtschaftlichkeit der Sauerstoffversorgung in Krankenhäusern durch die Wasserelektrolyse ist in weiteren Studien zu untersuchen. In Kapitel 2.8.2 werden einige Studien dazu präsentiert.

2.8 Sauerstoff als Nebenprodukt der Elektrolyse

2.8.1 Ökonomische Betrachtung von Sauerstoff als Kuppelprodukt

Kuppelprodukte sind Produkte, die bei verbundener Produktion simultan in einem Produktionsprozess entstehen und zum Beispiel aus naturgesetzlichen oder technischen Gründen zwangsläufig anfallen [68]. Sauerstoff stellt ein fixes Kuppelprodukt der Wasserelektrolyse dar, das stets im konstanten Mengenverhältnis zu Wasserstoff (halbe Stoffmenge von Wasserstoff) entsteht. Die Kuppelproduktion des Sauerstoffs ist aufgrund des konstanten Mengenverhältnisses leicht kontrollierbar und kalkulierbar. Da die Wasserelektrolyse primär eine Technologie zur Erzeugung von Wasserstoff ist, wird Sauerstoff als das Nebenprodukt und Wasserstoff

als das Hauptprodukt der Kuppelproduktion klassifiziert. Grundsätzlich gilt bei Kuppelproduktionen: Je inflexibler die Mengenverhältnisse, desto größer sind die Spannungen zwischen Produktions- und Absatzverhältnissen, insbesondere wenn die Speicher-, Transportier- oder Vernichtbarkeit eines Kuppelprodukts erschwert ist [68]. Dies ist bei der Wasserelektrolyse nicht der Fall, da Sauerstoff ohne zusätzliche Vernichtungskosten an die Umgebungsluft abgegeben werden kann. Das Mengenverhältnis bei der Erzeugung ist daher vorgegeben, die Nutzung des Nebenprodukts Sauerstoff ist hingegen äußerst flexibel. Die (ökonomische) Vernichtung des Sauerstoffs bei der Wasserelektrolyse durch Abblasen ist derzeit die Regel. Der Sauerstoff besitzt in diesem Fall keine Werthaltigkeit.

Wird allerdings in Zukunft die Nutzung des Nebenprodukts Sauerstoff angestrebt, erhält der Sauerstoff eine Werthaltigkeit, die zusammen mit etwaigen Kosten für die Bereitstellung (wie etwa Energiekosten) dem Hauptprodukt Wasserstoff gegenübergestellt werden kann. Für die Bilanzierung der Kuppelproduktion von Wasserstoff und Sauerstoff kann die Restkostenwertrechnung (auch Subtraktionsmethode) angewendet werden. Dabei werden die Weiterverarbeitungsüberschüsse (Nettoerlöse) der Nebenprodukte von den Gesamtkosten der Kuppelproduktion abgezogen [68]. Der verbleibende Restwert muss vom Hauptprodukt abgedeckt werden. Der Restwert ist maßgebend für die Preisbildung des Hauptprodukts. Weitere Methoden sind das Verteilungsverfahren, bei der die Kostenverteilung anhand bestimmter Merkmale der Kuppelprodukte durchgeführt wird, sowie die sogenannte Päckchenrechnung, bei der anstelle einer Aufschlüsselung der Kosten auf Haupt- und Nebenprodukt eine Kalkulation einzelner, gesondert disponierbarer Kuppelprodukt-Päckchen vorgenommen wird [68]. Diese werden vor allem dann eingesetzt, wenn eine klare Einteilung in ein Hauptprodukt und ein oder mehrere Nebenprodukte nicht möglich ist. Die Kuppelprodukte werden daher allesamt als Hauptprodukte gewertet. Da bei der Elektrolyse klar zwischen Wasserstoff als Hauptprodukt und Sauerstoff als Nebenprodukt unterschieden wird, soll in dieser Arbeit zur Kalkulation der Kuppelproduktion von Wasserstoff und Sauerstoff die Restkostenwertrechnung verwendet werden.

2.8.2 Studien zur Sauerstoffnutzung aus der Elektrolyse

Sauerstoff als Nebenprodukt der Elektrolyse kann in der Stahlindustrie im Hochofen zur Reduktion von Eisenerz, als Oxidationsmittel beim Sauerstofffrischen und in der Elektrolichtbogenroute eingesetzt werden. Dock et al. untersuchten die Deckung des Sauerstoffbedarfes eines Stahlwerkes durch die PEM-Elektrolyse zur Steigerung der Energieeffizienz und Flexibilität der Elektrostahlproduktion [69]. Die Sauerstoffproduktion durch die PEM-Elektrolyse wurde dabei mit einem Referenzszenario der Sauerstofferzeugung mittels PSA-Technologie verglichen. Ein wirtschaftlicher Betrieb der Elektrolyse aufgrund der Nutzung des anfallenden Sauerstoffs bei Verkauf des erzeugten Wasserstoffs zu moderaten Verkaufspreisen konnte nachgewiesen werden. Aufgrund der zu erwartenden Kostendegression für Elektrolyseure sowie zunehmender Strompreisvolatilität wurde das Potenzial der Sauerstofferzeugung durch die Elektrolyse in der Elektrostahlproduktion als hoch erachtet [69].

Ein Konzept zur Integration der Wasserelektrolyse in der Papier- und Zellstoffindustrie mit simultaner Nutzung von Wasserstoff und Sauerstoff wurde von Kuperinen et al. vorgestellt [70]. Der via alkalischer Elektrolyse erzeugte Wasserstoff dient dabei als Brennstoff im Kalkofen, während der erzeugte Sauerstoff zur Sauerstoffdelignifizierung, zum Bleichen des Zellstoffs und zur Luftanreicherung im Rückgewinnungskessel verwendet wird. Der Wasserstoff kann als „grün“ angesehen werden, da der für die Elektrolyse benötigte Strom mit Biomasse erzeugt wird. In einem ersten Szenario wurde dabei eine priorisierte Deckung des Sauerstoffbedarfs aus der Elektrolyse vorgenommen, wobei der Sauerstoffbedarf vollständig und der Wasserstoffbedarf zu 21 % durch die Elektrolyse gedeckt werden konnten. Im zweiten Szenario wurde die Erfüllung des Wasserstoffbedarfs zum Einsatz als Brennstoff im Kalkofen priorisiert, wodurch etwa 73 % des Wasserstoffbedarfs sowie der gesamte Sauerstoffbedarf gedeckt werden konnten. Die Höhe des Strompreises, der Preis für fossile Brennstoffe und der Stromverbrauch des Elektrolyseurs wurden als hauptsächliche Faktoren für die Wirtschaftlichkeit des Konzepts identifiziert [70].

Die Nutzung von Sauerstoff als Nebenprodukt der PEM-Wasserelektrolyse in Müllverbrennungsanlagen wurde von Rispoli et al. erfolgreich untersucht [71]. Eine Waste-to-Energy-Anlage (WtE) wurde dabei mit einer PtG-Anlage zur Erzeugung von synthetischem Erdgas (SNG) aus dem bei der Verbrennung entstehenden CO_2 kombiniert. Der produzierte, elektrische Strom aus der WtE-Anlage wurde für die Erzeugung von Wasserstoff und Sauerstoff durch die PEM-Elektrolyse genutzt. Der durch die Elektrolyse erzeugte Sauerstoff wurde wiederum als Oxidationsmittel in der Müllverbrennung eingesetzt. Dabei wurden verschiedene Oxidationsmittel bei der Müllverbrennung untersucht: die Verbrennung mit Luft, die Luftanreicherung mit Reinsauerstoff und die Oxyfuel-Feuerung. Im Fall der Oxyfuel-Feuerung konnten dabei die größten Mengen an SNG und gleichzeitig die vollständige Deckung des Sauerstoffbedarfs durch die PEM-Elektrolyse nachgewiesen werden. Bei der Verwendung von Reinsauerstoff konnten durch die entfallende Notwendigkeit der Entstickungsanlage zur Abgasnachbehandlung Kosteneinsparungen erzielt werden [71].

Jentsch und Büttner konnten durch den erfolgreichen Betrieb einer PtG-Anlage in einer Versuchskläranlage in Südthüringen die grundsätzliche Eignung kommunaler Kläranlagen zur Implementierung von Wasserelektrolyseanlagen durch die Nutzungsmöglichkeit von Elektrolyse-sauerstoff in der biologischen Reinigungsstufe nachweisen [62]. Der erzeugte und aufgereinigte Wasserstoff aus der alkalischen Elektrolyse wurde dabei in einer Fahrzeugflotte von bis zu sechs Brennstoffzellenfahrzeugen in der Region genutzt. Abbildung 2.6 stellt das untersuchte Konzept in einem vereinfachten Flussdiagramm mit entsprechenden Stoff- und Energieströmen schematisch dar. Vor dem Hintergrund der Sektorenkopplung konnte weiterhin gezeigt werden, dass Kläranlagen durch ihre leistungsfähige, elektrotechnische Infrastruktur in der Lage sind, durch Elektrolyseleistung eine für das deutsche Energiesystem relevante, lastflexible Regelleistung bereitzustellen [62].

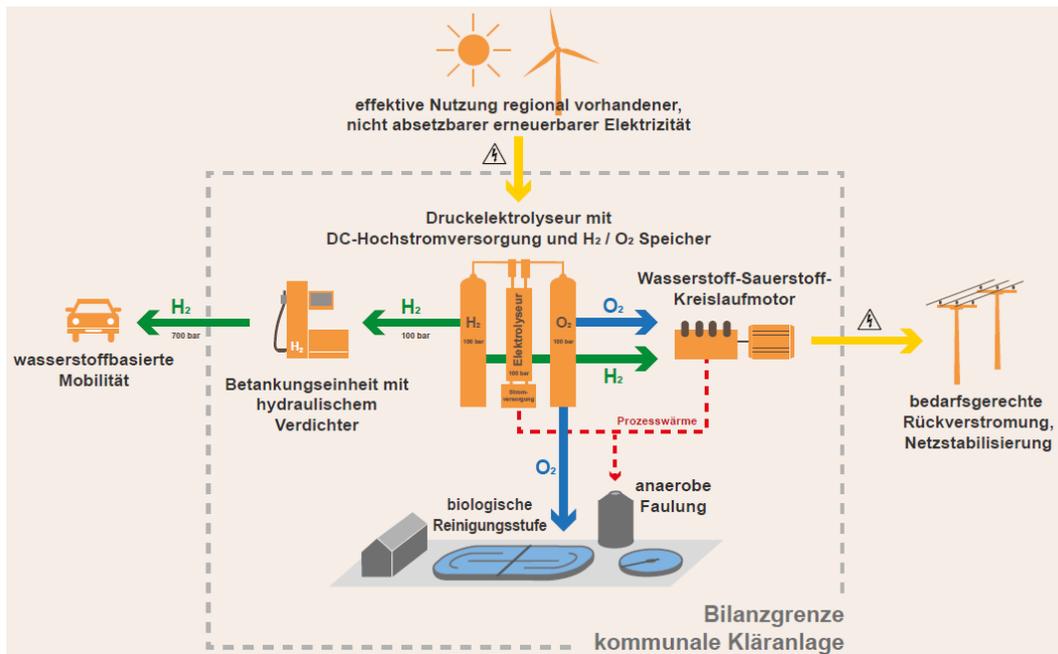


Abbildung 2.6: Dezentrales PtG-Konzept mit Sauerstoffnutzung auf Kläranlagen [62]

Die Nutzung von Sauerstoff als Nebenprodukt der PEM-Elektrolyse wurde im medizinischen Bereich erstmals von Kato et al. beschrieben [24]. In der Studie wurde unter anderem die Erfüllung des Wärme- und Elektrizitätsbedarfes von Krankenhäusern durch Wasserstoff, basierend auf Bedarfen von 160 Krankenhäusern in Japan, untersucht. Die PEM-Technologie wurde dabei hinsichtlich ihrer Wirtschaftlichkeit mit der Wasserstofferzeugung durch Dampfreformierung verglichen. Derzeitige Bedarfe sowie Bedarfspotenziale von Sauerstoff aus der Elektrolyse wurden analysiert. Die Studie konnte Effizienzsteigerungen und Energieeinsparungen um bis zu 40 % in Industrieprozessen sowie einen ökonomischen Vorteil bei Nutzung von Sauerstoff aus der Elektrolyse in Krankenhäusern nachweisen [24].

Maggio et al. stellten im Jahr 2021 ein Konzept zur Implementierung eines PtG-Systems zur Deckung des Sauerstoffbedarfs eines süditalienischen Krankenhauses sowie eine ökonomische Analyse des beschriebenen Systems vor [67]. Der durch die alkalische Elektrolyse erzeugte Wasserstoff wurde hierbei als Nebenprodukt der Sauerstoffproduktion angesehen und gewinnbringend verkauft. Die Ergebnisse der Studie konnten zeigen, dass die autarke Sauerstoffproduktion bei einem Verkaufspreis des erzeugten Wasserstoffs von 3 €/kg wirtschaftlich ist, wenn der Marktpreis für medizinischen Sauerstoff mit 3 bis 4 €/kg angenommen wird [67].

3 Modellierung

In diesem Kapitel soll das erstellte Modell zur Sauerstoffnutzung vorgestellt werden. Zunächst werden die methodische Vorgehensweise der Modellierung, die Modellierungsumgebung sowie die Prozesse der Simulation und Optimierung erläutert. Anschließend wird die Auslegung der technischen Komponenten im Modell dargelegt und die für die Sauerstoffnutzung modellierten Szenarien der Simulation und Optimierung zur Untersuchung der Wasserstoffgestehungskosten beschrieben. Abschließend soll die Methodik der räumlichen GIS-Analyse vorgestellt werden.

3.1 Methodik

3.1.1 Modellierungsumgebung MATLAB/Simulink

Die Modellierung und Berechnung der Szenarien zur Sauerstoffnutzung aus der Elektrolyse werden im Rahmen dieser Arbeit mit der Software *MATLAB/Simulink* der Firma *The MathWorks* implementiert. Die Software eignet sich für die Lösung mathematischer Probleme und zur graphischen Darstellung der Ergebnisse. Die Programmierung des mathematischen Problems in *MATLAB* erfolgt dabei in einer softwarespezifischen Programmiersprache. Es kann dabei auf eine Vielzahl von integrierten Funktionen zurückgegriffen werden. Die ökonomischen Berechnungen im entwickelten Modell werden vorwiegend in der textbasierten Oberfläche *MATLAB* durchgeführt. *Simulink* bietet hingegen eine grafische Oberfläche in Blockbauweise, in der vor allem die Modellierung und Spezifizierung der technischen Komponenten erfolgt.

Neben der Programmierung eigener Blöcke zur Modellierung technischer Komponenten, kann für die Modellierung teilweise auch auf bereits bestehende Blöcke aus einer vom Fraunhofer-Institut für Solare Energiesysteme (ISE) entwickelten Modellbibliothek namens „H2ProSim“ zurückgegriffen werden. Das bestehende Modell-Framework wird am ISE für techno-ökonomische Optimierungen in öffentlichen und privatwirtschaftlichen Forschungsprojekten angewendet. Das in dieser Arbeit zu entwickelnde Modell erweitert damit die in *MATLAB/Simulink* bereits bestehende Modellbibliothek zur Modellierung von Wasserstoffsystemen um technische Komponenten zur Sauerstoffnutzung.

3.1.2 Simulation des techno-ökonomischen Modells

Der Simulationsprozess des techno-ökonomischen Modells ist in Abbildung 3.1 als Flussdiagramm dargestellt. Als Eingangsdaten für die Stromerzeugung aus erneuerbaren Energiequellen werden im Modell ISE-interne, für Deutschland durchschnittliche Leistungszeitreihen einer Photovoltaikanlage sowie einer Windenergieanlage genutzt. Als Strompreiszeitreihe für den Netzstrombezug werden Großhandelspreise aus dem Jahr 2021 des Internetportals *SMARD* der Bundesnetzagentur verwendet [72]. Obwohl die Eingangszeitreihen allesamt stündliche Daten liefern, wird die Zeitschrittweite zur Auswertung des Modells auf 15 Minuten festgelegt. Dies erlaubt eine ausreichend hohe zeitliche Auflösung des Modells und des dynamischen Verhaltens der technischen Komponenten.

In der sogenannten *Fitness Function* werden Parameter für den Optimierungsalgorithmus aus dem *Main Script* übergeben und technische Parameter der Systemkomponenten definiert. Anschließend erfolgt die Simulation des technischen Modells in *Simulink* durch Aufrufen des Modells in der *Fitness Function*. Der Betrachtungszeitraum der Simulation beträgt dabei ein Jahr. Die durch die Simulation des Modells generierten Daten werden in das *Economical Model* geladen, techno-ökonomisch ausgewertet und als Ergebnisse gespeichert. Hierfür werden am Ende der Simulation die Wasserstoffgestehungskosten (engl.: *Levelized cost of hydrogen, LCOH*) des Systems berechnet.

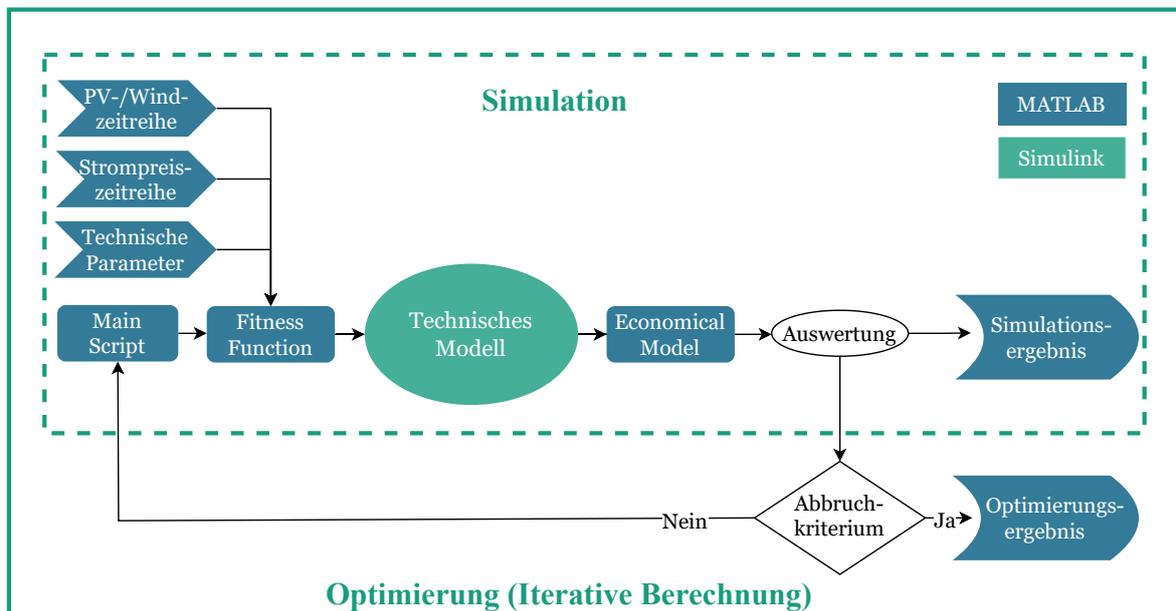


Abbildung 3.1: Flussdiagramm des Simulations- und Optimierungsprozesses

3.1.3 Einzieloptimierung und evolutionärer Algorithmus

Die Optimierung ist eine Abfolge iterativer Berechnungen, bei der mehrfach hintereinander Simulationen ausgeführt werden, um ein Optimum eines mathematischen Problems zu finden. In dieser Arbeit erfolgt die Optimierung prinzipiell als Einzieloptimierung hinsichtlich minimaler Wasserstoffgestehungskosten. Der Optimierungsprozess des techno-ökonomischen Modells ist in Abbildung 3.1 dargestellt.

Als Optimierungsverfahren wird ein evolutionärer Algorithmus verwendet, bei dem in Analogie zur Biologie Lösungskandidaten (Individuen) einer Population in mehreren Generationen durch Evolutionsfaktoren evolviert werden und sich so dem Optimum nähern. Zu Beginn der Optimierung findet eine Initialisierung statt, die eine erste Population von Lösungskandidaten mit zufällig verteilten Eigenschaften anlegt. Um eine ausreichende Ergebnisgüte zu erreichen, muss eine hinlängliche Anzahl an Lösungskandidaten über mehrere Generationen hinweg berechnet werden. Hierzu wird im *Main Script* neben Optimierungsparametern ein Abbruchkriterium definiert, welches den Optimierungsvorgang bis zur Erfüllung fortführt. Die Definition des Kriteriums kann mittels eines vorgegebenen Schwellwerts für die erwünschte Güte, der Anzahl an Generationen ohne Verbesserung oder einer maximalen Anzahl an Iterationen erfolgen [73]. Im angefertigten Modell wird das Kriterium erreicht, wenn die mittlere, relative Verbesserung des Ergebnisses ab einer festgelegten Mindestanzahl an Generationen den Wert von 10^{-6} nicht mehr überschreitet. Abbildung 3.2 zeigt das Ergebnisdiagramm einer exemplarischen Optimierung kurz vor Erreichen des Abbruchkriteriums.

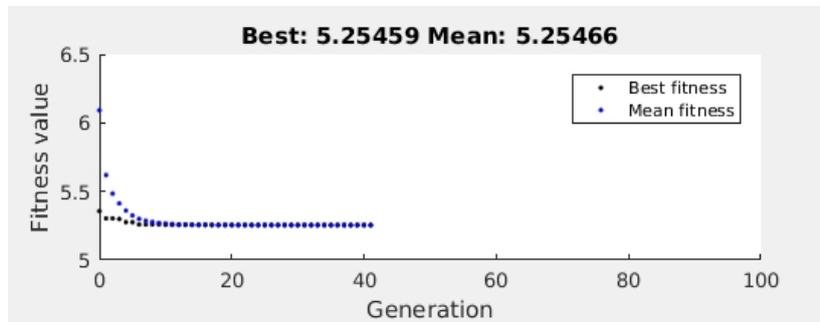


Abbildung 3.2: Exemplarisches Ergebnisdiagramm vor Erreichen des Abbruchkriteriums

Bis das Abbruchkriterium erfüllt wird, werden verschiedene Variationsprozesse (Evolutionsfaktoren) iterativ durchlaufen. Diese umfassen die Selektion einzelner Individuen basierend auf deren Ergebnisgüte, die Rekombination zur Durchmischung innerhalb einer Population durch Vererbung von Eigenschaften passender Individuen und die Mutation durch geringfügige Variation der Eigenschaften eines Individuums. Durch diese Evolutionsfaktoren findet eine sukzessive Annäherung der Optimierungsergebnisse an das Optimum statt. Weiterführende theoretische Grundlagen bezüglich evolutionären Algorithmen zur Lösung von Optimierungsproblemen kann einschlägiger Literatur entnommen werden [73].

3.1.4 Berechnung der Wasserstoffgestehungskosten

Die Berechnung der LCOH beinhaltet alle Investitionsausgaben (engl.: *capital expenditures, CAPEX*) und Betriebskosten (engl.: *operational expenditures, OPEX*) für die Erzeugung und Bereitstellung des Wasserstoffs, auch unter Berücksichtigung von Folgeprozessen wie Gasreinigung, Speicherung und Transport. Die Wasserstoffgestehungskosten werden mithilfe der Annuitätenmethode zunächst für jede einzelne Systemkomponente berechnet und anschließend aufsummiert. Die Annuität ist eine in gleichmäßigen Abständen wiederkehrende Zahlung in konstanter Höhe, die durch Multiplikation des Kapitalwerts mit dem Annuitätenfaktor (ANF) berechnet wird und in der Betriebswirtschaftslehre dem Vergleich von Investitionsprojekten dient [74]. Der Annuitätenfaktor der Komponente ANF_j berechnet sich aus dem Zinsfuß z und der Lebensdauer n der jeweiligen Systemkomponente j nach Gleichung 3.1 [74]. Der Zinsfuß wird mit $z = 0,07$ angenommen.

$$ANF_j = \frac{(1+z)^{n_j} \cdot z}{(1+z)^{n_j} - 1} \quad (3.1)$$

Mithilfe des Annuitätenfaktors, der $CAPEX_j$ und $OPEX_j$ der Komponente sowie der produzierten Menge Wasserstoff pro Jahr m_{H_2} können die Wasserstoffgestehungskosten $LCOH_j$ der einzelnen Komponenten nach Gleichung 3.2 berechnet werden.

$$LCOH_j = \frac{ANF_j \cdot CAPEX_j + OPEX_j}{m_{H_2}} \quad (3.2)$$

Die Wasserstoffgestehungskosten des Systems werden durch Aufsummierung der Gestehungskosten aller Komponenten J nach Gleichung 3.3 errechnet und werden in €/kg angegeben.

$$LCOH = \sum_{j=1}^J LCOH_j \quad (3.3)$$

3.1.5 Berechnung der Sauerstoffgestehungskosten

Analog zu den Wasserstoffgestehungskosten werden in dieser Arbeit die Gestehungskosten LCO_{xy} des durch die Elektrolyse erzeugten Sauerstoffs eingeführt und berechnet. Die mit dem Annuitätenfaktor multiplizierten Investitionsausgaben werden mit den Betriebskosten für die Sauerstofferzeugung und -bereitstellung durch die produzierte Menge Sauerstoff pro Jahr m_{O_2} dividiert. Die Sauerstoffgestehungskosten ermöglichen somit einen Vergleich verschiedener Pfade der Sauerstofferzeugung und -verwertung.

3.2 Auslegung der technischen Komponenten

In diesem Kapitel soll ein Überblick über die Auslegung aller im Modell abgebildeten, technischen Komponenten gegeben werden. Dies umfasst die Berechnung des Energiebedarfs sowie die technische Ausführung der jeweiligen Komponente. Für alle verwendeten Komponenten sollen außerdem die Kostenannahmen des ökonomischen Modells vorgestellt werden. Alle folgenden Kosten beziehen sich inflationsbereinigt auf das Jahr 2022. Es wird weiterhin für alle Komponenten ein Kostenaufschlag für Planung und Installation einbezogen, der mit 20 % der Investitionen des jeweiligen Postens kalkuliert wird.

Photovoltaikanlage

Die ISE-interne Leistungszeitreihe beinhaltet alle Verluste, die im Betrieb einer Photovoltaikanlage sowie bei der Bereitstellung des Stroms auftreten. Die Zeitreihe gibt die im Modell verfügbare Leistung in Watt pro installierter Leistung der Anlage in W_p an.

Kostenannahmen

Die Investitionen wurden mit einem fixen Kostenwert pro installierter Leistung einer großskaligen, Freiflächen-Photovoltaikanlage angenommen. Mit einer Kostendegression von 1,53 % pro Jahr ergeben sich für das Jahr 2022 Investitionen von 628 €/kW_{el} [1]. Die jährlichen Betriebskosten betragen 2 % der Investitionen. Die Lebensdauer der Anlage beträgt 26 Jahre [1].

Windenergieanlage

Analog zur Photovoltaikanlage beinhaltet die Leistungszeitreihe der Windenergieanlage alle Verluste und gibt die verfügbare Leistung in W/W_p an.

Kostenannahmen

Die Kostennahme für Windenergieanlagen erfolgt ebenfalls analog zu der für Photovoltaikanlagen. Die CAPEX für eine Onshore-Windenergieanlage werden mit 1460 €/kW_{el} bei einer jährlichen Kostendegression von 1,12 % angenommen [1]. Die jährlichen Betriebskosten werden mit 36,72 € pro Jahr [75], die Lebensdauer mit 24 Jahren angenommen [1].

Elektrolyseur

Bei der Modellierung des Elektrolyseurs konnte größtenteils auf einen vorgefertigten Block der ISE-internen Modellbibliothek „H2ProSim“ zurückgegriffen werden. Es handelt sich dabei um einen PEM-Elektrolyseur, der mit Strom aus den oben beschriebenen Windenergie- und Photovoltaikanlagen sowie mit Netzstrom gespeist wird. Der Elektrolyseur arbeitet im Gleichdruckbetrieb bei 35 bar. Die Wirkungsgradkurve des Elektrolyseurs mit den jeweiligen

Anteilen des Stacks, des Balance-of-Plants sowie der elektrischen Verluste durch die Stromversorgung am spezifischen Energieverbrauch kann Abbildung 3.3 entnommen werden. Alle weiteren technischen Parameter basieren auf ISE-internen sowie auf Herstellerdaten und werden aus Gründen der Vertraulichkeit nicht quantitativ angegeben. Diese umfassen beispielsweise die Zellfläche, die Strom-Spannungs-Kennlinie, das Teillastverhalten und die Stromdichte des Elektrolyseurs. Die modellierte Elektrolyse erfolgt nach den in Kapitel 2.2.2 beschriebenen, elektrochemischen Prozessen.

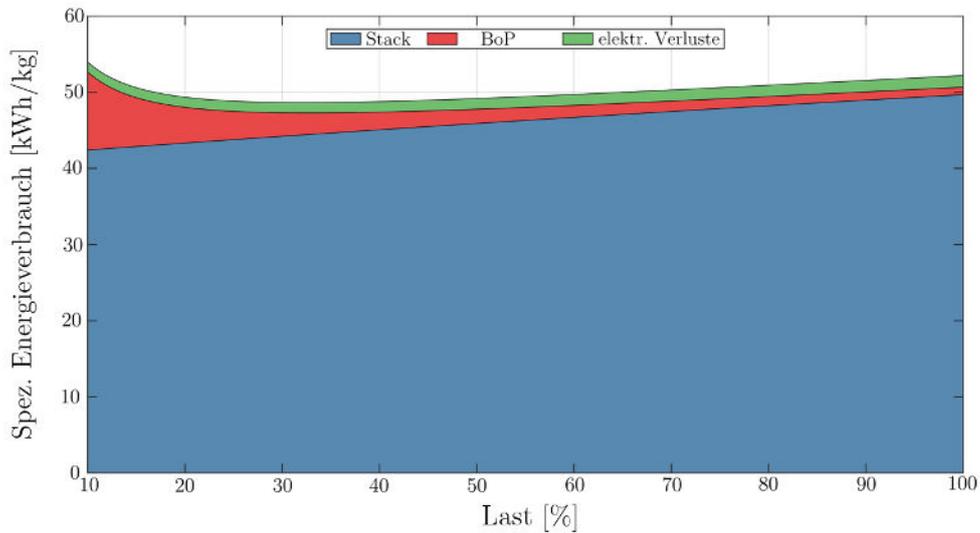


Abbildung 3.3: Lastabhängiger, spezifischer Energieverbrauch des modellierten Elektrolyseurs

Kostenannahmen

Die Investitionen für einen Elektrolyseur $CAPEX_{EL}$ sind von der Kapazität bzw. von der elektrischen Leistungsaufnahme des Elektrolyseurs abhängig und unterliegen starken Skaleneffekten. So sind die spezifischen Investitionen, z.B. in €/MW, für einen Elektrolyseur mit 1 MW höher als die eines 10-MW-Elektrolyseurs. In Abhängigkeit von der Leistung der Anlage kann eine Potenzfunktion für die spezifischen Investitionen, basierend auf Stützwerten für Elektrolyseurkosten aus der Literatur [76], aufgestellt werden. Die Funktion zur Berechnung der spezifischen Investitionen $i_{EL,spec}$ in Abhängigkeit von der elektrischen Leistung des Elektrolyseurs P_{EL} ist in Abbildung 3.4 dargestellt. Die Skaleneffekte der Investitionen eines Elektrolyseurs werden in dieser Abbildung vor allem im Leistungsbereich bis 10 MW deutlich. Ab etwa 10 MW ändern sich die spezifischen Investitionen nur noch geringfügig. Die Investitionen umfassen neben der Elektrolyseeinheit unter anderem auch das Gehäuse, Messtechnik, Balance-of-Plant-Geräte und Leistungselektronik. Die Investitionen für die Elektrolyseeinheit berechnen sich mit den spezifischen Investitionen in Tausend Euro pro MW ($t€/MW$) und

der elektrischen Leistung in MW nach Gleichung 3.4.

$$CAPEX_{EL} = P_{EL} \cdot \left(1403,8 \text{ [t€/MW]} \cdot \left(\frac{P_{EL}}{[MW]} \right)^{-0,1236} \right) \quad (3.4)$$

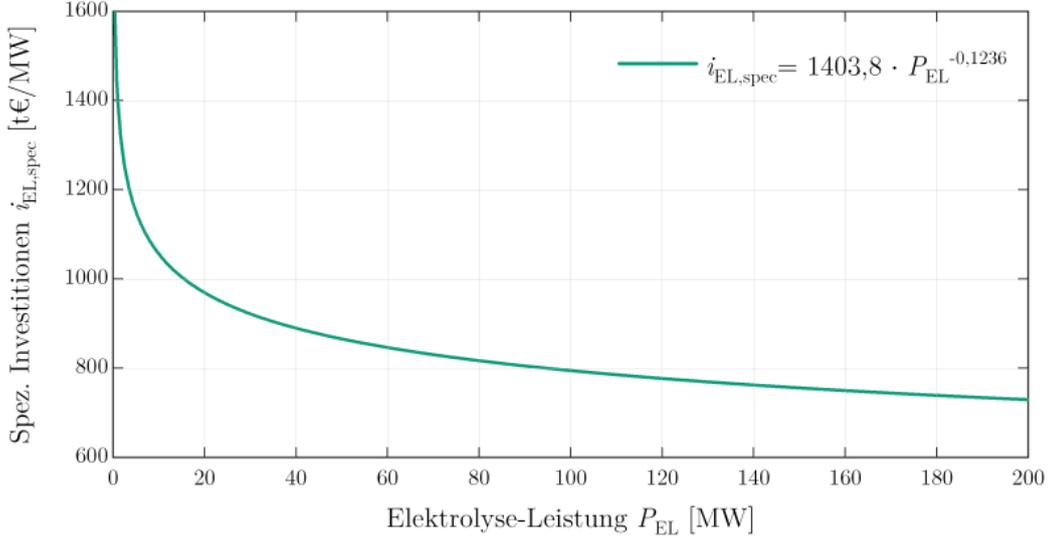


Abbildung 3.4: Spezifische Investitionen eines Elektrolyseurs in Tausend€/MW nach [76]

Die jährlichen Betriebskosten des Elektrolyseurs $OPEX_{EL}$ setzen sich aus den jährlichen Kosten für die Wartung und Instandhaltung $OPEX_{O\&M}$ und den jährlichen Kosten für die Stack-Erneuerung $OPEX_{Stack}$ zusammen (Gleichung 3.5) [77]. Die jährlichen Kosten für Wartung und Instandhaltung werden mit 14€/kW angenommen [77]. Die jährlichen Kosten für die Stack-Erneuerung sind abhängig vom Anteil der Kosten des Stacks am Gesamtsystem α_{Stack} , der jährlichen Laufzeit des Elektrolyseurs t_{run} in Stunden und der Lebensdauer des Stacks LT_{Stack} . Die jährliche Laufzeit des Elektrolyseurs variiert je nach Betriebsart und ist jeweils den Ergebnissen des Modells zu entnehmen. Der Kostenanteil wird mit $\alpha_{Stack} = 0,5$, die Lebensdauer LT_{Stack} mit 55 000 h angenommen. Die jährlichen Kosten für die Stack-Erneuerung werden damit nach Gleichung 3.6 berechnet. Die Lebensdauer eines Elektrolyseurs wird mit 20 Jahren angenommen [77].

$$OPEX_{EL} = OPEX_{O\&M} + OPEX_{Stack} \quad (3.5)$$

$$OPEX_{Stack} = \alpha_{Stack} \cdot CAPEX_{EL} \cdot \frac{t_{run}}{LT_{Stack}} \quad (3.6)$$

Gasreinigungsanlagen

In dieser Arbeit werden sowohl die Gasreinigung des Wasserstoffs als auch die Reinigung des entstehenden Sauerstoffs modelliert, da der Reinigungsschritt für die spätere Nutzung beider Gase essenziell ist. Die modellierten Gasreinigungsanlagen (engl: *Gas Purification Unit, GPU*) basieren auf vorgefertigten Blöcken der ISE-Modellbibliothek. Da die Modellbibliothek für die Wasserstoffwertschöpfungskette erstellt wurde, sind die GPUs als Wasserstoffreinigungsanlagen ausgeführt. Die Reinigungsanlagen bestehen jeweils aus einer katalytischen Deoxygenierungsstufe zur Sauerstoffentfernung, einem Wärmetauscher und einer Trocknungsstufe im TSA-Verfahren. Für die Modellierung der Wasserstoffreinigung in dieser Arbeit wird diese Konfiguration aus der Modellbibliothek übernommen. Für die Sauerstoffreinigung wird statt der Deoxygenisierung eine Stufe zur Wasserstoffentfernung implementiert. Des Weiteren werden die katalytische Trocknungsstufe und der Wärmetauscher für die Sauerstoffreinigung modifiziert, indem Stoffwerte wie die spezifische Wärmekapazität und die Molmasse, die Stoffmenge des Sauerstoffs und der spezifische Energieverbrauch der Sauerstoffreinigungsanlage (basierend auf vertraulichen Herstellerdaten) angepasst werden. Der Anteil des Wasserstoffs am Anodengasstrom wird nach der Wasserstoffentfernung zur Vereinfachung mit null angenommen. Die modellierten Gasreinigungsanlagen simulieren den in Kapitel 2.4.1 dargelegten Prozess.

Kostenannahmen

Als Kostenannahme für die Investitionen einer Wasserstoffreinigungsanlage wurde in Abhängigkeit vom zu reinigenden Wasserstoffmassenstrom \dot{m}_{H_2} in kg/h eine inflationsbereinigte Kostenfunktion auf Basis von Herstellerangaben erstellt. Diese ist Gleichung 3.7 zu entnehmen.

$$CAPEX_{GPU,H_2} = \dot{m}_{H_2} \cdot (44202,62 \cdot m_{H_2}^{-0,547}) \cdot 1,13 \quad (3.7)$$

Die Investitionen für eine Sauerstoffreinigungsanlage $CAPEX_{GPU,O_2}$ wurden in Abhängigkeit des Sauerstoffvolumenstroms \dot{V}_{O_2} durch lineare Interpolation angenähert, die zum einen Teil auf Literaturwerten und zum anderen Teil auf Herstellerdaten basiert. Die verwendeten Werte der Investitionen und die zugehörigen Nennvolumenströme sowie die entsprechenden Datenquellen sind in Tabelle 3.1 abgebildet. Die jährlichen Betriebskosten beider Anlagentypen werden mit 2% der Investitionen der jeweiligen Anlage abgeschätzt. Die Lebensdauer wurde für beide Reinigungsanlagen mit 20 Jahren angenommen.

Tabelle 3.1: Datenbasis zur Berechnung der Investitionen einer Sauerstoffreinigungsanlage

\dot{V}_{O_2} [Nm ³ /h]	$CAPEX_{GPU,O_2}$ [€]	Quelle
5	20000	[38]
10	25000	[38]
15	29000	[38]
25	35000	[38]
100	100000	Herstellerdaten
2000	400000	Herstellerdaten
20000	1500000	Herstellerdaten

Kompressoren

Auch für die Wasserstoff- bzw. Sauerstoffverdichtung konnten in dieser Arbeit bereits existierende Simulink-Blöcke genutzt werden. Für die Wasserstoffverdichtung musste der Block dabei nur auf die entsprechenden Eingangs- und Ausgangsdrücke angepasst sowie die Anzahl der Stufen des Kompressors gewählt werden. Der Eingangsdruck p_{in} des Wasserstoffs in den Kompressor beträgt 35 bar, der Ausgangsdruck p_{out} entspricht dem gewünschten Speicherdruck von 80 bar. Für die Sauerstoffverdichtung musste der Block auf die Verdichtung von Sauerstoff angepasst werden, indem hauptsächlich Stoffkennwerte des Wasserstoffs mit denen von Sauerstoff substituiert wurden. Die Sauerstoff- und Wasserstoffkompressoren wurden im technischen Modell mehrstufig ausgeführt, sodass das Stufenverhältnis den Wert von 3 nicht überschreitet [27]. Alle Kompressoren wurden weiterhin mit Zwischenkühlung ausgeführt, um den Energiebedarf der Kompression zu verringern. Die benötigte elektrische Kompressorleistung berechnet sich aus der folgenden Gleichung. Der totale Wirkungsgrad beschreibt dabei den effektiven isentropen Kupplungswirkungsgrad für große, mehrstufige Gasverdichter [27]. Die verwendeten Konstanten und Annahmen sind Tabelle 3.2 zu entnehmen.

$$P_{comp,el} = \frac{\kappa}{\kappa - 1} \cdot \frac{R \cdot T_{in}}{\eta_{tot}} \cdot \left(\left(\frac{p_{out}}{p_{in}} \right)^{\frac{\kappa-1}{\kappa}} - 1 \right) \cdot \frac{\dot{m}_{O_2}}{M_{O_2}} \quad (3.8)$$

Tabelle 3.2: Konstanten und Annahmen zur Berechnung der Kompressorleistung

Größe	Symbol	Wert	Einheit
Isentropenexponent	κ	1,4	[-]
Gaskonstante	R	8,31448	[J/(mol · K)]
Eingangstemperatur	T_{in}	298,15	[K]
Totaler Wirkungsgrad	η_{tot}	0,8 [27]	[-]
O ₂ -Massenstrom	\dot{m}_{O_2}	variabel	[kg/s]
Molare Masse	M_{O_2}	0,032	[kg/mol]

Kostenannahmen

Die Investitionen für die Kompressoren hängen von der Kapazität und somit von der elektrischen Leistung $P_{comp,el}$ des jeweiligen Kompressors ab. Anhand von Literaturwerten wurde eine Kostenfunktion für die spezifischen Investitionen $i_{comp,spec}$ aufgestellt, welche Gleichung 3.9 zu entnehmen ist und einen Faktor für die Inflationsbereinigung von 1,225 für das Bezugsjahr 2010 enthält [78]. Die Investitionen eines Kompressors berechnen sich anschließend nach Gleichung 3.10 und beinhalten wiederum einen Faktor für Installation und Inbetriebnahme von 1,8. Die Betriebskosten der Kompressoren werden mit $OPEX_{comp} = 4\%$ der Investitionen, die Lebensdauer mit 30 Jahren abgeschätzt.

$$i_{comp,spec} = 34223 \cdot P_{comp,el}^{-0.414} \cdot 1.225 \quad (3.9)$$

$$CAPEX_{comp} = P_{comp,el} \cdot i_{comp,spec} \cdot 1,8 \quad (3.10)$$

Tankspeicher

Sowohl für Wasserstoff als auch für Sauerstoff wird die Speicherung in Tanks, wie in Kapitel 2.5 beschrieben, als Speicheroption im Modell in Betracht gezogen. Die Bauweise der Tanks unterscheidet sich dabei zwischen den zu speichernden Medien nur geringfügig. Für die Modellierung des Wasserstofftanks konnte ein bereits existierender Block aus der Modellbibliothek genutzt werden. Für die Modellierung des Sauerstofftanks wurden lediglich die Stoffwerte des Mediums geändert. Die Stoffmenge und somit die Masse druckgespeicherter Gase können nicht über die ideale Gasgleichung berechnet werden, da diese für Gase mit hohen Drücken und tiefen Temperaturen keine Gültigkeit besitzt. Die Berechnung des Speicherinhalts basiert in diesem Modell daher auf der von Soave modifizierten Redlich-Kwong-Zustandsgleichung für reale Gase [79]. Für die Modellierung des Sauerstofftanks mussten die Koeffizienten für Sauerstoff neu berechnet werden. Die Koeffizienten betragen in etwa $a_{SRK,O_2} = 0,14014 \text{ (Pa} \cdot \text{m}^6)/\text{mol}^2$ und $b_{SRK,O_2} = 2,21 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3/\text{mol}$.

Die Ein- und Ausspeicherung der Gase werden durch Kontrolleinheiten geregelt. Diese stellen sicher, dass ein Mindestdruck von 10 bar nicht unterschritten und der Maximaldruck nicht überschritten wird. Im Falle, dass der Druck im Speicher auf 10 bar abfällt, wird die Ausspeicherung der Gase ausgesetzt, sodass der Druck nicht weiter fällt. Eventuell existierende Bedarfe können in diesem Fall nicht kontinuierlich bedient werden. Bei Erreichen des Maximaldrucks des Speichers, bei Wasserstoff z.B. 80 bar, wird die Einspeicherung ausgesetzt und das produzierte Gas abgeblasen. Dies ist zumeist mit wirtschaftlichen Nachteilen verbunden. Des Weiteren kann durch die Kontrolleinheiten ein bedarfsgerechtes Ausspeicherprofil vorgegeben werden.

Kostenannahmen

Die Investitionen eines Tankspeichers werden maßgeblich von der speicherbaren Stoffmenge des Gases und dem maximalen Speicherdruck bestimmt. Allgemein gilt, dass die spezifischen Investitionen mit steigender Speichermenge und somit steigendem Tankvolumen abnehmen. Bei großvolumetrischen Tanks fallen zunehmend die Materialkosten des Tanks ins Gewicht. Da in dieser Arbeit lediglich großvolumetrische Speichertanks betrachtet werden, wird hier von konstanten spezifischen Investitionen ausgegangen. Die Investitionen eines Wasserstofftanks $CAPEX_{tank,H_2}$ werden nach Gleichung 3.11 mit spezifischen Investitionen von 500 €/kg in Abhängigkeit von der Kapazität des Speichers m_{H_2} in kg abgeschätzt. Die spezifischen Investitionen eines Sauerstofftanks werden, basierend auf der 16-fach höheren Dichte des Sauerstoffs bei Normalbedingungen, mit 30 €/kg angenommen. Die Investitionen eines Sauerstofftanks $CAPEX_{tank,O_2}$ werden nach Gleichung 3.12 in Abhängigkeit von der Kapazität des Speichers m_{O_2} in kg abgeschätzt. Die jährlichen Betriebskosten werden für beide Tanks mit $OPEX_{tank} = 1\%$ der Investitionssumme angenommen. Die Lebensdauer beträgt 20 Jahre.

$$CAPEX_{tank,H_2} = 500 \text{ [€/kg]} \cdot m_{H_2} \quad (3.11)$$

$$CAPEX_{tank,O_2} = 30 \text{ [€/kg]} \cdot m_{O_2} \quad (3.12)$$

Bündelspeicher

Die Modellierung der Bündelspeicherung erfolgt prinzipiell analog zur Tankspeicherung und wird ausschließlich für Sauerstoff durchgeführt. Der Bündelspeicher, bestehend aus mehreren Gasflaschen als kleinstes Speichervolumen, wird im technischen Modell zur Vereinfachung als eine große Speichereinheit betrachtet. Da Bündelspeicher auch in der Realität als eine Speichereinheit zusammengefasst und über eine zentrale Einheit gesteuert werden können, ist diese Näherung hinreichend. Die Kontrolle des Minimal- und Maximaldrucks erfolgt analog zur Tankspeicherung. Als Bündelspeicher werden Einheiten mit zwölf gebündelten Gasflaschen mit jeweils 50 Liter Fassungsvermögen und einem Speicherdruck von 200 bar verwendet. Die resultierende Speichereinheit eines Bündels fasst somit $0,6 \text{ m}^3$.

Kostenannahmen

Anhand der durch die Elektrolyse produzierten Menge Sauerstoff und der simulierten Speicherdauer wird im *Economical Model* die benötigte Anzahl der Gasflaschenbündel berechnet. Die Investitionen für den Bündelspeicher werden durch die Multiplikation der errechneten Anzahl an Bündeln und den Kosten eines einzelnen Bündels berechnet. Die Anschaffungskosten eines Bündels werden mit 4000 € angenommen. Die Betriebskosten eines Bündels werden aufgrund der seriellen Verschaltung und Steuerung der einzelnen Bündel mit 2% der Investitionen etwas höher eingeschätzt als die des Tankspeichers. Die Lebensdauer wird mit 20 Jahren angenommen.

Sauerstofferzeugung

Für einige Optimierungsszenarien, in denen der vorgegebene Sauerstoffbedarf nicht alleine durch die Elektrolyse gedeckt werden soll, ist die Modellierung von Komponenten zur konventionellen Sauerstofferzeugung notwendig. Da die Verfahren der Sauerstofferzeugung, etwa via Luftzerlegungsanlage, zum Teil sehr komplex sind, die verfahrenstechnischen Details der Technologien gleichzeitig aber für das Modell kaum Bewandtnis haben, wird auf eine getreue Modellierung der Verfahrenstechnik der Anlagen verzichtet. Stattdessen werden die Anlagen im Modell als *black box* betrachtet, die lediglich Stoff- und Energiebilanzen enthalten. Als Eingangsgröße wird dabei alleinig vorgegeben, welche Sauerstoffmengen die Anlagen zu welcher Zeit produzieren sollen. Die Kapazität der Sauerstofferzeugungsanlage ist somit vorgegeben. Abhängig von der zu produzierenden Stoffmenge und der implementierten, maximalen Laständerungsrate von 2% pro Minute, wird anhand des spezifischen Energieverbrauchs die elektrische Leistung der Anlage berechnet. Der modellierte spezifische Energieverbrauch der Anlage bei Nennlast richtet sich dabei nach den in Tabelle 2.1 angegebenen Werten. Je nach betrachtetem Szenario der Sauerstofferzeugung können durch die Modulierung des spezifischen Energieverbrauchs die unterschiedlichen Verfahren der konventionellen Sauerstofferzeugung (LZA, PSA, VPSA) modelliert werden. In den in Kapitel 3.4 vorgestellten Szenarien soll maßgeblich die kryogene Luftzerlegung als Referenzverfahren betrachtet werden. Wird die LZA in Teillast gefahren, steigt der spezifische Energieverbrauch der Anlage. Dabei soll ein linearer Anstieg des Verbrauchs bis zum Erreichen der minimalen Teillast der Anlage angenommen werden. Als minimale Teillast der Anlagen wurde dabei ein Wert von 25% der Nennkapazität angenommen, um der Sauerstofferzeugung durch die Elektrolyse eine möglichst große Flexibilität zu gewähren. Im realen Betrieb ist eine solch geringe Teillast der Anlage derzeit unwahrscheinlich. Mithilfe neuartiger Kontrollsystemen kann jedoch nach Elhelw et al. zukünftig ein Teillastbetrieb bis zu 25% möglich sein, weshalb dieser Wert als minimale Last verwendet wurde [80]. Der spezifische Energieverbrauch der LZA bei minimaler Teillast wird mit $0,57 \text{ kWh/Nm}^3$ angenommen [81]. Abbildung 3.5 stellt den Verlauf des spezifischen Energieverbrauchs in Abhängigkeit der Anlagenlast dar.

Für die Sauerstofferzeugung bezieht die LZA Strom aus dem Netz. Im Gegensatz zu Elektrolyseuren, die nach dem Energiewirtschaftsgesetz von Netzentgelten befreit sind, werden für den Betrieb von Industrieanlagen Netzentgelte fällig. Neben dem Börsenstrompreis sowie netzentgeltgekoppelten Abgaben und der Stromsteuer werden für den Betrieb der Luftzerlegungsanlage zusätzlich Netttonnetzentgelte von $26,70 \text{ €/MWh}$ angesetzt, was den Durchschnittswert für Industriekunden im Jahr 2021 darstellt [82].

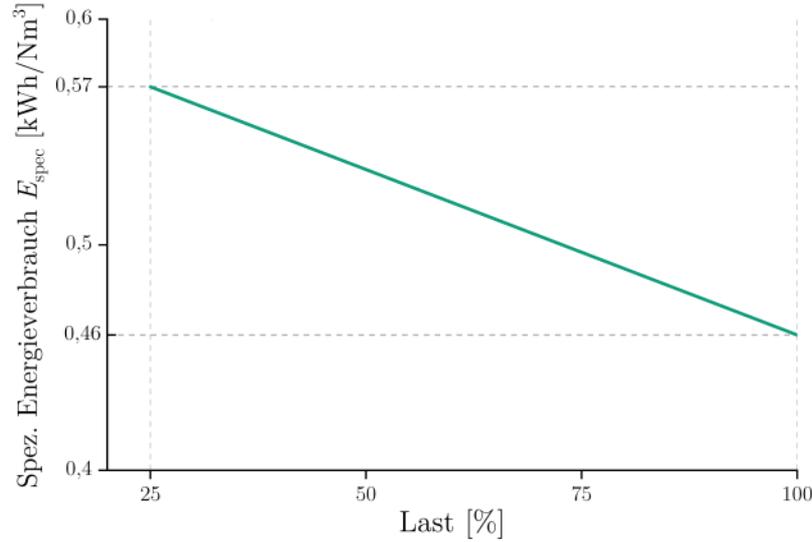


Abbildung 3.5: Spezifischer Energieverbrauch der modellierten Luftzerlegungsanlage

Kostenannahmen

Da Luftzerlegungsanlagen größtenteils in sehr geringen Stückzahlen oder sogar als Einzelanfertigung von nur sehr wenigen Herstellern für privatwirtschaftliche Unternehmen gefertigt werden, sind belastbare Daten bezüglich der Investitionen für eine Luftzerlegungsanlage kaum auffindbar. In dieser Arbeit wurde daher eine Kostenfunktion anhand von Pressemitteilungen oder angekündigten Projekten über den Bau neuer Luftzerlegungsanlagen erstellt. Die Investitionen einer Anlage werden von der Kapazität der Anlage bestimmt. Diese kann beispielsweise durch die Sauerstofferzeugungskapazität in Nm^3/h angegeben werden. Gleichung 3.13 gibt die entwickelte Funktion zur Berechnung der Investitionen einer LZA $CAPEX_{LZA}$ in Mio. € in Abhängigkeit der Sauerstofferzeugungskapazität $\dot{V}_{O_2,out}$ an. Die Funktion zur Berechnung der spezifischen Investitionen einer LZA ist in Abbildung 3.6 dargestellt. Da sich die operativen Kosten der LZA in den Optimierungsszenarien nicht verändern, werden diese in der Berechnung der LCOH nicht berücksichtigt. Die Lebensdauer einer LZA wird mit 30 Jahren abgeschätzt.

$$CAPEX_{LZA} = \dot{V}_{O_2,out} \cdot \left(10,273 \cdot \dot{V}_{O_2,out}^{-0,836}\right) \quad (3.13)$$

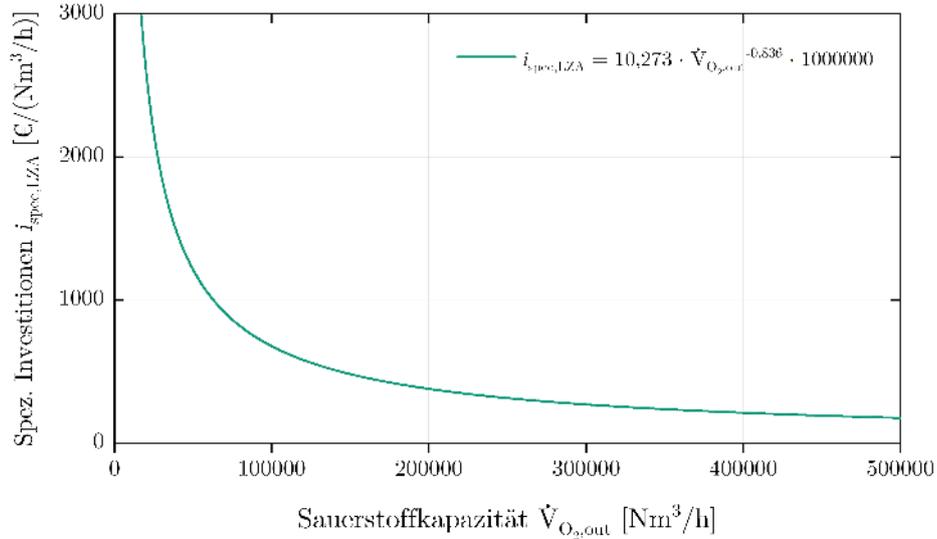


Abbildung 3.6: Spezifische Investitionen einer LZA in Abhängigkeit der Kapazität

Transport

Für den Transport des Sauerstoffs werden in den Szenarien A und B der Transport per Flaschenwagen mit Gasflaschenbündeln und der Trailertransport in *steel tubes* betrachtet. Beide Technologien wurden bereits in Kapitel 2.6 vorgestellt. Der Speicherdruck beträgt bei beiden Transportoptionen 200 bar. Die Verfahrensweisen der jeweiligen Transportoptionen werden in Kapitel 3.3.4 näher erläutert.

Im Modell wird zunächst die Dauer des Hin- und Rücktransports D anhand der vorgegebenen Transportdistanz d , der durchschnittlichen Geschwindigkeit v_{ave} und der Be- und Entladezeit t_{load} nach Gleichung 3.14 ermittelt. Anschließend wird die aufgerundete, ganzzahlige Anzahl der benötigten Fahrten im Jahr n_{trips} in Abhängigkeit der jährlich produzierten Sauerstoffmenge m_{O_2} und der Kapazität des LKWs pro Fahrt m_{cap} nach Gleichung 3.15 berechnet. Die benötigte, ganzzahlige Anzahl an LKWs n_{trucks} kann anschließend unter der Annahme einer definierten jährlichen Auslastung von $t_u = 2000h$ nach Gleichung 3.16 berechnet werden.

$$D = 2 \cdot \frac{d}{v_{\text{ave}}} + t_{\text{load}} \quad (3.14)$$

$$n_{\text{trips}} = \frac{m_{\text{O}_2}}{m_{\text{cap}}} \quad (3.15)$$

$$n_{\text{trucks}} = n_{\text{trips}} \cdot \frac{D}{t_u} \quad (3.16)$$

Kostenannahmen

Im Folgenden sollen Größen, die den Bündeltransport betreffen, mit b und jene, die den *tube*-Trailertransport betreffen, mit t indiziert werden. Die Investitionen für den Bündeltransport per Flaschenwagen $CAPEX_{trans,b}$ setzen sich entsprechend Gleichung 3.17 aus den Investitionen für einen LKW $CAPEX_{truck}$ und einen Sattelaufzieger $CAPEX_{trail}$, multipliziert mit der Anzahl der benötigten LKWs, denen für die Transportbündel auf dem Flaschenwagen $CAPEX_{bun}$ und denen für den Pufferspeicher $CAPEX_{buf}$ zusammen.

Die Investitionen für den Trailertransport mittels Stahlröhren setzen sich entsprechend Gleichung 3.18 aus den Investitionen für einen LKW $CAPEX_{truck}$ und einen *tube*-Trailer $CAPEX_{trailer}$, multipliziert mit der Anzahl der benötigten LKWs sowie denen für die Abfüllanlage $CAPEX_{fuel}$ zusammen. Letztere werden analog zu Reuß mit den Investitionen eines Kompressors, der für die Verdichtung von Speicher- auf Transportdruck nötig ist und einem Faktor von 1,5 für die Installation der Abfüllanlage nach Gleichung 3.19 abgeschätzt [34]. Der Installationsfaktor beinhaltet zusätzliche Kosten für Landerwerb, Stellplätze und Abfüllanlagen für Trailer Terminals [34]. Die Kompressorkosten berechnen sich nach der vorher in diesem Kapitel aufgestellten Gleichung 3.10. Die Annahmen zur Berechnung der Investitionen der Transportoptionen sind Tabelle 3.3 zu entnehmen.

$$CAPEX_{trans,b} = (CAPEX_{truck} + CAPEX_{trail}) \cdot n_{trucks} + CAPEX_{bun} + CAPEX_{buf} \quad (3.17)$$

$$CAPEX_{trans,t} = (CAPEX_{truck} + CAPEX_{trailer}) \cdot n_{trucks} + CAPEX_{fuel} \quad (3.18)$$

$$CAPEX_{fuel} = CAPEX_{comp} \cdot 1,5 \quad (3.19)$$

Die jährlichen Betriebskosten beider Transportoptionen setzen sich, wie in den folgenden Gleichungen 3.20 und 3.21 ersichtlich, jeweils aus fixen Betriebskosten in % der Investitionen und variablen Betriebskosten in €/km zusammen.

$$OPEX_{trans,b} = OPEX_{fix,b} + OPEX_{var} \quad (3.20)$$

$$OPEX_{trans,t} = OPEX_{fix,t} + OPEX_{var} \quad (3.21)$$

Die fixen, jährlichen Betriebskosten des Bündeltransports $OPEX_{fix,b}$ berechnen sich aus den jährlichen Betriebskosten für den LKW $OPEX_{truck}$, den Trailer $OPEX_{trail}$ und die benötigten Bündel $OPEX_{bun}$ nach Gleichung 3.22. Die fixen, jährlichen Betriebskosten des *tube*-Trailertransports $OPEX_{fix,t}$ berechnen sich aus den jährlichen Betriebskosten für den LKW $OPEX_{truck}$, den Trailer $OPEX_{trailer}$ und der Abfüllanlage samt Kompressor $OPEX_{fuel}$ nach Gleichung 3.23. Die variablen, jährlichen Betriebskosten $OPEX_{var}$ sind für beide Optionen identisch und beinhalten Zollkosten $OPEX_{toll}$, Treibstoffkosten $OPEX_{diesel}$ und Personalkosten $OPEX_{lab}$. Diese sind Gleichung 3.24 zu entnehmen. Die Annahmen zur Berechnung der Betriebskosten sind in Tabelle 3.3 ersichtlich. Die Lebensdauer des LKWs wird mit 10

Jahren, die Lebensdauer der restlichen Komponenten wird mit 20 Jahren angenommen.

$$OPEX_{fix,b} = OPEX_{truck} + OPEX_{trail} + OPEX_{bun} \quad (3.22)$$

$$OPEX_{fix,t} = OPEX_{truck} + OPEX_{trail} + OPEX_{fuel} \quad (3.23)$$

$$OPEX_{var} = n_{trips} \cdot ((OPEX_{toll} + OPEX_{diesel}) \cdot d + OPEX_{lab} \cdot D) \quad (3.24)$$

Tabelle 3.3: Annahmen zur Berechnung der Transportkosten

Größe	Bündeltransport	tube-Transport	Einheit	Quelle
$CAPEX_{truck}$	120000	120000	[€]	[83]
$CAPEX_{trail}$	200000	520000	[€]	[32]
$CAPEX_{bun}$	80000		[€]	
$CAPEX_{buf}$	variabel		[€]	
$CAPEX_{fuel}$		$1,5 \cdot CAPEX_{comp}$	[€]	[83]
$CAPEX_{comp}$		Gl. 3.10	[€]	
$OPEX_{truck}$	$1,2\% \cdot CAPEX_{truck}$	$1,2\% \cdot CAPEX_{truck}$	[€/a]	[83]
$OPEX_{trail}$	$2\% \cdot CAPEX_{trail}$	$2\% \cdot CAPEX_{trail}$	[€/a]	[32]
$OPEX_{bun}$	$2\% \cdot (CAPEX_{bun} + CAPEX_{buf})$		[€/a]	
$OPEX_{fuel}$		$2\% \cdot CAPEX_{fuel}$	[€/a]	
$OPEX_{toll}$	0,13	0,13	[€/km]	[83]
$OPEX_{diesel}$	$0,345 \cdot 1,2$	$0,345 \cdot 1,2$	[l/km] · [€/l]	[83]
$OPEX_{lab}$	35	35	[€/h]	[83]
d	0-100	0-100	[km]	
v_{ave}	50	50	[km/h]	
t_{load}	3	3	[h]	
m_{cap}	3460	4850	[kg]	[32]
t_u	2000	2000	[h]	[83]

3.3 Simulationsszenarien A

Die Modellszenarien dieser Arbeit sind in die Szenarien A und B unterteilt. Szenario A stellt dabei ein reines Simulationsszenario dar, während in Szenario B Optimierungen durchgeführt werden. In den Teilszenarien von A werden primär die Sauerstoffgestehungskosten (LCO_{xy}) für verschiedene Nutzungsprofile untersucht. Diese Teilszenarien sollen im Folgenden kurz vorgestellt werden.

3.3.1 Teilszenario A0

In Teilszenario A0 werden mehrere Vorooptimierungen hinsichtlich minimaler Wasserstoffgestehungskosten nach Gleichung 3.3 durchgeführt, um die spätere Simulation der Teilszenarien von A zu ermöglichen. Die elektrische Leistung des Elektrolyseurs wird bei dieser Vorooptimierung vorgegeben. Es soll anschließend eine optimale Systemkonfiguration gefunden werden, mit der die kosteneffektivste Wasserstoffherzeugung ermöglicht wird. Die Optimierungsvariablen, die der Algorithmus dabei zwischen den vorgegebenen Grenzen wählen kann, sind die installierte Leistung der Photovoltaikanlage P_{PV} , die installierte Leistung der Windenergieanlage P_{Wind} und die obere Preisgrenze des Netzstrombezugs x_{grid} . Das Referenzszenario, der sogenannte *Base Case*, umfasst einen 1 MW-Elektrolyseur im Gleichdruckbetrieb bei 35 bar mit PV-, Wind- und Netzstrombezug. Der erzeugte Wasserstoff wird im Anschluss gereinigt, verdichtet und gespeichert. Im Teilszenario A0 ist keine Sauerstoffnutzung vorgesehen. Es können so die LCOH des Referenzszenarios mit denen der Szenarien mit Sauerstoffnutzung verglichen und so das ökonomische Sauerstoffnutzungspotenzial untersucht werden. Es werden außerdem im logarithmischen Abstand Konfigurationen mit Elektrolyseurleistungen von 0,1, 1, 10 und 100 MW untersucht, um potenzielle Skaleneffekte aufzudecken. Abbildung 3.7 zeigt schematisch die Wasserstoffherzeugung des Teilszenarios A0.

Base Case (LCOH)

A0

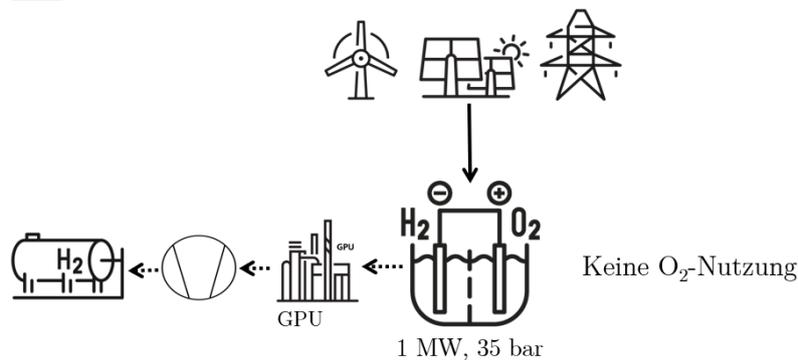


Abbildung 3.7: Teilszenario A0: schematische Darstellung des modellierten PtG-Systems

3.3.2 Teilszenario A1

In Teilszenario A1 wird der erzeugte Sauerstoff in einer Gasreinigungsanlage (GPU) gereinigt und anschließend genutzt. Die Simulation der in Teilszenario A0 voroptimierten Konfigurationen liefert die Sauerstoffgestehungskosten des Systems nach Gasreinigung auf über 99,95 %. In die Sauerstoffgestehungskosten fließen die Investitionen, die Betriebskosten und die Energiekosten der GPU ein. Abbildung 3.8 zeigt schematisch das modellierte Power-to-Gas-System des Teilszenarios A1.

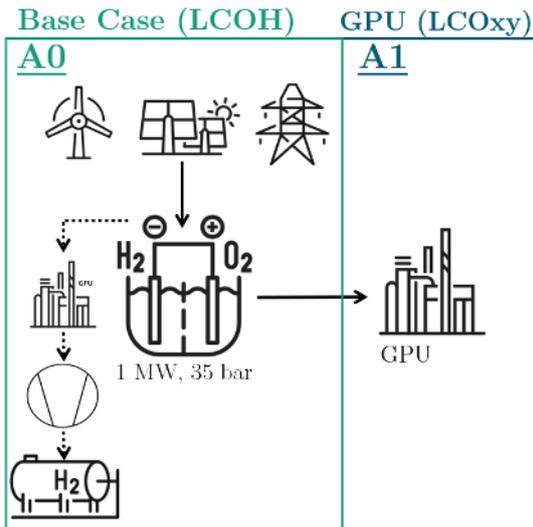


Abbildung 3.8: Teilszenario A1: schematische Darstellung des modellierten PtG-Systems

3.3.3 Teilszenario A2

Teilszenario A2 simuliert die Sauerstoffgestehungskosten nach Gasreinigung und anschließender Verdichtung und Speicherung. Ausgehend von der Gasreinigung aus Szenario A1 werden zwei Speicheroptionen betrachtet: die Bündelspeicherung bei 200 bar und die Tankspeicherung bei 80 bar. Der Kompressor wird je nach Speicheroption so dimensioniert, dass der gewünschte Speicherdruck erreicht wird. Die Gestehungskosten werden außerdem in Abhängigkeit der gewählten Speicherdauer untersucht. Die Speicherdauer kann als Sensitivität der Simulation für beide Optionen mit 6, 12, 24 und 48 h eingestellt werden. In Abhängigkeit der Speicherdauer und der untersuchten Speicheroption werden in der Simulation das benötigte Speichervolumen und folgend die Investitionen und Betriebskosten des Speichers simuliert. Im Fall der Bündelspeicherung wird zudem die benötigte, ganzzahlige Anzahl der Bündel kalkuliert. Mit der produzierten Menge und den Ausgaben, die durch Gasreinigung und Speicherung des Sauerstoffs entstehen, werden schließlich die Sauerstoffgestehungskosten berechnet. Abbildung 3.9 zeigt schematisch das modellierte PtG-System des Teilszenarios A2.

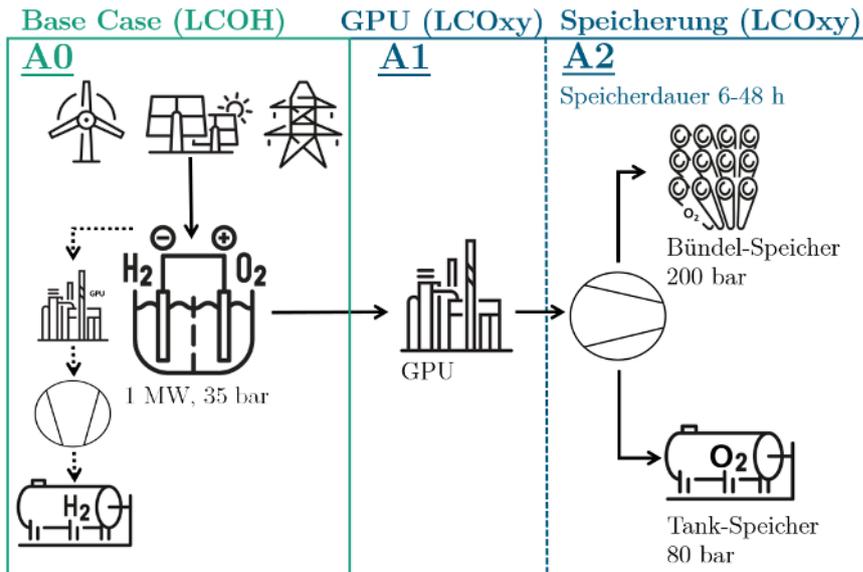


Abbildung 3.9: Teilszenario A2: schematische Darstellung des modellierten PtG-Systems

3.3.4 Teilszenario A3

In Teilszenario A3 wird zusätzlich zu den vorher betrachteten Komponenten der Transport des Sauerstoffs simuliert. Ausgehend von den in A2 untersuchten Speichertechnologien werden zwei Transportoptionen untersucht: der Bündeltransport und der *tube*-Trailertransport bei jeweils 200 bar. Der Speicher ist für beide Transportoptionen auf eine Speicherung für 12 h ausgelegt.

Der Bündeltransport setzt in dieser Arbeit die Bündelspeicherung als Speichertechnologie voraus. Ist der Bündelspeicher gefüllt, können die einzelnen Bündel auf den Flaschenwagen geladen werden und fungieren dann als Transportbündel. Eine zweite Bündelgarnitur, die im Idealfall vorher als Transportgarnitur gedient hat, kann anschließend wieder als Bündelspeicher angeschlossen werden. Dieser Vorgang wird fortan als Changieren bezeichnet. Beim Changieren ist eine Vorgehensweise zu wählen, die die Sauerstoffproduktion nicht unterbrechen lässt und möglichst wenig stofflichen Verlust zulässt. Die Garnitur für den Bündeltransport umfasst 20 Flaschenbündel und passt somit auf die Ladefläche des Flaschenwagens. Zusätzlich wird ein kleinerer Bündelspeicher als Pufferspeicher vorgesehen, um Engpässe und etwaige Verzögerungen des Changierens, z.B. durch eine verspätete Ankunft des Flaschenwagens, zu überbrücken. Die Speicherzeit des Puffers ist auf 3 Stunden festgelegt. Durch das Changieren des Speicher- und Transportbündels entfällt die ansonsten notwendige Abfüllanlage sowie ein zweiter Kompressor zum Befüllen des Transportspeichers.

Der *tube*-Trailertransport schließt sich an die Tankspeicherung und die darauffolgende Station zur Trailerbetankung an, die den Sauerstoff aus dem Speicher von 80 auf 200 bar verdichtet und in die Röhren auf dem Trailer befördert. Anders als beim Bündeltransport verbleiben die *steel tubes* auf dem Trailer und werden nicht changiert.

Um die Gestehungskosten nach Transport des Sauerstoffs näher zu untersuchen, kann im Modell die Transportdistanz zwischen 0 und 100 km variiert werden. Mit der produzierten Sauerstoffmenge werden in Abhängigkeit der gewählten Speicheroption und -distanz die Sauerstoffgestehungskosten berechnet. Abbildung 3.10 zeigt schematisch das modellierte PtG-System des Teilszenarios A3.

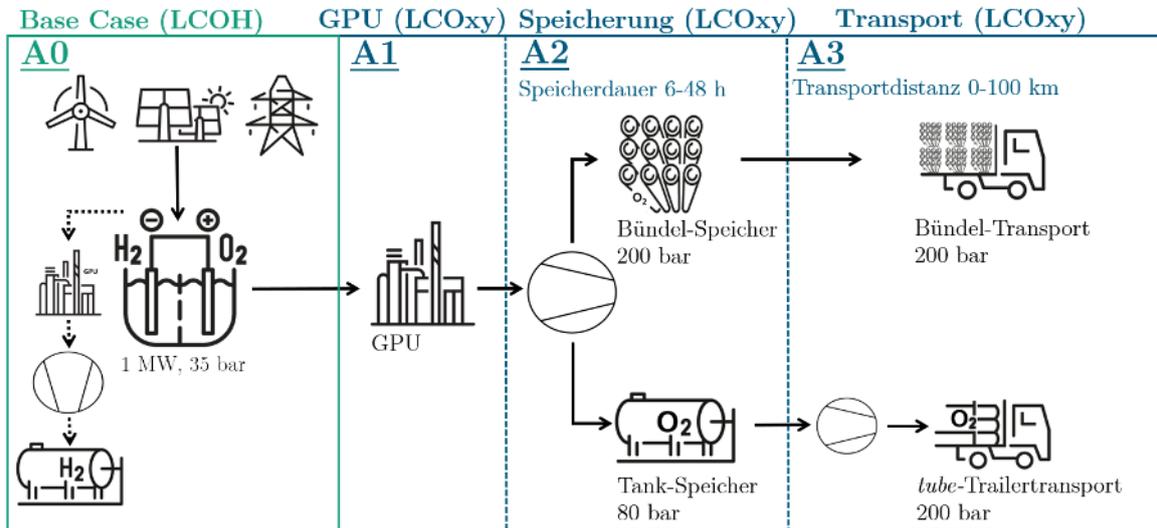


Abbildung 3.10: Teilszenario A3: schematische Darstellung des modellierten PtG-Systems

3.4 Optimierungsszenarien B

In Szenario B werden konkrete Verwertungspfade des Sauerstoffs durch Optimierung hinsichtlich minimaler LCOH untersucht. Durch den Vergleich der LCOH bei Wasserstofferzeugung mit Sauerstoffnutzung mit denen entsprechender Referenzsystemen ohne Sauerstoffnutzung kann der ökonomische Einfluss der Sauerstoffnutzung auf die Wasserstofferzeugung quantifiziert werden. In allen Optimierungsszenarien wird ein fiktives, anwendungslosgelöstes Werksgelände mit einem vorgegebenen, konstanten Sauerstoffbedarf modelliert. Es wird weiterhin ein Elektrolyseur in identischer Ausführung zu Szenario A auf dem Werksgelände zur simultanen Wasserstoff- und Sauerstofferzeugung betrachtet, dessen elektrische Leistung als Optimierungsvariable in definierten Grenzen vom Algorithmus frei gewählt werden kann. Für alle Teilszenarien B schließt sich an die Elektrolyse eine Gasreinigungsanlage, ein Kompressor und die Tankspeicherung bei 80 bar an.

In den Teilszenarien von B soll nun untersucht werden, ob und unter welchen Bedingungen durch die Nutzung des Sauerstoffs ein ökonomischer Vorteil erzeugt werden kann. Die Nutzung des Sauerstoffs und deren ökonomischer Einfluss auf die Wasserstoffgestehungskosten werden in den Teilszenarien auf unterschiedliche Weise ausgestaltet. Der ökonomische Einfluss und die daraus potenziell resultierenden Gewinne werden in allen Szenarien durch die in Kapitel 2.8.1

beschriebene Restwertmethode berechnet. Die Kosten für die Erzeugung des Nebenprodukts Sauerstoff werden demnach zusammen mit potenziellen Einsparungen, beispielsweise durch Stromkostenreduzierung der LZA, auf die Kosten des Hauptprodukts Wasserstoff, den LCOH, umgelegt. Die so kalkulierten Wasserstoffgestehungskosten bei Sauerstoffnutzung $LCOH_{Oxy}$ werden anschließend nach Gleichung 3.25 von den LCOH des Referenzsystems ohne Sauerstoffnutzung $LCOH_{ref}$ subtrahiert, sodass sich eine Kostendifferenz Δ_{LCOH} ergibt, die allein aus der Sauerstoffnutzung resultiert. Der ökonomische Vorteil der Sauerstoffnutzung kann auf diese Weise quantifiziert werden. Ist Δ_{LCOH} positiv, ergibt sich ein ökonomischer Vorteil aus der Sauerstoffnutzung. Eine negative Kostendifferenz ist äquivalent zu finanziellen Verlusten durch die Sauerstoffnutzung. Die modellierten Verwertungspfade des Sauerstoffs aus der Elektrolyse sowie die verschiedenen Betriebsweisen des Elektrolyseurs werden in den folgenden Kapiteln vorgestellt. Tabelle A1 im Anhang fasst die Optimierungsvariablen der einzelnen Teilszenarien der Optimierung zusammen. Eine graphische Übersicht über die Teilszenarien sowie eine tabellarische Übersicht über die Sauerstoff- bzw. Wasserstoffbedarfe der einzelnen Szenarien finden sich in Kapitel 3.4.5.

$$\begin{aligned}\Delta_{LCOH} &= LCOH_{ref} - LCOH_{Oxy} & (3.25) \\ \Delta_{LCOH} > 0 &\quad \Rightarrow \textit{konomischer Vorteil} \\ \Delta_{LCOH} < 0 &\quad \Rightarrow \textit{konomischer Nachteil}\end{aligned}$$

3.4.1 Teilszenario B1: Bestehende LZA in Teillastbetrieb

In Teilszenario B1 wird nun angenommen, dass sich eine bestehende LZA auf dem Werksgelände befindet, die den Sauerstoffbedarf deckt. Der Sauerstoffbedarf beträgt $10\,000\text{ Nm}^3/\text{h}$ und stellt damit den Sauerstoffbedarf eines mittelgroßen, industriellen Abnehmers dar. Der Bedarf entspricht in etwa der Erzeugungskapazität einer kleinen industriellen Luftzerlegungsanlage. Es soll untersucht werden, ob durch die Nutzung des Elektrolysesauerstoffs Einsparungen erzielt werden können, indem die LZA variabel in Teillast betrieben wird und so Energiekosten reduziert werden. Es wird dabei vorausgesetzt, dass der Wasserstoff aus der Elektrolyse entweder ohnehin auf dem Werksgelände verbraucht oder an einen externen Verbraucher gewinnbringend verkauft wird. Die minimale Teillast der Anlage wird, wie in Kapitel 3.2 begründet, auf 25 %, die maximale Laständerungsrate auf 2 % pro Minute festgelegt. Stromkosteneinsparungen, die durch den Teillastbetrieb der LZA erzielt werden, werden als negative Kosten angerechnet und ergeben so einen ökonomischen Vorteil. Die Stromkosten durch einen Volllastbetrieb der LZA werden dabei von den tatsächlichen Stromkosten durch den Teillastbetrieb der Anlage abgezogen. Es sei angemerkt, dass der Energiebedarf der Anlage durch den Teillastbetrieb zwar absolut sinkt, der spezifische Energiebedarf pro kg produziertem Sauerstoff jedoch steigt. Durch die Optimierung wird dahingehend eine kostenoptimale Anlagenkonfiguration angestrebt, die den Sauerstoffbedarf teilweise durch die Elektrolyse und zum anderen

Teil durch die LZA deckt. Neben der Teillastfähigkeit der Anlage bietet auch der Speicher durch die Menge des ein- und ausgespeicherten Sauerstoffs eine gewisse Flexibilität in der Sauerstofferzeugung.

3.4.2 Teilszenario B2: Dimensionierung einer neuen LZA in Volllastbetrieb

Teilszenario B2 betrachtet ein Szenario, in dem auf einem Werksgelände eine neue Luftzerlegungsanlage zur Deckung des Sauerstoffbedarfes gebaut werden soll. Zusätzlich soll ein Elektrolyseur implementiert werden, der neben der primären Wasserstofferzeugung ebenfalls einen Teil des Sauerstoffbedarfes deckt. Der Sauerstoffbedarf wird analog zu Szenario B1 mit $10\,000\text{ Nm}^3/\text{h}$ angenommen. Durch den Teilmassenstrom der Elektrolyse kann die LZA entsprechend kleiner dimensioniert werden, sodass die Investitionen der Anlage kleiner ausfallen als bei der Deckung des gesamten Bedarfes durch die Anlage. Die Investitionen richten sich dabei nach der Sauerstofferzeugungskapazität der Anlage, welche neben der Leistung des Elektrolyseurs eine Optimierungsvariable darstellt. Der kostenoptimale Anteil der Deckung des Sauerstoffbedarfes durch die Elektrolyse bzw. die LZA wird somit durch die Optimierung bestimmt. Die modellierte Degression der Investitionen in Abhängigkeit der Erzeugungskapazität der LZA entspricht Gleichung 3.13. Bei teilweiser Deckung des Bedarfes durch Elektrolysesauerstoff ergeben sich Einsparungen durch die reduzierten Investitionen einer LZA mit geringerer Kapazität.

Neben den Einsparungen durch reduzierte Investitionen können ebenfalls Stromkosteneinsparungen durch die angepasste Dimensionierung der Anlage erzielt werden. Diese werden durch die Gegenüberstellung der Stromkosten bei vollständiger Bedarfsdeckung der LZA mit denen bei teilweiser Deckung durch die Elektrolyse berechnet.

3.4.3 Teilszenario B3: Substitution von LOX-Anlieferungen

In Teilszenario B3 findet im Referenzsystem eine Deckung des Sauerstoffbedarfes durch die Lieferung von Flüssigsauerstoff per Tankwagen statt. Der modellierte Sauerstoffbedarf wird aufgrund des typischen Einsatzbereiches von Flüssigsauerstofflieferungen mit $1000\text{ Nm}^3/\text{h}$ angenommen. Der Bedarf soll nun anstelle des Flüssigsauerstoffs durch die Elektrolyse gedeckt werden. Als Bezugspreis des Flüssigsauerstoffs wird ein Preis von $0,08\text{ €/kg}$ angenommen [35]. Die Menge des Sauerstoffbedarfes, die nicht durch die Elektrolyse bereitgestellt werden kann, muss durch die externe Anlieferung von Sauerstoff ausgeglichen werden. Da die Ausgleichsmenge möglichst gering gehalten werden soll, wird hier von druckgespeichertem, gasförmigem Sauerstoff in Gasflaschen ausgegangen. Aufgrund der kleineren Abnahmemenge und der Annahme, dass dabei keine festen Abnahmeverträge geschlossen werden, wird für den externen Sauerstoff $O_{2,ext}$ ein deutlich höherer Sauerstoffpreis von $0,12\text{ €/kg}$ angenommen. Bei Reduzierung der angelieferten Menge Sauerstoff können sich durch die Deckung des Bedarfes durch Elektrolysesauerstoff Einsparungen ergeben. Diese werden durch die Gegenüberstellung der Kosten für die vollständige Deckung durch Flüssigsauerstoff und den Kosten bei Deckung des

Bedarfes durch die Elektrolyse berechnet.

3.4.4 Betriebsweisen des Elektrolyseurs

Zusätzlich zu den Verwertungspfaden werden für jedes Teilszenario drei verschiedene Betriebsweisen des Elektrolyseurs betrachtet. Der Betrieb des Elektrolyseurs wird dabei an jeweils eine möglichst zu erfüllende Priorität geknüpft. Diese Prioritäten werden im Folgenden kurz beschrieben.

Sauerstoffgeführter Betrieb

Im sauerstoffgeführten Betrieb des Elektrolyseurs wird die Erfüllung des Sauerstoffbedarfes priorisiert. Der Betrieb, also vorrangig Volllaststundenzahl und Last des Elektrolyseurs, wird derart ausgestaltet, dass die Elektrolyse zusammen mit der LZA oder der LOX-Anlieferung den Sauerstoffbedarf stets bedienen kann. Der Elektrolyseur bezieht dabei Strom aus einer PV- und Windenergieanlage sowie aus dem Netz. Der Strombezug richtet sich durch die erforderliche Volllaststundenzahl des Elektrolyseurs ebenfalls nach dem Sauerstoffbedarf. Der Wasserstoff wird, obwohl dieser zu jeder Zeit das ökonomische Hauptprodukt der Elektrolyse bleibt, nach der priorisierten Sauerstofferzeugung produziert und wird nach der Speicherung nicht weiter betrachtet. Es ist somit für die Modellergebnisse irrelevant, zu welchem Zeitpunkt welche Menge Wasserstoff erzeugt wird, da kein Wasserstoffbedarf bedient werden muss. Hierin liegt der Unterschied zum wasserstoffgeführten Betrieb. Die Erfüllung des Sauerstoffbedarfes wird im Modell durch die Einführung fiktiver Strafzahlungen sichergestellt. Dabei wird ein Preis in €/kg eingeführt, der auf die Differenzmenge zwischen Bedarf und tatsächlich produziertem Sauerstoff erhoben wird. Durch eine ausreichend hohe Strafzahlung wird in der Optimierung die Nichterfüllung des Bedarfes vermieden und ein sauerstoffgeführter Bedarf gewährleistet.

Wasserstoffgeführter Betrieb

Für die wasserstoffgeführte Betriebsweise wird zusätzlich zum Sauerstoffbedarf ein Wasserstoffbedarf von $1000 \text{ Nm}^3/\text{h}$ eingeführt. Die Sauerstofferzeugung aus der Elektrolyse richtet sich hier nach der Wasserstofferzeugung. Der Sauerstoff wird als klassisches Nebenprodukt der Kuppelproduktion behandelt, dessen Erzeugung der Wasserstofferzeugung untergeordnet ist. Insbesondere bei einer dualen Nutzung von Wasserstoff und Sauerstoff auf dem Werksgelände stellt diese Betriebsweise die realistischste dar, da der Wasserstoff die höhere Werthaltigkeit besitzt. Eine verminderte Sauerstofferzeugung durch die priorisierte Wasserstofferzeugung kann durch die LZA oder die LOX-Anlieferung ausgeglichen werden. Der zu erfüllende Wasserstoff kann im Modell hingegen alleine aus der Elektrolyse gedeckt werden, da hier keine weitere Erzeugungsmethode zur Verfügung steht. Wie oben beschrieben wird eine Strafzahlung auf die Nichterfüllung des Sauerstoffbedarfes erhoben. Analog dazu wird bei der wasserstoffgeführten Betriebsweise ebenfalls eine Strafzahlung auf die Nichterfüllung des Wasserstoffbedarfes erhoben.

EE-geführter Betrieb

Im EE-geführten Betrieb bezieht der Elektrolyseur ausschließlich Strom aus der PV- und der Windenergieanlage. Der Netzstrombezug entfällt hingegen. Der Elektrolyseur kann folglich nur dann Wasserstoff erzeugen, wenn Strom aus erneuerbaren Energien zur Verfügung steht. Auch in dieser Betriebsweise muss kein Wasserstoffbedarf bedient werden. Der Anteil des Elektrolysesauerstoffs am gesamten Sauerstoffbedarf richtet sich nach der Verfügbarkeit der erneuerbaren Energien. Steht gerade keine Energie aus der PV- und Windenergieanlage zur Verfügung, muss der kontinuierliche Sauerstoffbedarf durch den Sauerstoffspeicher, der LZA oder der LOX-Anlieferung gedeckt werden. Es sei angemerkt, dass nur in dieser Betriebsweise eindeutig grüner Wasserstoff produziert werden kann. Dies gilt für den Fall, dass für den Netzstrombezug der oben genannten Betriebsweisen keine Herkunftsnachweise für grünen Strom erworben wurden.

3.4.5 Übersicht über Teilszenarien der Optimierung

Abbildung 3.11 stellt eine schematische Übersicht über die Verwertungspfade der Teilszenarien der Optimierung dar. Tabelle 3.4 stellt eine Übersicht über die Bedarfe und Preisannahmen der einzelnen Teilszenarien und Betriebsweisen dar.

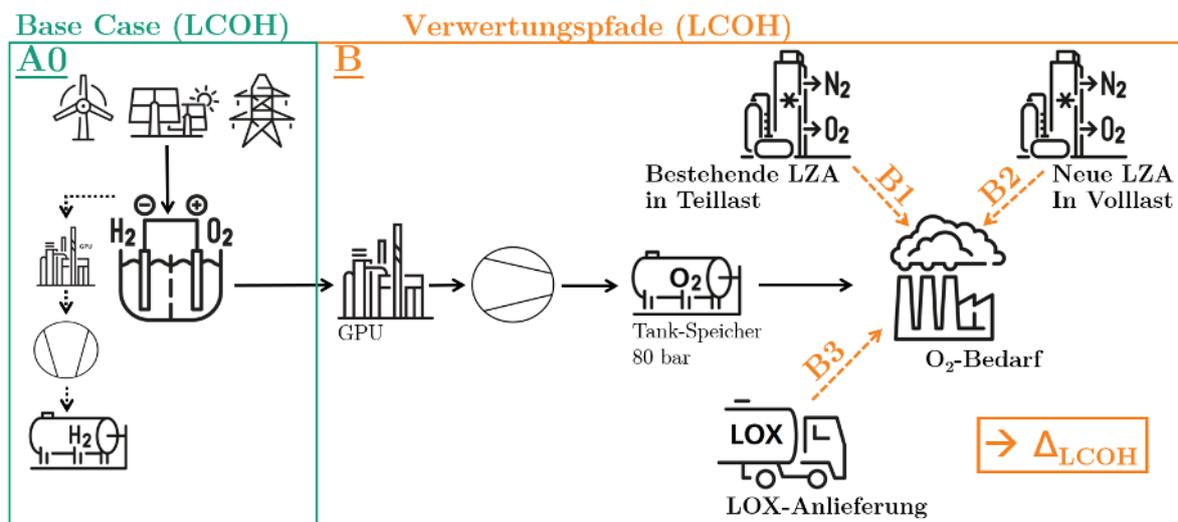


Abbildung 3.11: Schematische Übersicht über die Teilszenarien der Optimierung

Tabelle 3.4: Übersicht über die Bedarfe und Preisannahmen der Teilszenarien

		O₂-Bedarf	H₂-Bedarf	LOX-Preis	O_{2,ext}-Preis
		[Nm ³ /h]	[Nm ³ /h]	[€/kg]	[€/kg]
B1	O ₂	10 000			
	H ₂	10 000	1000		
	EE	10 000			
B2	O ₂	10 000			
	H ₂	10 000	1000		
	EE	10 000			
B3	O ₂	1000		0,08	0,12
	H ₂	1000	1000	0,08	0,12
	EE	1000		0,08	0,12

3.4.6 Räumliche Sauerstoffpotenzialanalyse in GIS

In dieser Arbeit soll neben der Modellierung der oben vorgestellten Szenarien eine räumliche Analyse der Sauerstoffpotenziale in Deutschland mit der Geoinformationssoftware *QGIS* durchgeführt werden. Die Potenzialerhebung soll dabei einen Beitrag zum Anlauf der Nutzung von Sauerstoff aus der Elektrolyse leisten, indem Sauerstoffanwender in Deutschland sowie deren Potenziale lokalisiert und anschließend visualisiert werden. Die erhobenen Potenziale stellen dabei keine derzeit existierenden, realen Bedarfe dar, sondern schätzen potenzielle Bedarfe der Zukunft ab. Die erhobenen Potenziale implizieren dabei beispielsweise auch die zukünftige Umstellung von luftbasierten auf sauerstoffbasierte Verfahren wie das Oxyfuel-Verfahren.

Da die Potenzialanalyse die Nutzung von Elektrolysesauerstoff vorantreiben soll, wird sich bezüglich der Methodik an der Arbeit von Neuwirth et al. orientiert, die eine Analyse der zukünftigen Potenziale für Wasserstoff in Deutschland zum Ziel hat [84]. Die Wasserstoffpotenziale in TWh/a basieren dabei auf dem branchenspezifischen Durchsatz in Tonnen und dem fossilen Energiebedarf heutiger Industriestandorte.

Für die Erhebung der Sauerstoffpotenziale in dieser Arbeit wird auf Basis der Ergebnisse der Literaturrecherche aus Kapitel 2 bezüglich Sauerstoffanwendungen in der Industrie eine Auswahl an Industrien vorgenommen. Kriterien für die Auswahl waren dabei das geschätzte Sauerstoffpotenzial der Industrien und die Datenverfügbarkeit für die Potenzialanalyse. Sowohl die lokalisierten Industriestandorte als auch die geschätzten Potenziale der Standorte besitzen dabei keinen Anspruch auf Vollständigkeit, sondern sollen einen räumlichen Überblick und eine quantitative Einordnung der Sauerstoffpotenziale in Deutschland vermitteln. Für jede Branche wurde basierend auf der vorausgegangenen Literaturrecherche ein branchenspezifischer Faktor zur Quantifizierung der Potenziale bestimmt. Dieser kann je nach einge-

setztem Verfahren variieren. Der spezifische Faktor wurde dann mit der jeweiligen Kapazität des Standorts multipliziert. Tabelle 3.5 stellt die Annahmen der Sauerstoffpotenzialanalyse in dieser Arbeit sowie die betrachteten Branchen dar.

Tabelle 3.5: Übersicht über die Branchen und Annahmen der GIS-Potenzialanalyse

Branche	Verfahren/Produkt	Spez. Faktor	Einheit	Quelle
Stahlindustrie	Hochofenverfahren	143	Nm ³ /t Rohstahl	[42]
	Sauerstoffblasverfahren	143	Nm ³ /t Rohstahl	[42]
	Elektrolichtbogenverfahren	57	Nm ³ /t Rohstahl	[42]
Glasindustrie	Behälterglas	222	Nm ³ /t Glas	[35]
	Flachglas	222	Nm ³ /t Glas	[35]
	Spezialglas	222	Nm ³ /t Glas	[35]
Zementindustrie	Zement/Klinker	200	Nm ³ /t Klinker	[53]
Papierindustrie	Sauerstoffdelignifizierung	11	Nm ³ /t Zellstoff	[56]
Kläranlagen	Belebtschlammverfahren	65	Nm ³ /EW	[62]
Krankenhäuser	Medizinischer Sauerstoff	350	Nm ³ /Bett	[66]

4 Auswertung der Ergebnisse

In diesem Kapitel sollen die Ergebnisse des Modells zur Untersuchung der Sauerstoffnutzung aus der Elektrolyse vorgestellt und diskutiert werden. Auf die Diskussion der Simulationsergebnisse aus Szenario A folgt eine techno-ökonomische Analyse der Optimierungsergebnisse aus Szenario B für konkrete Sauerstoffnutzungspfade. Anschließend werden die Simulations- und Optimierungsergebnisse zusammengeführt, um daraus Schlussfolgerungen bezüglich der Nutzung von Elektrolysesauerstoff zu ziehen. Zuletzt werden die Ergebnisse der räumlichen Potenzialanalyse in *QGIS* vorgestellt und diskutiert.

4.1 Ergebnisse der Simulationsszenarien A

Für Szenario A sollen nun die Simulationsergebnisse zur Untersuchung der Sauerstoffgestehungskosten vorgestellt und diskutiert werden. Die Technologien zur Konditionierung und Bereitstellung des Sauerstoffs sollen entlang der gesamten Wertschöpfungskette simuliert und techno-ökonomisch analysiert werden. Als ökonomische Vergleichsgröße dienen dabei die Sauerstoffgestehungskosten. Die Technologien sowie die resultierenden Gestehungskosten werden im Anschluss anhand technischer und ökonomischer Parameter sowie Ergebnissen der Simulation bewertet. Die in Szenario A betrachteten Glieder dieser Wertschöpfungskette sind die Sauerstofferzeugung durch die Elektrolyse, die Gasreinigung, die Verdichtung, die Speicherung und der Transport. Grundlage für die Betrachtung der Sauerstoffgestehungskosten der Teilszenarien ist der *Base Case* mit einer Elektrolyseleistung von 1 MW. Die zunächst vorgestellten Ergebnisse der Voroptimierung aus Teilszenario A0 dienen der Einordnung der Simulationsergebnisse der folgenden Teilszenarien von A.

4.1.1 Teilszenario A0

In Abbildung 4.1 sind die Ergebnisse der Voroptimierung hinsichtlich minimaler LCOH für definierte Elektrolyseleistungen von 0,1, 1, 10 und 100 MW dargestellt und nach den jeweiligen Kostenanteilen der Komponenten aufgeschlüsselt.

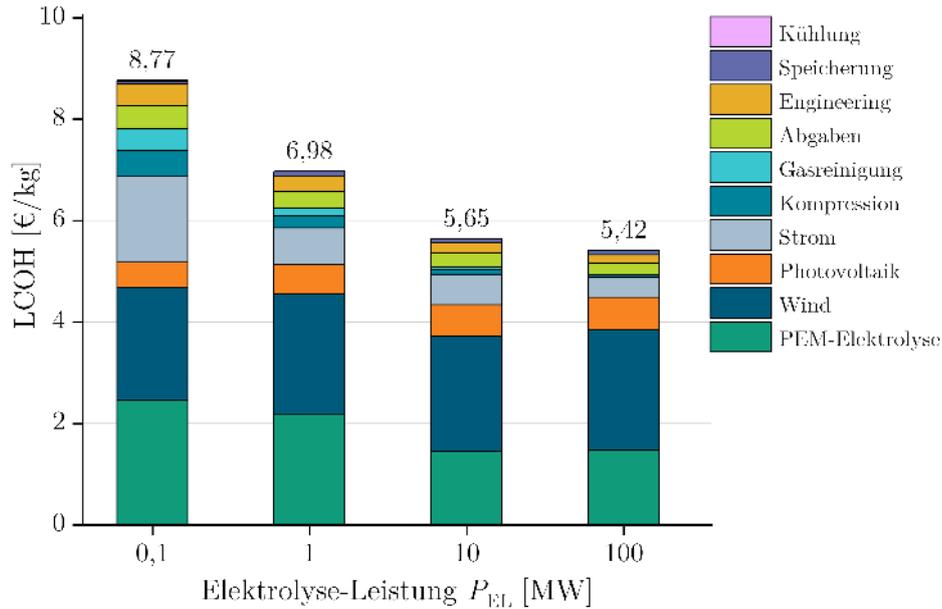


Abbildung 4.1: Ergebnisse der Voroptimierung hinsichtlich minimaler LCOH

Skaleneffekte der Wasserstoffgestehungskosten

Abbildung 4.1 ist zunächst zu entnehmen, dass die durch die Voroptimierung erhaltenen, minimalen LCOH mit steigender Elektrolyseleistung abnehmen. Dies ist auf Skaleneffekte der Systemkomponenten zurückzuführen. Die mit Skaleneffekten behafteten Komponenten sind der PEM-Elektrolyseur, der Kompressor und die Gasreinigungsanlage. Die Skaleneffekte kommen durch sinkende leistungsspezifische Investitionen der Komponenten zustande und sind an den jeweiligen Funktionen für die spezifischen Investitionen aus Kapitel 3.2 abzulesen. Die Degression der LCOH wird dabei primär durch die Kostendegression des Elektrolyseurs bestimmt, da der PEM-Elektrolyseur von den drei mit Skaleneffekten behafteten Komponenten, wie in der Abbildung erkennbar, den größten Kostenanteil bildet.

Die Kostendegression durch die Skalierung dieser Komponenten ist unter anderem in der relativen Abnahme der Fixkosten der Komponenten wie zum Beispiel Kosten für Planung und Entwicklung und Kosten für leistungsunabhängige Bauteile wie Elektronik begründet. Auch Mengenrabatte in der Beschaffung von Material und Komponenten in der Produktion können dabei eine Rolle spielen.

Es ist weiterhin ersichtlich, dass die Reduktion der LCOH bei geringeren Elektrolyseleistungen deutlich stärker ausfällt als im höheren Leistungssegment. So beträgt die Reduktion der LCOH bei Erhöhung der Leistung von 0,1 auf 1 MW rund 21 %, bei der Erhöhung von 10 auf 100 MW bei gleichem Steigerungsfaktor lediglich 4 %. Dies spricht für eine Sättigung der Kostendegression im höheren Leistungssegment infolge stärker ins Gewicht fallenden Materialkosten und konstanten spezifischen Kosten für Komponenten wie Windenergieanlagen, PV-Anlagen und Speichern. Die angesprochenen Skaleneffekte spielen vor allem in den Optimierungsszenarien

B eine fundamentale Rolle, da sie aufgrund der Optimierung hinsichtlich minimaler LCOH zu einer Tendenz der Optimierung hinzu Elektrolysesystemen mit hoher installierter Leistung führen.

Kostenanteile der Komponenten

Aus der oben stehenden Abbildung ist außerdem die Kostenstruktur der LCOH ersichtlich. Die Zusammensetzung der Kosten ändert sich über die verschiedenen Elektrolyseurleistungen merklich. Die absoluten Kosten des Elektrolyseurs sinken mit steigender Elektrolyseurleistung aufgrund der Skaleneffekte, während die absoluten Kosten der erneuerbaren Energien annähernd konstant bleiben. Die Kosten der restlichen Komponenten, insbesondere die des Strombezugs, sinken dagegen stark.

Die relativen Kostenanteile der LCOH sind in Abbildung 4.2 aufgetragen. Aus Gründen der Übersichtlichkeit werden hierbei kleinere Kostenanteile unter *Sonstige* zusammengefasst. Es ist zunächst ersichtlich, dass die PEM-Elektrolyse und die Windenergieanlage die größten Kostenanteile bilden.

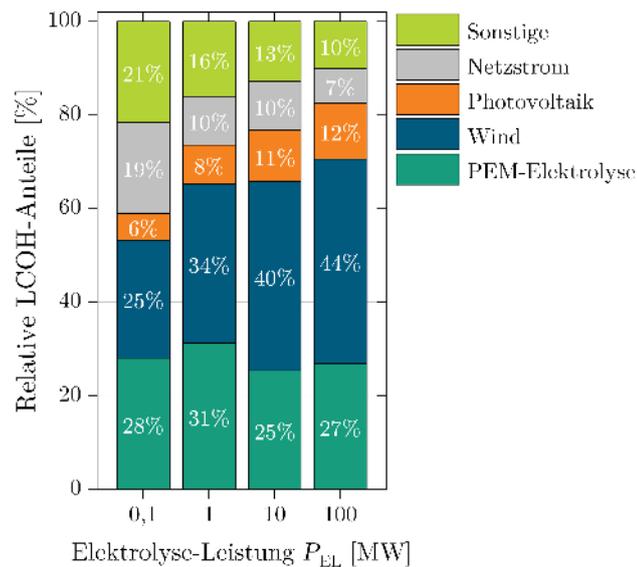


Abbildung 4.2: Relative Kostenanteile der LCOH in Abhängigkeit der Elektrolyseleistung

Die Kostenanteile der erneuerbaren Energien nehmen mit steigender Elektrolyseleistung zu, während die relativen Kosten des Netzstrombezugs stark sinken. Dies spricht für eine vermehrte Deckung des Strombedarfs durch erneuerbare Energien bei steigender Elektrolyseurleistung. Vergleicht man die aus den Optimierungsergebnissen resultierende, jährlich genutzte Energiemenge der erneuerbaren Energien mit der aus dem Stromnetz, wird diese These bestätigt. So sinkt die Quote des Netzstroms am jährlichen Gesamtstromverbrauch des Systems mit steigender Elektrolyseurleistung von rund 28 % bei 0,1 MW auf 14 % bei 100 MW. Wie schon oben beschrieben, reduzieren sich die Kostenanteile der restlichen Komponenten deutlich,

da bei steigender Elektrolyseleistung die Kosten für den Elektrolyseur und den Strombezug dominieren.

Resultierende Optimierungsvariablen

Tabelle 4.1 zeigt die aus der Optimierung resultierenden Optimierungsvariablen des jeweils kostenoptimalen Falls. Die Variablen der Voroptimierung sind die Leistung der PV-Anlage P_{PV} in MW, die Leistung der Windenergieanlage P_{Wind} in MW und die obere Preisgrenze x_{grid} in €/MWh, bis zu der Strom aus dem Netz bezogen wird.

Tabelle 4.1: Optimierungsvariablen der Voroptimierung

P_{EL} [MW]	P_{PV} [MW]	P_{Wind} [MW]	x_{grid} [€/MWh]
0,1	0,11	0,21	390,11
1	1,10	1,78	53,79
10	10,52	15,82	49,36
100	102,18	151,32	44,05

Wie zu erwarten gewesen, steigt die ausgebaute Leistung beider erneuerbaren Energien mit steigender Elektrolyseleistung an. Um eine kostenoptimale Wasserstoffproduktion mit ausreichend Volllaststunden zu gewährleisten, wird die installierte Leistung der erneuerbaren Energien in etwa auf das 2,5- bis 3-fache dimensioniert. Die installierte Leistung der Windenergieanlage übersteigt dabei die installierte PV-Leistung für jede betrachtete Elektrolyseurleistung um das 1,5- bis 2-fache. Dieses Leistungsverhältnis liegt in der saisonalen Verfügbarkeit und in den Kosten der jeweiligen Energiequelle begründet.

Aussagekräftig ist außerdem der Schwellwert des Netzstrombezugs, da er einen Indikator für den Anteil des Netzstrombezugs und somit die Betriebsführung des Elektrolyseurs darstellt. Der Schwellwert nimmt in den Ergebnissen der Voroptimierung mit steigender Elektrolyseleistung deutlich ab. Bei geringer Elektrolyseleistung von 0,1 MW wird ein sehr hoher Netzstrompreis von 390,11 €/MWh in Kauf genommen, um die hohen spezifischen Kosten der Systemkomponenten auszugleichen und kostenoptimal möglichst viel Wasserstoff zu erzeugen. Teilt man den jährlichen Strombedarf des Elektrolyseurs in MWh durch die Nennleistung des Elektrolyseurs in MW, so erhält man die Volllaststundenzahl des Elektrolyseurs. Diese betragen bei $P_{EL} = 0,1$ MW 8760 Stunden, was der Anzahl an Stunden in einem Jahr entspricht. Der Elektrolyseur läuft somit ohne Unterbrechung das ganze Jahr auf Volllast. Es sei hierbei angemerkt, dass dies in der Praxis keine realistische Betriebsführung darstellt, da dies weder einen netzdienlichen, noch einen ökologisch sinnvollen Betrieb darstellt und weiterhin keine Wartungsperioden berücksichtigt. Auf eine Volllaststundenbegrenzung in der Optimierung wurde jedoch bewusst verzichtet, um den Elektrolyseurbetrieb und dessen ökonomische

Kausalität bestmöglich zu erforschen.

Der Schwellwert für den Netzstrombezug sinkt bei erhöhter Elektrolyseleistung, da eine Reduktion der Volllaststundenzahl in Kauf genommen werden kann und der Netzstrombezug bei sehr hohen Strompreisen nicht mehr wirtschaftlich ist. Die Volllaststundenzahl bei $P_{EL} = 100$ MW beträgt rund 5931 Stunden.

4.1.2 Teilszenario A1

In Teilszenario A1 wurde nun die Sauerstoffnutzung und -aufbereitung durch eine Gasreinigungsanlage untersucht. Die modellierte Anlage gewährleistet eine Reinheit des Sauerstoffs von mindestens 99,95 %. Der aufgereinigte Sauerstoff kann im Anschluss an die GPU direkt in Industrieprozesse eingespeist oder gespeichert werden. Da in diesem Szenario Kosten durch die Nutzung des Sauerstoffs entstehen, können im Gegensatz zu Szenario A0 Sauerstoffgestehungskosten berechnet werden. Für die Simulation der Sauerstoffnutzung mit einer Gasreinigungsanlage wurden die in Tabelle 4.1 vorgestellten Optimierungsvariablen aus Szenario A0 genutzt. Tabelle 4.2 stellt die Ergebnisse der Simulation von Teilszenario A1 im Vergleich zu den Voroptimierungsergebnissen aus Teilszenario A0 für die Elektrolyseleistungen von 1 und 10 MW dar.

Tabelle 4.2: Vergleich der Simulationsergebnisse aus Teilszenario A1 mit A0

P_{EL} [MW]	Fall	LCO_{xy} [€/kg]	Reinheit [%]	$CAPEX_{O_2}$ [€]	$\dot{m}_{O_2,max}$ [kg/h]
1	A0	0	>95	0	138
	A1	0,014	>99,95	116750	138
10	A0	0	>95	0	1384
	A1	0,004	>99,95	284600	1384

Der Tabelle sind die Gestehungskosten des aufgereinigten Sauerstoffs zu entnehmen. Diese betragen 0,014 €/kg für die Simulation des 1 MW-Elektrolyseurs und 0,004 €/kg für 10 MW. Die Reduktion der Sauerstoffgestehungskosten bei höherer Elektrolyseleistung kommt durch die in Kapitel 4.1.1 beschriebenen Skaleneffekte der GPU zustande, die zu geringeren leistungsspezifischen Investitionen der GPU und somit zu geringen spezifischen Kosten des Sauerstoffs führen. Die Investitionen für die Komponenten der Sauerstoffnutzung $CAPEX_{O_2}$, die in diesem Szenario nur die Sauerstoffreinigungsanlage umfassen, betragen rund 116750 € für 1 MW und 284600 € für 10 MW Elektrolyse.

Der maximale Sauerstoffmassenstrom aus der Elektrolyse $\dot{m}_{O_2,max}$ beträgt für den 1 MW-Elektrolyseur circa 138 kg/h, für den 10 MW-Elektrolyseur etwa 1384 kg/h. Die pro Jahr produzierten Mengen Sauerstoff ergeben sich anhand der Volllaststundenzahlen und der maximalen Massenströme jeweils zu 979 Tonnen und 8951 Tonnen. Die entstehenden Betriebskosten

fallen deutlich geringer als die Investitionen der Gasreinigungsanlage aus. Dies liegt sowohl in den geringen Wartungskosten als auch im geringen Strombedarf der Anlage begründet.

4.1.3 Teilszenario A2

Die in Kapitel 3.3.3 vorgestellten Optionen der Bündel- und Tankspeicherung wurden in Teilszenario A2 simuliert und auf deren Wirtschaftlichkeit untersucht. Die Sauerstoffgestehungskosten der Optionen, inklusive vorausgehender Gasreinigung und Verdichtung auf das gewünschte Druckniveau des Speichers, sind in Abbildung 4.3 in Abhängigkeit der Speicherdauer für 1 MW Elektrolyseleistung aufgetragen.

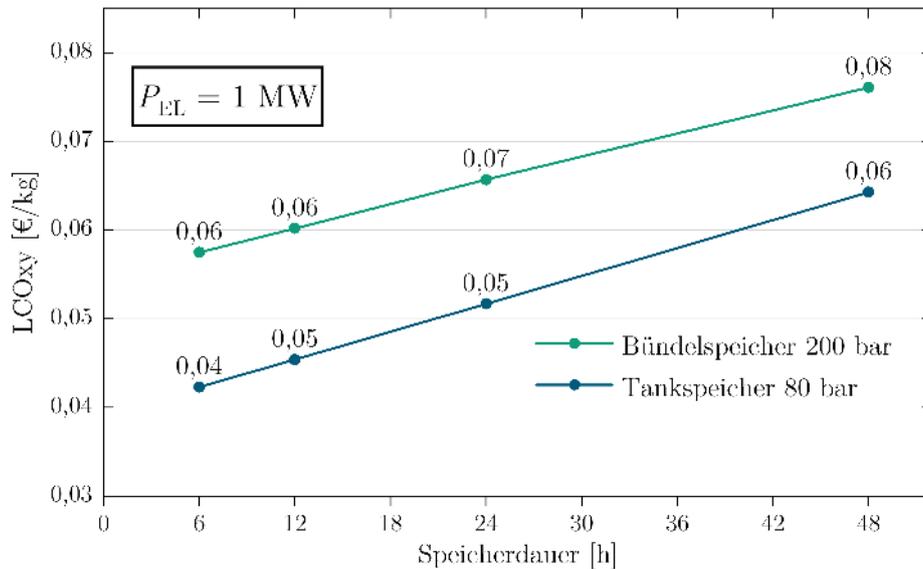


Abbildung 4.3: Speicherkosten in Abhängigkeit der Speicherdauer für $P_{EL} = 1$ MW

In der Abbildung ist zunächst zu erkennen, dass die Sauerstoffgestehungskosten mit steigender Speicherdauer für beide Speicheroptionen linear zunehmen. Dies ist auf steigende Kosten für den Speicher aufgrund größerer Speichervolumina und somit höheren Materialkosten zurückzuführen. Die absoluten Kosten des Kompressor und der GPU bleiben dagegen konstant, da diese nicht abhängig von der Speicherdauer sind. Die Linearität des Anstieges liegt in den konstanten spezifischen Kosten der Speicher begründet.

Der Abbildung ist weiterhin zu entnehmen, dass für die gegebene Elektrolyseleistung und den betrachteten Bereich der Speicherdauer die Bündelspeicherung höhere Sauerstoffgestehungskosten aufweist als die Tankspeicherung. Diese Tatsache ist auf den höheren Speicherdruck der Bündelspeicherung und die daraus resultierenden, höheren Kompressorkosten zurückzuführen. Anhand Gleichung 3.10 ist ersichtlich, dass die Investitionen des Kompressors, somit auch die Betriebskosten, von der elektrischen Leistung des Kompressors abhängen, welche wiederum durch das Verhältnis von Ein- und Ausgangsdruck bestimmt wird. Der Kompressor

für die Bündelspeicherung bei 200 bar muss folglich mit einer höheren elektrischen Leistung dimensioniert werden als der für die Tankspeicherung bei 80 bar und weist daher höhere Investitionen und Betriebskosten auf.

Die Kompressorkosten tragen dabei einen großen Anteil an den Kosten für die Speicherung des Sauerstoffs bei. Dies wird darin deutlich, dass die Kosten des Speichers pro kg Sauerstoff bei der Bündelspeicherung mit ca. 23 €/kg geringer sind als die der Tankspeicherung mit 30 €/kg. Trotz dessen liegen die LCO_{xy} für die Bündelspeicherung über denen der Tankspeicherung. Die Kosten für die Verdichtung des Sauerstoffs auf 200 bar verursachen daher die höheren Kosten der Bündeltechnologie gegenüber der Tankspeicherung, da die Kosten für die Gasreinigungsanlage für beide Technologien gleich hoch sind. Die Kostenanteile der technischen Komponenten sind in Abhängigkeit der Speicherdauer für $P_{EL} = 1$ MW für beide Speicheroptionen in Abbildung 4.4 dargestellt. Die Abbildung unterstreicht den großen Einfluss der Kompressorkosten auf die Sauerstoffgestehungskosten beider Speicheroptionen.

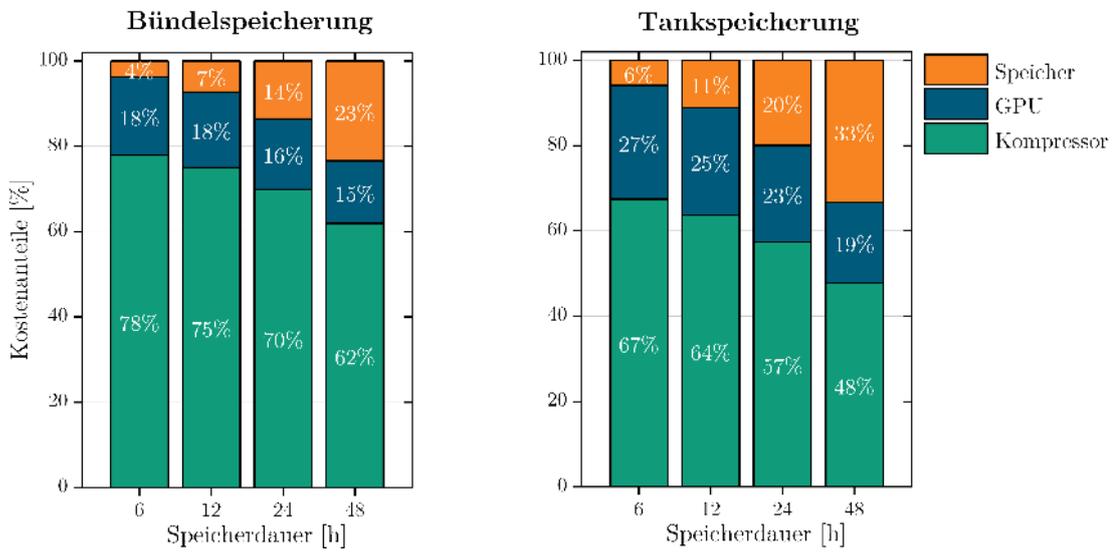


Abbildung 4.4: Kostenanteile der technischen Komponenten der Speicheroptionen

Die hohen Kompressorkosten kommen jedoch nicht allein durch höhere Investitionen für einen leistungsstärkeren Kompressor zustande, sondern werden stark von den Betriebskosten des Kompressors getrieben. So machen die Betriebskosten bei beiden Speicheroptionen, unabhängig von der Speicherdauer, ca. 55 % der gesamten Kompressorkosten aus. Für die Bündelspeicherung im 1 MW-Szenario mit einer Speicherdauer von 6 h entspricht dies rund 42 % der gesamten Speicherkosten. Die hohen Betriebskosten des Kompressors resultieren maßgeblich aus dem hohen Strombedarf des Kompressors. Insbesondere die Verdichtung auf 200 bar bei der Bündelspeicherung löst durch den gesteigerten Leistungsbedarf des Kompressors hohe Stromkosten aus. Diese werden bei geringer installierter Elektrolyseleistung, wie etwa im hier gezeigten *Base Case* bei 1 MW, durch die hohen jährlichen Volllaststundenzahlen verstärkt.

Aus Abbildung 4.4 wird deutlich, dass der Anteil der Kompressorkosten an den gesamten Speicherkosten mit steigender Speicherdauer abnimmt. Dies ist darin begründet, dass durch eine erhöhte Speicherdauer weder eine erhöhte Kompressorleistung noch -energie nötig ist. Die absoluten Kompressorkosten sind daher unabhängig von der Speicherdauer. Ebenso bleiben die Kosten für die Gasreinigung konstant. Gleichwohl steigen bei erhöhter Speicherdauer aufgrund des steigenden Speichervolumens die Kosten für den Speicher. Bei steigender Speicherdauer fallen daher die Kosten für den Speicher mehr ins Gewicht. Dies führt beim Vergleich der Speicheroptionen in Abbildung 4.3 zu einem Angleichen der Kosten bei erhöhter Speicherdauer, da die spezifischen Speicherkosten bei der Bündelspeicherung wie oben erwähnt geringer als bei der Tankspeicherung sind. Noch deutlicher wird diese Angleichung bei erhöhter Elektrolyseleistung aufgrund von Skaleneffekten des Kompressors, wie im Abbildung 4.5 dargestellten Fall von $P_{EL} = 10 \text{ MW}$ zu erkennen ist.

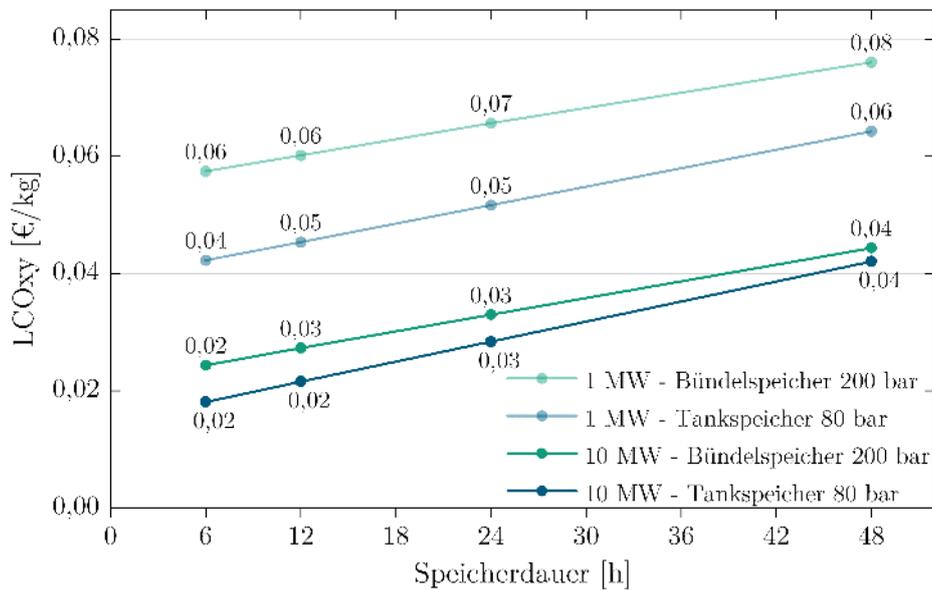


Abbildung 4.5: Speicherkosten in Abhängigkeit der Speicherdauer für $P_{EL} = 10 \text{ MW}$

Es lässt sich außerdem aus oben stehender Abbildung erkennen, dass die Sauerstoffgestehungskosten des 10MW-Systems für beide Speicheroptionen unter denen des 1 MW-Systems liegen. Dies ist auf die die Skaleneffekte des Kompressor und der Gareinigungsanlage zurückzuführen. Der Elektrolyseur trägt nicht zu der Kostenreduktion bei, da die Kosten für den Elektrolyseur nicht in die Sauerstoffgestehungskosten einbezogen werden. Die Gestehungskosten für die Speicherung des Sauerstoffs sinken daher mit steigender Elektrolyseleistung.

4.1.4 Teilszenario A3

In Teilszenario A3 wurden die Optionen des Sauerstofftransports simuliert und die resultierenden Sauerstoffgestehungskosten untersucht. Die Sauerstoffgestehungskosten der Transportop-

tionen *tube*-Trailertransport und Bündeltransport sind in Abbildung 4.6 in Abhängigkeit von der Transportdistanz in km für $P_{EL} = 1$ MW aufgetragen. Außerdem sind in der Abbildung die Gestehungskosten der vorherigen Teilszenarien aufgetragen. Diese umfassen die Kosten für die Sauerstoffreinigung und die betrachteten Speicheroptionen mit einer Speicherdauer von 12 h für eine Elektrolyseleistung von 1 MW. Der Graph stellt somit die Gestehungskosten der gesamten Wertschöpfungskette des Sauerstoffs aus der Elektrolyse dar.

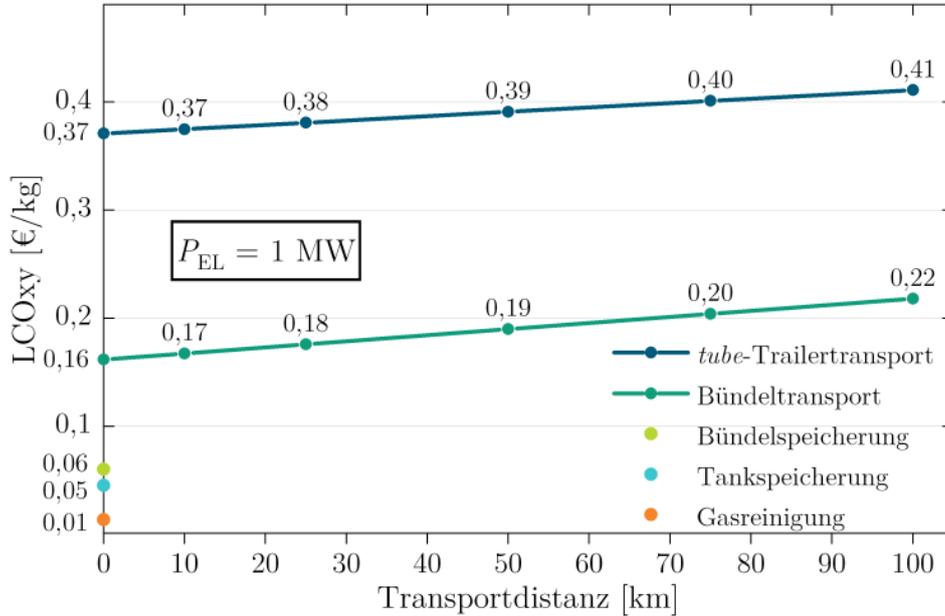


Abbildung 4.6: Transportkosten in Abhängigkeit der Speicherdauer für $P_{EL} = 1$ MW

Es ist der Abbildung zu entnehmen, dass die Sauerstoffgestehungskosten durch den Transport im Vergleich zur Gasreinigung und Speicherung zunehmen. Selbst wenn keine Strecke für den Transport zurückgelegt wird (Transportdistanz = 0 km), steigen die Kosten durch Anschaffung einer Transportinfrastruktur. Für den Bündeltransport umfasst diese die benötigten LKWs, die Trailer, die Transportbündel und die Pufferbündel. Ein zusätzlicher Kompressor sowie eine Abfüllanlage ist bei der Bündelspeicherung aufgrund des identischen Druckniveaus von Speicherung und Transport und des dadurch möglichen Changierens der Bündel nicht nötig.

Hingegen benötigt der *tube*-Trailertransport neben den LKWs und *tube*-Trailern eine Abfüllanlage sowie einen zusätzlichen Kompressor für die Verdichtung des Sauerstoffs von 80 bar Speicherdruck auf 200 bar Transportdruck. Lagen die Kosten für die Tankspeicherung in Teilszenario A2 noch unter denen der Bündelspeicherung, steigen die Kosten für die Tankspeicherung mit anschließendem *tube*-Trailertransport nun deutlich stärker an als die der Bündeltechnologie. Dies führt dazu, dass die Option des Bündeltransports im betrachteten Distanzbereich für 1 MW Elektrolyseleistung deutlich günstiger ist als die des *tube*-Trailertransports. Grund für die höheren Kosten des *tube*-Trailertransports sind unter anderem die im Vergleich

zum Bündeltransport hohen Investitionen des Trailers. Während die Investitionen eines Sattelauflegers mit 20 Flaschenbündeln mit 280 000 € angenommen wurde, belaufen sich die Anschaffungskosten für einen Trailer mit *steel tubes* auf 530 000 €. Des Weiteren verursacht die benötigte Abfüllanlage mit dem zusätzlichen Kompressor die hohen Transportkosten des *tube*-Trailertransports. Diese sind ohne zurückgelegte Transportdistanz für ca. 45 % der Gesteherungskosten des Sauerstoffs verantwortlich.

Aus der Abbildung ist außerdem ersichtlich, dass die Transportkosten für beide Optionen mit steigender Transportdistanz gleichermaßen linear zunehmen. Die Zunahme mit steigender Transportdistanz ist auf die variablen Betriebskosten der Transportmethoden zurückzuführen. Diese umfassen die Kosten für Maut, Kraftstoff und Personal und sind abhängig von der zurückgelegten Transportdistanz. Die Personalkosten sind dabei nur indirekt durch die erhöhte Dauer des Transports von einer erhöhten Distanz abhängig, Kraftstoff- und Mautkosten hingegen sind direkt proportional zur zurückgelegten Strecke in km. Der lineare Anstieg der Kostenkurve kommt also durch konstante spezifische Kraftstoffkosten in €/l bzw. mit einem konstanten Kraftstoffverbrauch in €/km und konstante spezifische Mautkosten in €/km zustande. Da diese variablen Betriebskosten für den Transport mit dem LKW für beide Optionen identisch sind und bei der erzeugten Menge Sauerstoff jeweils nur ein LKW benötigt wird, nehmen die Transportkosten für beide Optionen mit gleicher Steigung zu.

In Abbildung 4.7 sind die Sauerstoffgestehungskosten für beide Speicheroptionen in Abhängigkeit der Elektrolyseleistung und der Transportdistanz aufgetragen.

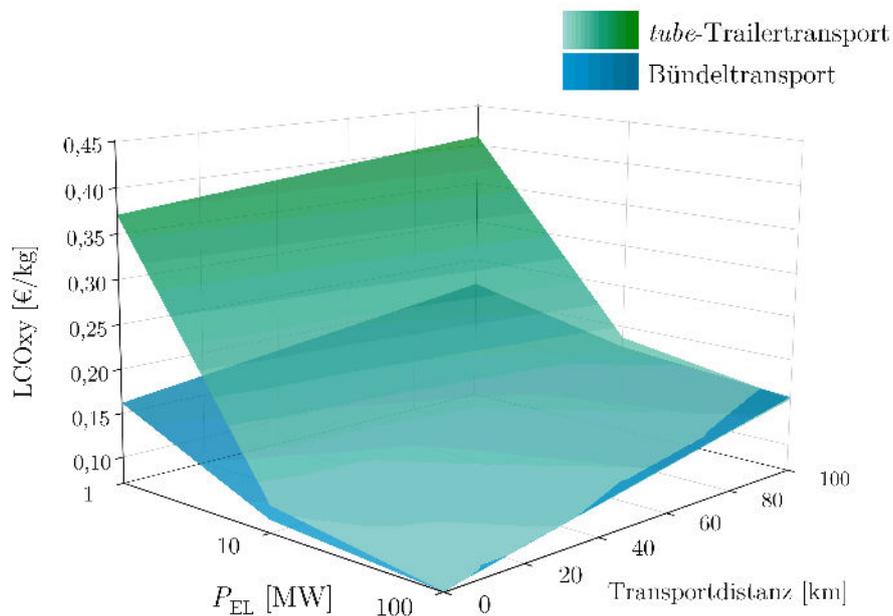


Abbildung 4.7: Transportkosten in Abhängigkeit der Distanz und P_{EL}

In der Abbildung wird deutlich, dass die Sauerstoffgestehungskosten des Bündeltransports nahezu über den gesamten Betrachtungsbereich unter denen des *tube*-Trailertransports liegen. Lediglich bei hoher Elektrolyseleistung sowie hoher zurückgelegter Transportdistanz ist der *tube*-Trailertransport kostengünstiger als der Bündeltransport. Dies ist zum einen durch geringere spezifische Investitionen sowie geringere Stromkosten durch weniger Volllaststunden des Kompressors bei hoher Elektrolyseleistung begründbar. Zum anderen weist die *steel tube*-Methode eine höhere Transportkapazität pro LKW-Fahrt auf als der Bündeltransport. Die Anzahl der benötigten LKWs und somit deren Investitionen steigen für den *tube*-Trailertransport daher weniger schnell an, sodass die Transportkosten bei steigender Transportdistanz weniger stark steigen.

Es ist außerdem erkennbar, dass die Transportkosten aufgrund von Skaleneffekten und höherem Auslastungsgrad der Transportinfrastruktur für beide Optionen mit steigender Elektrolyseleistung abnehmen. Insbesondere die Gestehungskosten des *tube*-Trailertransports nehmen mit erhöhter Elektrolyseleistung stark ab. Die vergleichsweise hohen Gestehungskosten bei geringer Elektrolyseleistung ($P_{EL} = 1 \text{ MW}$) kommen maßgeblich durch die hohen Investitionen in den *tube*-Trailer und den zusätzlichen Kompressor bei gleichzeitig geringen Mengen produziertem bzw. transportiertem Sauerstoff zustande. Die geringen Sauerstoffmengen bei gleichzeitig hoher Transportkapazität der *steel tubes* führen zu einer geringen Anzahl benötigter LKW-Fahrten pro Jahr und somit zu einer geringen Auslastung der Transportinfrastruktur. Die Transportkosten beider Optionen nehmen außerdem, wie bereits in Abbildung 4.6 erkennbar, mit steigender Transportdistanz über alle Elektrolyseleistungen hinweg zu.

4.2 Ergebnisse der Optimierungsszenarien B

Die Ergebnisse der Optimierung hinsichtlich minimaler LCOH für konkrete Sauerstoffnutzungspfade sollen im Folgenden vorgestellt und diskutiert werden. Durch die Optimierungsergebnisse aus Szenario B soll der ökonomische Einfluss der Sauerstoffnutzung auf die Wasserstoffherzeugung quantifiziert werden. Neben szenariospezifischen Kennwerten und Einsparpotenzialen werden hierfür für jedes Szenario die errechneten LCOH, die Kostendifferenz der LCOH Δ_{LCOH} , die optimierte Elektrolyseleistung P_{EL} sowie die Volllaststunden VLS des Elektrolyseurs angegeben. Insbesondere die Kostendifferenz zwischen den LCOH des Referenzszenarios ohne Sauerstoffnutzung und denen der modellierten Szenarien zur Sauerstoffnutzung stellt ein zentrales Ergebnis der Modellierung dar, da sie den ökonomischen Einfluss der Sauerstoffnutzung quantifiziert und potenzielle Gewinne oder Verluste anzeigt. Die unterschiedlichen Betriebsweisen des Elektrolyseurs (O_2 , H_2 , EE) wurden für alle Teilszenarien getrennt modelliert und optimiert, um den Einfluss der Betriebsweisen auf die Wasserstoff- und Sauerstoffherzeugung zu untersuchen.

4.2.1 Teilszenario B1

In Teilszenario B1 wurde die anteilige Deckung des Sauerstoffbedarfes durch die PEM-Elektrolyse in Verbindung mit einer bestehenden LZA, die in Teillast betrieben werden kann, untersucht. Die LZA besitzt eine Nennkapazität von $10\,000\text{ Nm}^3/\text{h}$ entsprechend des Sauerstoffbedarfes des fiktiven Industriestandorts. Die minimale Teillast der Anlage beträgt 25 %. Potenzielle Einsparungen des Nutzungsprofils resultieren aus dem Teillastbetrieb der Anlage und den daraus resultierenden geringeren Stromkosten.

Tabelle 4.3 stellt die Ergebnisse aus Teilszenario B1 für die verschiedenen Betriebsweisen des Elektrolyseurs dar. Diese umfassen neben den oben genannten Größen die durchschnittliche Teillast der LZA LZA_{load} , in %, die absoluten bzw. relativen jährlichen Energieeinsparungen der Anlage ΔE_{LZA} sowie die absoluten und relativen jährlichen Stromkosteneinsparungen durch den Teillastbetrieb $\Delta \epsilon_{LZA}$.

Tabelle 4.3: Teilszenario B1: Optimierungsergebnisse in Abhängigkeit der Betriebsweise

	LCOH	Δ_{LCOH}	P_{EL}	VLS	LZA_{load},	ΔE_{LZA}	$\Delta \epsilon_{LZA}$
	[€/kg]	[€/kg]	[MW]	[h]	[%]	[MWh] (%)	[€] (%)
O₂	5,20	0,20	74,63	6282	50,19	17277 (43)	2498500 (41)
H₂	6,49	0,11	5,21	8760	94,97	1402 (3)	210300 (3)
EE	5,27	0,22	77,14	5240	54,01	15781 (39)	2391300 (40)

Sauerstoffgeführter Betrieb

Im sauerstoffgeführten Betrieb wird der Elektrolyseur durch die Kostenoptimierung mit einer elektrischen Leistung von rund 75 MW dimensioniert, um den Sauerstoffbedarf teilweise aus der Elektrolyse zu decken. Im kostenoptimalen Fall wird der Elektrolyseur dabei mit 6282 Volllaststunden im Jahr betrieben. Die dadurch erzeugte Menge Sauerstoff ist ausreichend, um die Luftzerlegungsanlage mit durchschnittlich 50 % der Nennkapazität zu betreiben. Der jährliche Sauerstoffbedarf des Werks kann so zu rund 50 % durch Elektrolysesauerstoff gedeckt werden. Da der Teillastbetrieb der LZA durch die definierte, maximale Laständerungsrate von 2 %/min nur begrenzte Erzeugungsflexibilität bietet, können volatile Strompreise und fluktuierende erneuerbare Energien auch teilweise durch den Sauerstoffspeicher ausgeglichen werden. Dieser fasst im kostenoptimalen Fall ein Volumen von 485 m^3 .

Abbildung 4.8 stellt den Verlauf des Sauerstoffvolumenstroms aus der LZA und aus der Elektrolyse sowie den Sauerstoffspeicherdruck über den Zeitraum von einem Jahr dar.

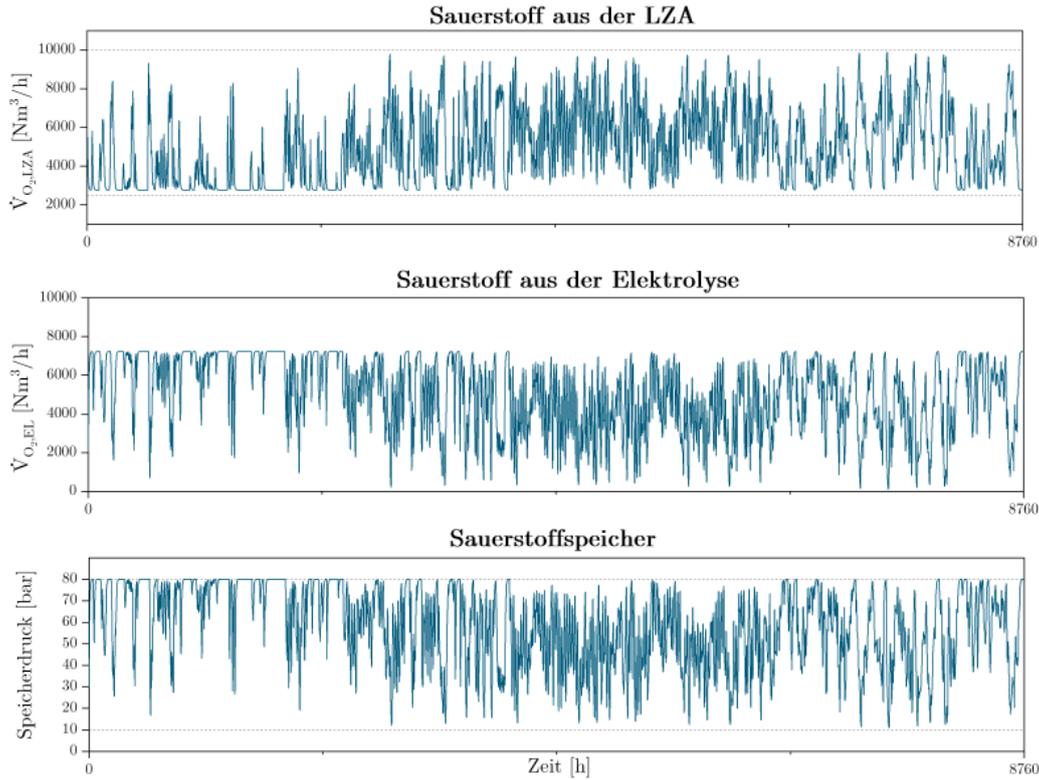


Abbildung 4.8: B1: Deckung des Sauerstoffbedarfes durch LZA, Elektrolyse und Speicher

Daraus ist zunächst ersichtlich, dass die Volumenströme der LZA und der Elektrolyse sich dynamisch ergänzen, um den Sauerstoffbedarf zu decken. Die Sauerstoffproduktion aus der Elektrolyse richtet sich dabei nach der Verfügbarkeit der erneuerbaren Energien und der Höhe des Strompreises. Die Last der LZA sowie der Druck des Sauerstoffspeichers passen sich wiederum bedarfsgerecht der Erzeugung des Elektrolysesauerstoffs an. Wie in der Abbildung zu erkennen, verhalten sich die Sauerstofferzeugung aus der Elektrolyse und der LZA antipodisch. Der Druck des Sauerstoffspeichers und die Produktion der Elektrolyse verlaufen hingegen ähnlich, da durch vermehrte Ausspeicherung bei geringer Produktion der Elektrolyse der Speicherdruck sinkt. Die LZA und der Sauerstoffspeicher stellen in diesem Fall zeitgleich Sauerstoff bereit.

Der Druck des Sauerstoffspeichers schwankt zwischen dem Minimaldruck von 10 bar und dem maximalen Speicherdruck von 80 bar, um im Falle eines Unterangebots an produziertem Sauerstoff durch bedarfsgerechte Ein- und Ausspeicherung den Sauerstoffbedarf zu decken. Der Sauerstoffspeicher kann dabei aufgrund der begrenzten Laständerungsrate der LZA dynamischer auf ein Sauerstoffunterangebot reagieren als die LZA. Es ist außerdem der Abbildung zu entnehmen, dass die Teillast der LZA den minimalen Wert von 25 % der Nennkapazität nicht unterschreitet. Da eine bedarfsgerechte Produktion angestrebt wurde, produziert die Elektrolyse nie mehr als 75 % des Bedarfes von $10\,000\text{ Nm}^3/\text{h}$.

Aus dem Teillastbetrieb der LZA ergeben sich Einsparungen in der Energiemenge und den -kosten gegenüber einem Volllastbetrieb. Im sauerstoffgeführten Betrieb werden durch den Teillastbetrieb von durchschnittlich 50 % jährlich etwa 17 277 MWh eingespart. Diese eingesparte Energiemenge entspricht etwa 43 % des jährlichen Energiebedarfs der Anlage im Volllastbetrieb. Aus den Energieeinsparungen und der teilweisen Bedarfsdeckung durch Elektrolysesauerstoff ergeben sich jährliche Stromkosteneinsparungen von ca. 2,5 Mio. €, was in etwa 41 % der gesamten, jährlichen Stromkosten der Anlage in Volllastbetrieb entspricht.

Durch die Gegenüberstellung der eingesparten Stromkosten und der Kosten für die Sauerstoff-erzeugung und -bereitstellung ergibt sich das Einsparpotenzial des betrachteten Szenarios. Die Kostendifferenz zwischen dem Referenzszenario ohne Sauerstoffnutzung bei vollständiger Bedarfsdeckung durch die LZA und dem betrachteten Szenario mit Sauerstoffnutzung aus der Elektrolyse beträgt 0,20 €/kg, die LCOH des kostenoptimalen Falls betragen 5,20 €/kg. Aus der positiven Kostendifferenz kann also ein ökonomischer Vorteil der Sauerstoffnutzung aus der Elektrolyse in diesem spezifischen Szenario abgeleitet werden. Insbesondere in Zeiten hoher Strompreise ist der Betrieb der LZA durch den hohen Stromverbrauch kostenintensiv, sodass der Teillastbetrieb und die Nutzung von Elektrolysesauerstoff ökonomisch attraktiv ist. Der Teillastbetrieb einer bestehenden Luftzerlegungsanlage mit simultaner Nutzung von Elektrolysesauerstoff kann im sauerstoffgeführten Betrieb bei optimaler Auslegung der technischen Komponenten, hohem Strompreisniveau und ausreichender Lastflexibilität der LZA und des Speichers also wirtschaftlich sinnvoll sein.

Wasserstoffgeführter Betrieb

In der Optimierung des wasserstoffgeführten Betriebs wurde die Erfüllung des Wasserstoffbedarfes von $1000 \text{ Nm}^3/\text{h}$ durch die Elektrolyse priorisiert. Da im betrachteten System keine weitere Wasserstofferzeugungstechnologie vorliegt, muss der gesamte Bedarf durch die Elektrolyse gedeckt werden. Der Sauerstoffbedarf, den es weiterhin zu decken gilt, kann hingegen durch Elektrolysesauerstoff und durch Sauerstoff aus der LZA gedeckt werden. Die Dimensionierung des PtG-Systems richtet sich daher zwangsläufig nach dem Wasserstoffbedarf, da nur so beide Bedarfe bedient werden können.

Die Elektrolyse wird im kostenoptimalen Fall mit einer elektrischen Leistung von 5,21 MW dimensioniert. Der Elektrolyseur produziert mit dieser elektrischen Leistung einen maximalen Wasserstoffvolumenstrom von etwas $1000 \text{ Nm}^3/\text{h}$. Dieser reicht bei durchgängiger Volllast mit 8760 Volllaststunden aus, um den Bedarf zu decken. Da der Elektrolyseur genau auf den Wasserstoffbedarf dimensioniert ist, kann der Speicher in Zeiten von Strompreisspitzen und geringer Verfügbarkeit von erneuerbaren Energien keine Flexibilität bieten, da nicht genügend Wasserstoff produziert wird, um den Speicher nach Speicherentleerung wieder zu füllen. Eine entsprechende Überdimensionierung des PtG-Systems scheint jedoch keine kostengünstigere Alternative zu sein, da hier zwar Strompreisspitzen durch geringere Volllaststunden vermieden

werden könnten, eine bedarfsübertreffende Wasserstoffproduktion bei erhöhten Anlagenkosten sich jedoch nicht positiv auf die LCOH auswirken würde. Aufgrund des Skaleneffekts der im Vergleich zum sauerstoff- und EE-geführten Betrieb geringen Elektrolyseleistung und der geringen Flexibilität des Elektrolyseurbetriebs durch die Kopplung beider Bedarfe sind die LCOH mit 6,49 €/kg vergleichsweise hoch. Die LCOH verhalten sich dabei in Abhängigkeit der Elektrolyseleistung analog zu den Ergebnissen aus Teilszenario A0 (vgl. Abb. 4.1).

Die Sauerstofferzeugung aus der Elektrolyse beträgt bei maximaler Leistung entsprechend der Stoffmengenverhältnisse etwa $500 \text{ Nm}^3/\text{h}$. Dies entspricht 5 % des Sauerstoffbedarfes des Systems. Da die Elektrolyse mit 8760 Volllaststunden betrieben wird, deckt die LZA den restlichen Anteil des Bedarfes. Die durchschnittliche Teillast der LZA beträgt daher über das ganze Jahr gesehen rund 95 %. Die möglichen Energieeinsparungen sind durch die hohe durchschnittliche Teillast der Anlage nur gering und belaufen sich auf 1402 MWh jährlich, was etwa 3 % des Energiebedarfes entspricht. Die jährlichen Stromkosteneinsparungen belaufen sich auf 210 300 €. Durch die gering ausfallenden Stromkosteneinsparungen ergeben sich ebenfalls geringe Einsparungen in den LCOH. Diese betragen 0,11 €/kg. Es kann jedoch trotz dessen ein wirtschaftlicher Vorteil aus der Nutzung von Elektrolysesauerstoff bei gleichzeitigem Teillastbetrieb einer LZA abgeleitet werden. Das betrachtete Szenario stellt den Spezialfall der dualen Nutzung von Elektrolysewasserstoff und -sauerstoff an einem Industriestandort dar. Es konnte daher auch ein potenzieller ökonomischer Vorteil der dualen Nutzung gezeigt werden. Die Höhe der Einsparungen und somit die Intensität des Vorteils wird maßgeblich vom vorliegenden Verhältnis und der Höhe der Bedarfe bestimmt, da dieses über die Höhe der Stromkosteneinsparungen und die Dimensionierung des PtG-Systems entscheidet. Letzteres beeinflusst wiederum aufgrund von Skaleneffekten maßgeblich die Höhe der Wasserstoffgestehungskosten. Der Einfluss des Verhältnisses sowie der Höhe der Bedarfe auf die Wasserstoffgestehungskosten bei dualer Nutzung von Wasserstoff und Sauerstoff ist in einer weiteren Arbeit zu untersuchen.

EE-geführter Betrieb

Im EE-geführten Betrieb bezieht der Elektrolyseur nur noch Strom aus erneuerbaren Energien, der Netzstrombezug entfällt. Es kann daher nur dann Sauerstoff aus der Elektrolyse erzeugt werden, wenn erneuerbare Energie verfügbar ist. Dies erklärt die vergleichsweise geringe Volllaststundenzahl des Optimierungsergebnisses von 5240 h. Die Elektrolyse weist mit 77,14 MW eine ähnlich hohe elektrische Leistung zur Deckung des Sauerstoffbedarfes auf wie im sauerstoffgeführten Szenario. Wurden im sauerstoffgeführten Betrieb pro Jahr rund 62 Mio. Tonnen Sauerstoff aus der Elektrolyse produziert, so sind es im EE-geführten Betrieb aufgrund der geringeren Volllaststunden nur etwa 57 Mio. Tonnen. Es muss daher im Vergleich zum sauerstoffgeführten Betrieb mehr Sauerstoff durch die LZA bereitgestellt werden. Die durchschnittliche Teillast der LZA beträgt hier 54 %. Durch den Teillastbetrieb kommt es zu jährlichen Energieeinsparungen von 15 781 MWh und Stromkosteneinsparungen von 2,4

Mio. €, was etwa 40 % der gesamten jährlichen Stromkosten der Anlage entspricht. Die Einsparungen sind erwartungsgemäß geringer als im sauerstoffgeführten Betrieb, da die Anlage hier mit höherer durchschnittlicher Teillast betrieben wird und somit mehr Energie benötigt.

Im betrachteten Fall können die LCOH im Vergleich zum Referenzszenario ohne Sauerstoffnutzung um 0,22 €/kg reduziert werden. Obwohl die Stromkosteneinsparungen geringer sind als im sauerstoffgeführten Betrieb, ergibt sich eine höhere Reduktion der LCOH. Diese ist durch die höheren LCOH des Referenzszenarios des EE-geführten Betriebs im Gegensatz zu dem des sauerstoffgeführten Betriebs und dadurch höhere mögliche Einsparungen zu erklären. Die erhöhten LCOH des EE-geführten Betriebszenarios resultieren aus den höheren Kosten für die Elektrolyse und der erneuerbaren Energien infolge der höheren Elektrolyseleistung. Eine leicht erhöhte Elektrolyseleistung erweist sich hier jedoch als kostenoptimal, da so ein höherer Anteil des Sauerstoffbedarfes aus der Elektrolyse gedeckt und so höhere Stromkosteneinsparungen erzielt werden können.

Für Teilszenario B1 kann durch die Nutzung von Elektrolysesauerstoff, der ausschließlich durch erneuerbare Energien erzeugt wurde, bei Betrieb einer bestehenden LZA in Teillast ein ökonomischer Vorteil festgestellt werden. Die Reduktion der LCOH des Referenzszenarios ist dabei im Vergleich zu den anderen Betriebsweisen des Elektrolyseurs höher. Gleichwohl liegen die LCOH durch die erhöhte installierte Leistung des Elektrolyseurs sowie der erneuerbaren Energien zur kostenoptimalen Deckung des Sauerstoffbedarfes leicht über denen des sauerstoffgeführten Betriebs. Durch die Möglichkeit der Erzeugung von grünem Wasserstoff durch erneuerbare Energien in diesem betrachteten Fall kann neben dem ökonomischen Vorteil ebenso ein ökologischer Vorteil gegenüber dem Referenzszenario sowie den anderen Betriebsweisen erzielt werden.

4.2.2 Teilszenario B2

In Teilszenario B2 wurde die partielle Deckung des Sauerstoffbedarfes durch die Elektrolyse und durch eine LZA, die auf einem Werksgelände neu installiert werden soll, untersucht. Sowohl die installierte Leistung des Elektrolyseurs als auch die Erzeugungskapazität der LZA in Nm^3/h stellen in diesem Szenario Optimierungsvariablen dar. Die Erzeugungskapazitäten und somit der Anteil der jeweiligen Technologie zur Deckung des Bedarfes im kostenoptimalen Fall sind somit ein Teilergebnis der Optimierung und können für beide Technologien zwischen 0 und $10\,000\text{ Nm}^3/\text{h}$ liegen. Luftzerlegungsanlagen weisen in der Praxis eine Mindestkapazität von etwa $4000\text{ Nm}^3/\text{h}$ auf. Der Optimierung wurde jedoch durch den gewählten Kapazitätsbereich weniger strenge Grenzen gesetzt, um das Zusammenspiel zwischen PEM-Elektrolyse und konventioneller Sauerstofferzeugung bestmöglich zu untersuchen. Ergebnisse im unteren Kapazitätsbereich der LZA ($< 4000\text{ Nm}^3/\text{h}$) sind jedoch als valides Ergebnis zu interpretieren, da die Erzeugung in diesem Fall durch alternative Erzeugungstechnologien im niederen Kapazitätsbereich, wie etwa die (Vakuum-)Druckwechseladsorption vorgenommen

werden kann.

Die neu installierte LZA wird im Gegensatz zu Teilszenario B1 stets mit Nennkapazität, also in Volllast, betrieben. Die angepasste Dimensionierung der LZA aufgrund des Teilmassenstroms der Elektrolyse beeinflusst die Investitionen der LZA entsprechend Gleichung 3.13. Es können sich potenzielle Einsparungen sowohl durch die reduzierten Investitionen der LZA als auch durch Stromkosteneinsparungen einer LZA mit geringerer Kapazität ergeben. Der spezifische Energiebedarf der LZA bei Nennleistung wurde unabhängig von der optimierten Nennkapazität als konstant angenommen. In der Realität neigen großindustrielle Anlagen hingegen zu einem geringeren spezifischen Energiebedarf [21]. Dies wurde aufgrund des niederen und relativ kleinen Bereichs der Kapazität jedoch vernachlässigt.

Tabelle 4.4 stellt die Ergebnisse der Optimierung aus Teilszenario B2 für die verschiedenen Betriebsweisen des Elektrolyseurs dar.

Tabelle 4.4: Teilszenario B2: Optimierungsergebnisse in Abhängigkeit der Betriebsweise

	LCOH	Δ_{LCOH}	P_{EL}	VLS	$\dot{V}_{O_2,LZA}$	$\Delta CAPEX_{LZA}$	ΔE_{LZA}
	[€/kg]	[€/kg]	[MW]	[h]	[Nm ³ /h]	[€]	[MWh] (%)
O₂	6,59	0,22	92,20	8760	1028	14487000	36153 (90)
H₂	6,63	0,26	9,02	5924	9518	375820	1944 (5)
EE	5,34	0,11	87,84	5162	8013	1659900	8007 (20)

Sauerstoffgeführter Betrieb

Im sauerstoffgeführten Betrieb wurde die Deckung des Sauerstoffbedarfes durch die Elektrolyse und die zu installierende LZA priorisiert. Ein Elektrolyseur mit einer maximalen elektrischen Leistung von ca. 92 MW wurde als kostenoptimales PtG-System bestimmt. Dies stellt das leistungsstärkste System aller modellierten Szenarien dar. Um den Sauerstoffbedarf zu decken, wird zusätzlich eine konventionelle Erzeugungstechnologie mit einer Nennkapazität von 1028 Nm³/h installiert. Da diese Kapazität unter der als minimale Kapazität definierte Grenze einer LZA von 4000 Nm³/h liegt, wird die Anlage als VPSA-Anlage ausgeführt. Durch die deutlich leistungsschwächere Dimensionierung der Anlage im Vergleich zur vollständigen Deckung des Bedarfes sind die Einsparungen in den Investitionen mit ca. 14 Mio. € hoch. Es können durch die geringe Kapazität der Anlage außerdem große Mengen Energie von jährlich 36 153 MW eingespart werden. Dies entspricht einer Energieeinsparung von ca. 90 % gegenüber der vollständigen Bedarfsdeckung durch die LZA.

Durch die optimierte Dimensionierung der Elektrolyse und der VPSA-Anlage trägt die Elektrolyse einen sehr hohen Anteil zur Deckung des Sauerstoffbedarfes bei. Der Elektrolysesauerstoff deckt den jährlichen Sauerstoffbedarf des Industriestandorts zu fast 90 %. Um den hohen

Anteil des Bedarfes decken zu können, wird der Elektrolyseur ganzjährig in Vollast betrieben. Dies führt jedoch auch dazu, dass Strompreisspitzen nicht umgangen werden und hohe Kosten verursachen. Die Stromkosten für den Betrieb der Elektrolyse machen dadurch über 50 % der gesamten Gestehungskosten des Wasserstoffs aus.

Die LCOH des kostenoptimalen Falls belaufen sich im sauerstoffgeführten Betrieb auf 6,59 €/kg und sind damit im Vergleich zu anderen Teilszenarien relativ hoch. Es ergibt sich im Vergleich zum Referenzszenario ohne Sauerstoffnutzung jedoch trotzdem ein ökonomischer Anreiz zur Sauerstoffnutzung aus der Elektrolyse. Die Kostendifferenz beträgt 0,22 €/kg.

Wasserstoffgeführter Betrieb

Im wasserstoffgeführten Betrieb stellt sich durch die Priorisierung der Deckung des Wasserstoffbedarfes wie schon in Teilszenario B1 eine deutlich geringere Elektrolyseleistung als in den anderen Betriebsweisen dieses Teilszenarios ein. Die maximale elektrische Leistung beträgt $P_{EL} = 9,02 \text{ MW}$. In Vollast erzeugt der PEM-Elektrolyseur damit einen Wasserstoffvolumenstrom von $1804 \text{ Nm}^3/\text{h}$. Die Leistung der Elektrolyse ist somit ausreichend, um den Wasserstoffbedarf von $1000 \text{ Nm}^3/\text{h}$ zu bedienen. Durch die Überdimensionierung der Elektrolyse bezüglich des Wasserstoffbedarfes kann auf einen Vollastbetrieb des Elektrolyseurs verzichtet und Strompreisspitzen umgangen werden. Die Volllaststundenzahl beträgt 5924 h.

Die Elektrolyseleistung ist im Vergleich zum wasserstoffgeführten Betrieb des Teilszenarios B1 höher, während die Volllaststundenzahl deutlich geringer ausfällt. Die Überdimensionierung der Elektrolyse liegt in der Kopplung des Wasserstoff- und Sauerstoffbedarfes und der fehlenden Flexibilität der LZA bezüglich der Sauerstofferzeugung in diesem Szenario begründet. Im Szenario B1-H₂ konnte eine wasserstoffbedarfsgerechte Dimensionierung der Elektrolyse erfolgen, da die LZA durch ihre Teillastfähigkeit zusammen mit dem Speicher die Sauerstoffbedarfsdeckung sicherte. Die LZA in Teilszenario B2 hingegen ist nicht teillastfähig. Die Elektrolyseleistung muss daher höher gewählt werden, um die Deckung beider Bedarfe aufgrund der fehlenden Flexibilität der LZA zu gewährleisten. Es stellt sich daher ein flexibler Betrieb der Elektrolyse und des Wasserstoffspeichers ein, der den Bedarf durch bedarfsgerechte Ein- und Ausspeicherung deckt. Der flexible Betrieb der Elektrolyse-Speicher-Einheit ist anhand des schwankenden Druckes des Wasserstoffspeichers abzulesen. Der Verlauf ist in Abbildung 4.9 über den Zeitraum eines Jahres dargestellt.

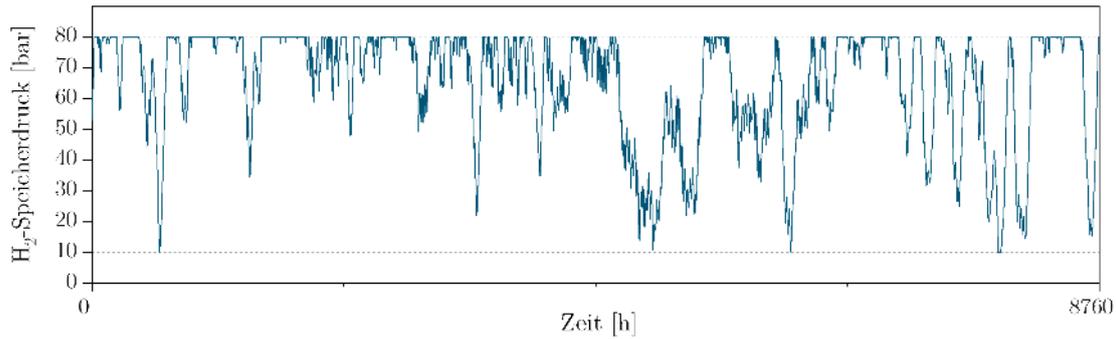


Abbildung 4.9: B2-H₂: Verlauf des Wasserstoffspeicherdruckes

Um den Sauerstoffbedarf vollständig zu decken, wird zusätzlich zur Erzeugung von Elektrolysesauerstoff eine LZA mit einer Erzeugungskapazität von $9518 \text{ Nm}^3/\text{h}$ installiert. Die Einsparungen in den Investitionen der LZA sind daher mit $375\,820 \text{ €}$ relativ gering. Die jährlichen Energieeinsparungen belaufen sich auf 1944 MWh .

Die LCOH betragen im kostenoptimalen Fall $6,63 \text{ €/kg}$. Die Einsparungen bezüglich der LCOH belaufen sich auf $0,26 \text{ €/kg}$. Im Vergleich zum Referenzszenario ohne Sauerstoffnutzung kann daher ein ökonomischer Vorteil aus der Sauerstoffnutzung abgeleitet werden. Die Kostendifferenz im betrachteten Fall ist die höchste der Teilszenarien B1 und B2, obwohl die Einsparungen der Investitionen und der Stromkosten relativ gering sind. Dies resultiert jedoch vor allem aus den hohen LCOH des Referenzszenarios, die durch die Überdimensionierung des Elektrolyseurs und der Wind- und PV-Anlagen infolge der Kopplung des Wasserstoff- und Sauerstoffbedarfes sowie der fehlenden Flexibilität der LZA zustande kommen. Dementsprechend liegen auch die erzielten Wasserstoffgestehungskosten von $6,63 \text{ €/kg}$ über denen der anderen Szenarien.

EE-geführter Betrieb

Im EE-geführten Betrieb erfolgt die Erzeugung des Elektrolysesauerstoffs alleinig durch den Bezug aus erneuerbaren Energien. Es ergibt sich im kostenoptimalen Fall eine elektrische Leistung des Elektrolyseurs von $87,84 \text{ MW}$. Die Volllaststundenzahl beträgt 5162 h und ist damit aufgrund der begrenzten Verfügbarkeit der Energie geringer als in den restlichen Fällen dieses Szenarios. Aufgrund der hohen Elektrolyseleistung und fehlendem Bezug von teurem Netzstrom ergeben sich infolge von Skaleneffekten günstige LCOH von $5,34 \text{ €/kg}$. Die Einsparungen in den LCOH sind mit $0,11 \text{ €/kg}$ im Vergleich zu den anderen Betriebsweisen relativ gering. Zwar sind die Einsparungen in den Investitionen mit rund 2 Mio. € und Energieeinsparungen um rund 20% im Vergleich zu Szenario B2-H₂ relativ hoch. Die Einsparungen fallen jedoch aufgrund der deutlich größeren Menge an produziertem Wasserstoff weniger ins Gewicht, sodass sich eine geringere Kostendifferenz bildet. Die Erzeugung von Elektrolysesauerstoff wird zur Deckung des Bedarfes um Sauerstoff aus einer LZA mit $8013 \text{ Nm}^3/\text{h}$ ergänzt.

4.2.3 Teilszenario B3

In Teilszenario B3 wurde die Substitution von angeliefertem Flüssigsauerstoff durch Elektrolysesauerstoff zur Deckung des Sauerstoffbedarfes eines Werks von $1000 \text{ Nm}^3/\text{h}$ untersucht. Der Anteil des Sauerstoffbedarfes, der im kostenoptimalen Fall nicht durch die Elektrolyse gedeckt wird, wird durch die externe Anlieferung von gasförmigem Sauerstoff zu einem höheren Preis von $0,12 \text{ €/kg}$ ausgeglichen. Tabelle 4.5 stellt die Ergebnisse aus Teilszenario B3 für die verschiedenen Betriebsweisen des Elektrolyseurs dar. $m_{O_2,et}$ bezeichnet dabei die jährliche Menge an extern angeliefertem Sauerstoff in Tonnen, also der Differenz zwischen Sauerstoffbedarf und Sauerstoff aus der Elektrolyse. Daraus ergeben sich die Kosten des externen Sauerstoffs $\text{€}_{O_2,ext}$ und die absoluten und relativen Einsparungen gegenüber der vollständigen Deckung durch Flüssigsauerstoff $\Delta\text{€}_{LOX}$.

Tabelle 4.5: Teilszenario B3: Optimierungsergebnisse in Abhängigkeit der Betriebsweise

	LCOH	Δ_{LCOH}	P_{EL}	VLS	$m_{O_2,ext}$	$\text{€}_{O_2,ext}$	$\Delta\text{€}_{LOX}$
	[€/kg]	[€/kg]	[MW]	[h]	[t] (%)	[€]	[€] (%)
O₂	5,18	0,39	11,64	5961	2796 (22)	329890	671630 (67)
H₂	6,52	0,10	5,21	8760	6196 (50)	731110	270410 (27)
EE	5,27	0,36	11,83	5424	3391 (27)	400190	601330 (60)

Sauerstoffgeführter Betrieb

Im sauerstoffgeführten Betrieb wird auf dem fiktiven Werksgelände ein PEM-Elektrolyseur mit $11,64 \text{ MW}$ elektrischer Anschlussleistung installiert. Der maximale Sauerstoffvolumenstrom der Elektrolyse im Volllastbetrieb beläuft sich damit auf $1127 \text{ Nm}^3/\text{h}$. Zusammen mit der kostenoptimalen Volllaststundenzahl von 5961 h deckt die Elektrolyse den jährlichen Sauerstoffbedarf zu 78% . Die jährliche Sauerstoffmenge, die zur Deckung des Bedarfes extern angeliefert werden muss, beträgt 2796 Tonnen. Durch den von extern zu einem höheren Preis angekauften Sauerstoff ergeben sich jährliche Kosten von $329\,890 \text{ €}$. Durch die Nutzung des Elektrolysesauerstoffs zur teilweisen Deckung des Bedarfes anstelle von Flüssigsauerstoff ergeben sich jährliche Einsparungen von $671\,630 \text{ €}$, was einer Reduktion der jährlichen Sauerstoffbezugskosten um 67% entspricht.

Es stellt sich ein kostenoptimales Verhältnis von Sauerstofferzeugung und externer Anlieferung ein. Die duale Bedarfsdeckung ist dabei kostengünstiger als eine vollständige Deckung durch Elektrolysesauerstoff, da im letzteren Fall das PtG-System entweder stark überdimensioniert oder der Elektrolyseur mit höherer Volllaststundenzahl betrieben werden muss, wodurch hohe Strompreise in Kauf genommen werden. Beides resultiert in einer Zunahme der LCOH.

Durch die Einsparungen können die LCOH gegenüber dem Referenzszenario um $0,39 \text{ €/kg}$

gesenkt werden. Dies entspricht der größten Kostenreduktion aller untersuchten Optimierungsszenarien, sodass durch den sauerstoffgeführten Betrieb der Elektrolyse bei Substitution von angeliefertem Flüssigsauerstoff der größte ökonomische Vorteil erreicht wird. Auch die erzielten LCOH stellen die geringsten Kosten der optimierten Szenarien dar. Dies wird zum einen durch das große Einsparpotenzial bei der Nutzung von Elektrolysesauerstoff anstelle von teurem Flüssigsauerstoff erreicht. Zum anderen können durch die geringe Volllaststundenzahl Strompreisspitzen umgangen werden.

Wasserstoffgeführter Betrieb

Im wasserstoffgeführten Betrieb muss neben dem Sauerstoff- auch ein Wasserstoffbedarf von $1000 \text{ Nm}^3/\text{h}$ bedient werden. Die Erfüllung des Wasserstoffbedarfes durch die Elektrolyse wird priorisiert. Die optimierte Elektrolyseleistung von 5,21 MW ist identisch zum wasserstoffgeführten Betrieb aus Teilszenario B1. Ebenso wird der Elektrolyseur wie in Teilszenario B1 ganzjährig in Volllast betrieben, um den Wasserstoffbedarf zu decken. Da die Elektrolyseleistung aufgrund der Wasserstoffpriorisierung geringer ist als im sauerstoffgeführten Betrieb, kann hier weniger Elektrolysesauerstoff erzeugt werden. Es muss daher mehr externer Sauerstoff zugekauft werden. Die jährliche Menge an zugekauftem Sauerstoff beträgt 6196 Tonnen. Dies entspricht 50 % des gesamten Sauerstoffbedarfes eines Jahres. Die Mengen an erzeugtem und zugekauftem Sauerstoff sind also nahezu gleich groß.

Das Verhältnis von erzeugtem zu angeliefertem Sauerstoff resultiert aus dem fixen Stoffmengenverhältnis von Wasserstoff und Sauerstoff aus der Elektrolyse (2:1) bei gleich groß gewählten Bedarfen der beiden Gase. Der Anteil des Elektrolysesauerstoffs an der Deckung des Sauerstoffbedarfes und somit auch die Einsparungen durch weniger angekauften Sauerstoff sind daher im wasserstoffgeführten Betrieb maßgeblich abhängig vom Verhältnis des Wasserstoff- und Sauerstoffbedarfs. Der Konflikt von gekoppelten Wasserstoff- und Sauerstoffbedarfen an einem Industriestandort stellt bei der Nutzung von Elektrolysesauerstoff jedoch einen realitätsnahen Konflikt dar. Da Wasserstoff das Hauptprodukt der Elektrolyse darstellt, erfolgt in der Praxis, ähnlich wie im betrachteten Szenario, meist eine Priorisierung des Wasserstoffbedarfes.

Aus der Wasserstoffpriorisierung resultieren geringere jährliche Einsparungen von 270 410 €, was etwa 27 % der Kosten bei Bezug von Flüssigsauerstoff entspricht. Es ergibt sich eine Kostenreduktion der LCOH um $0,10 \text{ €/kg}$. Durch die vergleichsweise geringe Elektrolyseleistung bei gleichzeitig hoher Volllaststundenzahl sind die LCOH mit $6,52 \text{ €/kg}$ relativ hoch.

EE-geführter Betrieb

Im EE-geführten Betrieb kann der Sauerstoffbedarf nur bei Verfügbarkeit von erneuerbaren Energien durch Elektrolysesauerstoff gedeckt werden. Die Volllaststundenzahl ergibt sich daraus zu 5424 h. Für eine kostenoptimale Deckung des Bedarfes wird ein Elektrolyseur mit

11,83 MW elektrischer Anschlussleistung installiert. Diese ist nahezu identisch zu der optimierten Leistung des sauerstoffgeführten Betriebs. Durch die begrenzte Verfügbarkeit an Energie und die dadurch geringere Volllaststundenzahl muss im Vergleich zu B3-O₂ eine größere Menge Sauerstoff extern zugekauft werden. Die jährlich zugekaufte Menge beträgt 3391 Tonnen, was etwa 27 % der gesamten Sauerstoffmenge entspricht. Die Kosten durch den Zukauf ergeben sich zu 400 190 €, die Einsparungen durch den Verzicht auf Flüssigsauerstoff zu 601 330 €. Es kann so eine Kostenreduktion des Sauerstoffbezugs um 60 % erreicht werden.

Durch das hohe Einsparpotenzial kann auch im EE-geführten Betrieb eine hohe Kostenreduktion von 0,36 €/kg durch die Nutzung von Elektrolysesauerstoff im Vergleich zum Referenzszenario erzielt werden. Die LCOH belaufen sich auf 5,27 €/kg und liegen durch die erhöhte Elektrolyseleistung und die höheren Kosten durch den Zukauf von Sauerstoff leicht über denen des sauerstoffgeführten Betriebs. Wie in den vorigen Szenarien bereits vermerkt, ergibt sich im EE-geführten Betrieb jedoch ein ökologischer Vorteil gegenüber den anderen Betriebsweisen, da der Wasserstoff und der Elektrolysesauerstoff lediglich aus erneuerbarer Energie erzeugt wurde.

4.2.4 Auswertung der Optimierungsergebnisse

Durch die vorgestellten Ergebnisse der Optimierungsszenarien B wurde anhand konkreter Verwertungspfade der ökonomische Einfluss der Sauerstoffnutzung auf die Elektrolyse quantifiziert. Hierfür wurden verschiedene Szenarien der Sauerstoffnutzung sowie Betriebsweisen des Elektrolyseurs untersucht und die jeweiligen Ergebnisse diskutiert. Im Folgenden sollen die Optimierungsergebnisse zusammengeführt und ein Vergleich zwischen den Betriebsweisen des Elektrolyseurs und den Teilszenarien zur Sauerstoffnutzung gezogen werden. Es soll die Frage geklärt werden, ob und unter welchen Bedingungen die Sauerstoffnutzung die Wirtschaftlichkeit von Elektrolyseuren in realitätsnahen Anwendungen verbessern kann. Abbildung 4.10 stellt die Optimierungsergebnisse aller untersuchten Teilszenarien und Betriebsweisen dar. Die errechneten LCOH der Optimierungen sind dabei opak gefärbt und weiß beschriftet, die erzielte Kostenreduktion der Optimierungen ist transparent gefärbt und schwarz beschriftet.

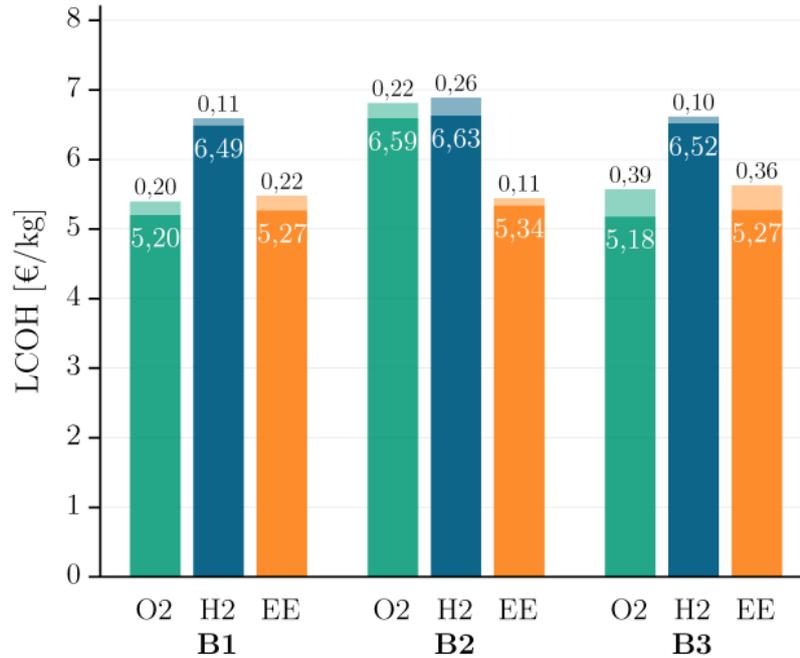


Abbildung 4.10: Optimierungsergebnisse der untersuchten Teilszenarien und Betriebsweisen

Beurteilung der Verwertungspfade

In Teilszenario B1 konnte für alle Betriebsweisen des Elektrolyseurs im Vergleich zum Referenzszenario ohne Sauerstoffnutzung ein ökonomischer Vorteil erzielt werden. Der Betrieb eines Elektrolyseurs in Verbindung mit einer bestehenden LZA in Teillast zur Deckung des Sauerstoffbedarfes eines Industriestandortes kann somit ökonomisch sinnvoll sein. In allen betrachteten Betriebsweisen des Teilszenarios weist die LZA eine durchschnittliche Teillast von mindestens 50 % und eine minimale Teillast von über 25 % auf. Dies ist unter Berücksichtigung der maximalen Laständerungsrate laut Literatur im technisch möglichen Bereich [22].

Durch den Teillastbetrieb der Anlage können für jede Betriebsweise Stromkosteneinsparungen, in einzelnen Fällen im sechsstelligen Bereich, erzielt werden. In Zukunft kann der Teillastbetrieb einer bestehenden LZA in Verbindung mit der PEM-Elektrolyse daher in Anbetracht stark steigender Strompreise und der damit verbundenen Notwendigkeit der Energieeffizienz und -suffizienz ein wirtschaftlich und ökologisch attraktives Szenario darstellen. Des Weiteren birgt der Teillastbetrieb einer LZA in Verbindung mit der PEM-Elektrolyse ein großes Flexibilitätspotenzial für das Energiesystem [22]. Der gekoppelte Betrieb einer LZA und einer PEM-Elektrolyse kann daher insbesondere für energieintensive Industriestandorte, die sowohl einen Wasserstoff- als auch einen Sauerstoffbedarf aufweisen, wirtschaftlich sinnvoll sein. So sind laut Literatur sowie Experten aus der Stahl- und Glasindustrie die hohen Stromkosten der konventionellen Sauerstofferzeugung eines der Hauptargumente gegen das Umsteigen auf sauerstoffbasierte Verfahren wie das Oxyfuel-Verfahren anstelle von luftbasierten. Die

diskutierten Stromkosteneinsparungen durch die Nutzung von Elektrolysesauerstoff bei bestehendem Wasserstoffbedarf könnten einen Anreiz für die Umstellung auf solche Verfahren bieten.

Es konnte weiterhin ein bedarfsgerechtes, dynamisches Zusammenspiel des Elektrolysesauerstoffs, des Sauerstoffspeichers und der LZA in Teillast festgestellt werden. Das System zur Bereitstellung von Sauerstoff verfügt dabei über die nötige Flexibilität, um Strompreisspitzen auszugleichen und die Deckung des Sauerstoffbedarfes zu gewährleisten.

Es konnte in den Optimierungen aus Teilszenario B1 mit 5,20 €/kg vergleichsweise geringe LCOH erzielt werden, sodass die gleichzeitige Erzeugung und Nutzung von Wasserstoff und Sauerstoff für Industriestandorte mit bestehender LZA ein attraktives Szenario für Industriestandorte darstellen könnte. Die Produktgase können dabei On-Site genutzt oder gewinnbringend verkauft werden. Die durch die Restwertmethode errechneten Wasserstoffgestehungskosten unter Nutzung des Nebenprodukts Sauerstoff in diesem Szenario sind dabei konkurrenzfähig mit Preisen für grünen Wasserstoff von 4-6 €/kg [11].

Auch in Teilszenario B2 konnte für alle Betriebsweisen eine Kostenreduktion der LCOH durch die Sauerstoffnutzung erzielt werden. Die Nutzung von Elektrolysesauerstoff in Verbindung mit einer neu installierten LZA an einem Industriestandort kann daher wirtschaftlich sinnvoll sein. Im kostenoptimalen Fall wird in jedem Szenario eine vergleichsweise hohe Elektrolyseleistung zur Deckung des Sauerstoffbedarfes gewählt. Gleichzeitig wird die Kapazität der zu installierenden LZA im kostenoptimalen Fall für alle Betriebsweisen im Vergleich zur Vollversorgung durch die LZA reduziert. Die PEM-Elektrolyse trägt also in allen Betriebsweisen einen erheblichen Teil zur Deckung des Sauerstoffbedarfes bei, im sauerstoffgeführten Betrieb sogar fast 90% des jährlichen Bedarfes des Werks.

Das Szenario der Nutzung von Elektrolysesauerstoff in Verbindung mit einer neu zu installierenden LZA zeichnet sich im Vergleich mit den anderen Verwertungspfaden durch relativ hohe Wasserstoffgestehungskosten aus. Diese folgen aus höheren Volllaststundenzahlen bzw. einer nötigen Überdimensionierung des PtG-Systems zur Bedarfsdeckung infolge fehlender Sauerstofferzeugungsflexibilität. Das System zur Bedarfsdeckung aus Elektrolyse, Sauerstoffspeicher und LZA in Volllast bietet weniger Flexibilität als der Verbund mit einer LZA in Teillast aus Teilszenario B1. Es ergeben sich dadurch höhere Kosten im Vergleich zum Teillastbetrieb einer bestehenden Anlage. Der Einfluss des Teillastbetriebs einer LZA im Zusammenspiel mit der PEM-Technologie zur Erhöhung der Erzeugungsflexibilität gilt es in einer weiteren Arbeit durch Optimierung zu untersuchen.

Es kann festgehalten werden, dass bei bevorstehender Installation einer neuen LZA zur Deckung eines Sauerstoffbedarfes eine geringere Dimensionierung der Anlage durch die Nutzung von Elektrolysesauerstoff rentabel ist, sofern der erzeugte Wasserstoff in Industrieprozessen benötigt oder gewinnbringend verkauft werden kann. Es gilt ausreichende Speicherkapazitäten vorzusehen und, sofern technisch möglich, die Möglichkeit von Laständerungen der LZA

abzuklären, um hohe Volllaststundenzahlen und Überdimensionierung der Elektrolyse zu vermeiden.

Die Betrachtung einer Sauerstoffversorgung durch Flüssigsauerstoff in Teilszenario B3 betrifft im Gegensatz zu den Szenarien B1 und B2 eher Industrieanwendungen mit kleineren Sauerstoffbedarfen. Die hohen erzielten Kostenreduktionen bei vergleichsweise geringen LCOH zeigen das hohe ökonomische Potenzial der Substitution von Flüssigsauerstofflieferungen durch vor Ort produzierten Elektrolysesauerstoff auf. Die On-Site-Produktion von Elektrolysesauerstoff ist hier sinnvoll, da die Transport- und Umwandlungskosten für Flüssigsauerstoff sowie die Margen der Gasehändler vermieden werden können. Die Rentabilität der Substitution durch Elektrolysesauerstoff ist dabei maßgeblich abhängig von den gewählten Preisen für den Bezug des Flüssigsauerstoffs und des extern angelieferten, gasförmigen Sauerstoffs im Falle der Substitution.

In keinem der betrachteten Fälle aus Teilszenario B3 wird der Bedarf des Werks vollständig durch Elektrolysesauerstoff gedeckt. Der höchste Grad der Substitution wird im sauerstoffgeführten Betrieb erzielt, in dem rund 78 % des jährlichen Bedarfes durch Elektrolysesauerstoff gedeckt werden kann. Der extern angelieferte Sauerstoff, der den Massenstrom aus der Elektrolyse zur Bedarfsdeckung als eine Art Vorrat ergänzt, ermöglicht eine gewisse Flexibilität der Sauerstofferzeugung. Der zugekaufte Sauerstoff kann dabei in Flaschenbündeln als Reserve gehalten oder in den Sauerstoffspeicher der Elektrolyse eingespeichert werden. Die so gewonnene Flexibilität ermöglicht die Sauerstofferzeugung bei niedrigen Strompreisen sowie eine kostenoptimale Dimensionierung der Elektrolyse. Durch das Einsparpotenzial dieses Verwertungspfades können im Vergleich zu den anderen Teilszenarien die höchsten Kostenreduktionen und gleichzeitig günstige LCOH von minimal 5,18 €/kg erzielt werden.

Ein Beispiel für diesen Verwertungspfad im untersuchten Maßstab stellt etwa die zukünftige, duale Nutzung von Wasserstoff und Sauerstoff in der Glasindustrie dar. Dabei kann der künftige Wasserstoffbedarf der Glashütte durch die Elektrolyse gedeckt und der als Nebenprodukt erzeugte Sauerstoff für den Betrieb einer Oxyfuel-Wanne genutzt werden, die ansonsten durch die Anlieferung von Flüssigsauerstoff betrieben wird. Bei Installation eines Elektrolyseurs zur Erzeugung von Wasserstoff an einem Industriestandort sollte bei bestehender Abhängigkeit von angeliefertem Flüssigsauerstoff die teilweise Substitution durch Elektrolysesauerstoff erwogen werden, da diese ein großes Einsparpotenzial bietet.

Auswertung der Betriebsweisen der Elektrolyse

Innerhalb der optimierten Teilszenarien ergeben sich abhängig von der Betriebsweise der Elektrolyse erhebliche Unterschiede in den LCOH und deren Kostenreduktion durch die Sauerstoffnutzung. Zunächst ist aus Abbildung 4.10 zu erkennen, dass die LCOH in jedem Teilszenario für den wasserstoffgeführten Betrieb am höchsten ausfallen. Dies liegt in der Notwendigkeit

der gleichzeitigen Erfüllung beider Bedarfe begründet. Da die Elektrolyse anhand des Wasserstoffbedarfes dimensioniert wird, ergeben sich insgesamt weniger Kostenreduktionen durch die Sauerstoffnutzung. Die LCOH des wasserstoffgeführten Betriebs sind außerdem für alle drei Szenarien nahezu gleich hoch, da in jedem Teilszenario der gleiche Wasserstoffbedarf gedeckt werden muss und das PtG-System durch die Priorisierung ähnlich dimensioniert wird.

Die wasserstoffgeführte Betriebsweise bildet einen realitätsnahen Anwendungsfall ab, in dem die Installation eines PtG-Systems primär anhand des Bedarfes des Hauptprodukts Wasserstoff ausgerichtet wird. Die Deckung eines vorliegenden Sauerstoffbedarfes am Industriestandort durch die Elektrolyse ist hingegen nachrangig. Auch ohne priorisierte Deckung des Sauerstoffbedarfes ergeben sich durch die Sauerstoffnutzung aus der Elektrolyse in jedem Teilszenario Einsparungen. Für die Wirtschaftlichkeit der Sauerstoffnutzung sind vor allem die gewählte Höhe und das Verhältnis der Wasserstoff- und Sauerstoffbedarfe entscheidend, da diese aufgrund des fixen Stoffmengenverhältnisses der Elektrolyseprodukte den Anteil der Sauerstoffbedarfsdeckung und somit die erzielbaren Kosteneinsparungen maßgeblich beeinflussen.

Im sauerstoffgeführten Betrieb wird der erzeugte Wasserstoff zwar immer noch als Hauptprodukt erachtet, jedoch wird die Deckung des Sauerstoffbedarfes priorisiert. Die Betriebsweise stellt den Praxisfall dar, bei dem der Sauerstoff On-Site oder extern mit einem konstanten Bedarf genutzt wird, während der Wasserstoff in variabler, nicht festgelegter Menge an Anwender geliefert bzw. am freien Markt verkauft wird. Die erzielten LCOH sind bis auf Teilszenario B2 vergleichsweise gering. In Teilszenario B2 ergeben sich aufgrund der hohen Volllaststundenzahl und daraus resultierende Stromkosten durch fehlende Erzeugungsflexibilität höhere LCOH.

Der EE-geführte Betrieb zeichnet sich in allen Teilszenarien aufgrund der begrenzten Verfügbarkeit der erneuerbaren Energien durch geringe Volllaststundenzahlen aus. Diese sind für den EE-geführten Betrieb in jedem Teilszenario geringer als die der restlichen Betriebsweisen. Über alle Teilszenarien hinweg ergeben sich durch das Umgehen von Strompreisspitzen niedrige LCOH. Der ausschließliche Bezug von erneuerbarer Energie bietet zwar im Gegensatz zum zusätzlichen Netzstrombezug weniger Flexibilität zur Erzeugung von Wasserstoff und Sauerstoff, da die Elektrolyse nur bei Verfügbarkeit von erneuerbarer Energie betrieben werden kann. Jedoch ist der EE-geführte Betrieb der Elektrolyse bei ausreichender Speicherkapazität durch niedrige LCOH durchaus rentabel, da neben hohen Strompreisen auch Netzanschlusskosten und Nettonetzentgelte vermieden werden können. Der EE-geführte Betrieb ermöglicht außerdem als einzige betrachtete Betriebsweise die Möglichkeit zur Erzeugung von grünem Wasserstoff und zur Vermeidung von CO₂-Emissionen durch den Strommix. Die Nutzung von Sauerstoff als Nebenprodukt kann im EE-geführten Betrieb der Elektrolyse daher ökologisch und aufgrund der Kostenreduktion der LCOH auch ökonomisch sinnvoll gestaltet werden.

Auswertung von Leistungskennzahlen der Optimierungsergebnisse

Tabelle 4.6 stellt eine Übersicht über ausgewählte Leistungskennzahlen der Optimierungsergebnisse der einzelnen Szenarien dar, um den Einfluss der Sauerstoffnutzung auf den technischen Betrieb des Elektrolyseurs und das Energiesystem zu untersuchen. Die durch die Sauerstoffnutzung eingesparte Energiemenge ΔE_{O_2} ergibt sich für Teilszenario B1 und B2 aus der Differenz der eingesparten Energiemenge (vgl. 4.3 und 4.4) der LZA und der für die Sauerstoffnutzung aufgewendete, jährliche Energiemenge der Gasreinigung und des Kompressors. Für Teilszenario B3 wird die für die Sauerstoffnutzung aufgewendete Energiemenge von der jährlich eingesparten Energiemenge durch die Substitution von Flüssigsauerstoff abgezogen. Die jährlich eingesparte Menge an Flüssigsauerstoff wird dafür mit dem spezifischen Energiebedarf einer LZA von $0,46 \text{ kWh/Nm}^3$ multipliziert. Es wird angenommen, dass der Flüssigsauerstoff im Referenzfall durch die kryogene Luftzerlegung hergestellt wird.

Der Wirkungsgrad eines Elektrolyseurs ist durch das Verhältnis des Heizwerts H_i (Nutzen) der produzierten Wasserstoffmenge m_{H_2} zu der zur Erzeugung benötigten Energiemenge (Aufwand) definiert. Der Heizwert von Wasserstoff beträgt $33,33 \text{ MWh/t}$. Die Menge der aufgenommenen elektrischen Energie kann durch das Produkt aus installierter, elektrischer Leistung des Elektrolyseurs P_{EL} und der Volllaststundenzahl VLS berechnet werden. Die Berechnung des Wirkungsgrades ohne Sauerstoffnutzung $\eta_{EL,alt}$ erfolgt nach Gleichung 4.1. Zur Berechnung des Wirkungsgrades des Elektrolyseurs mit Sauerstoffnutzung η_{EL,O_2} nach Gleichung 4.2 kann die eingesparte Energie durch die Sauerstoffnutzung von der Energiemenge zur Wasserstoffherzeugung abgezogen werden. Die Wirkungsgradverbesserung $\Delta\eta_{EL}$ berechnet sich nach Gleichung 4.3.

$$\eta_{EL,alt} = \frac{m_{H_2} \cdot H_i}{P_{EL} \cdot VLS} \quad (4.1)$$

$$\eta_{EL,O_2} = \frac{m_{H_2} \cdot H_i}{P_{EL} \cdot VLS - \Delta E_{O_2}} \quad (4.2)$$

$$\Delta\eta_{EL} = \eta_{EL,O_2} - \eta_{EL,alt} \quad (4.3)$$

Die durch die Sauerstoffnutzung jährlich eingesparte Menge an CO_2 -Äquivalenten Δm_{CO_2e} in t berechnet sich durch die Menge an eingesparter Energie und den spezifischen Treibhausgasemissionen im deutschen Strommix. Diese betragen für das Jahr 2021 etwa $0,42 \text{ t/MWh}$ [85]. Die Bilanzierung ist auch im EE-geführten Betrieb zulässig, da der Elektrolyseur zwar mit erneuerbarer Energie betrieben wird, die Luftzerlegungsanlagen jedoch Netzstrom aus dem Strommix beziehen.

Tabelle 4.6: Übersicht über Leistungskennzahlen der Optimierungsergebnisse

		ΔE_{O_2} [MWh]	$\eta_{EL,alt}$ [%]	$\Delta \eta_{EL}$ [%]	Δm_{CO_2e} ¹ [t/a]
B1	O ₂	14 335	55	1,74	6020
	H ₂	1117	57	1,44	469
	EE	13 019	59	1,97	5468
B2	O ₂	31 076	58	2,32	13052
	H ₂	1589	49	1,50	667
	EE	4900	59	0,65	2058
B3	O ₂	2539	58	2,21	1066
	H ₂	1664	57	2,18	699
	EE	2378	59	2,27	999

¹ Mit spezifischen Treibhausgasemissionen von 0,42 t/MWh (2021) [85]

Aus der Analyse der Leistungskennzahlen der Sauerstoffnutzung wird deutlich, dass durch die Sauerstoffnutzung in jedem Teilszenario und für jede Betriebsweise des Elektrolyseurs energetische Einsparungen erzielt werden können, die zu einer Wirkungsgradverbesserung des Elektrolyseurs führen. Die Wirkungsgradverbesserungen und Treibhausgaseinsparungen sind dabei für Teilszenario B1 und B2 direkt proportional zu den Energieeinsparungen durch die Energieeinsparungen der LZA. Für Szenario B3 sind sie hingegen abhängig von der eingesparten Menge an Flüssigsauerstoff, der ansonsten durch die kryogene Luftzerlegung erzeugt wird. Für den sauerstoffgeführten Betrieb aus Teilszenario B2 können die größten Energieeinsparungen und somit die höchste Wirkungsgradverbesserung sowie Treibhausgasreduktion festgestellt werden. Dies liegt im hohen Grad der Substitution der konventionellen Sauerstoffherzeugung durch hohe installierte Elektrolyseleistung begründet. Die maximal erzielte Wirkungsgradverbesserung beträgt 2,32%, die maximale Treibhausgasreduktion beträgt 13052 Tonnen CO₂-Äquivalente pro Jahr.

Die Sauerstoffnutzung hat also einen positiven Einfluss auf die Energieeffizienz eines Elektrolyseurs, wenn durch die Sauerstoffnutzung Energie für die konventionelle Erzeugung von Sauerstoff eingespart werden kann. Das energetische und ökologische Einsparpotenzial der Nutzung von Sauerstoff als Nebenprodukt der Elektrolyse ist maßgeblich abhängig vom betrachteten Anwendungsfall und der Betriebsweise des Elektrolyseurs sowie vom Grad der Substitution von konventioneller Sauerstoffherzeugung.

4.3 Ergebnisse der GIS-Potenzialanalyse

Abbildung 4.11 stellt die Ergebnisse der Potenzialanalyse für die ausgewählten Branchen dar. Die eingefärbten Symbole stellen die identifizierten Standorte mit Sauerstoffpotenzialen dar. Die Größe der Symbole korrespondiert dabei mit der Höhe des jeweiligen Sauerstoffpotenzials in Nm^3/a .

Anhand der Ergebnisse wird ersichtlich, dass die Standorte der Stahlindustrie mit bis zu 1617 Mio. Nm^3/a das größte Sauerstoffpotenzial aufweisen. Die Standorte sind weiter aufgeschlüsselt nach dem jeweiligen Verfahren zur Stahlerzeugung. Im Rahmen der Potenzialanalyse ist für die einzelnen Industrien außerdem zwischen Potenzialen und Bedarfen zu unterscheiden. Die erhobenen Potenziale der Standorte der Stahlindustrie stellen im Gegensatz zu nahezu allen anderen Industriestandorten tatsächliche Bedarfe dar, da dort bereits heute in großen Mengen Sauerstoff verwendet wird.

Die Glasindustrie weist dagegen mehrere Standorte mit geringeren Potenzialen bis 50 Mio. Nm^3/a auf und ist nach dem jeweiligen Produkt des Standorts aufgeschlüsselt. Die Höhe des Potenzials ist dabei abhängig von der Tagesleistung des Standorts. Auch hier handelt es sich vereinzelt um Sauerstoffbedarfe, da in wenigen Glaswerken Oxyfuel-Wannen zum Einsatz kommen. Auch wenn ein Trend zur Umstellung auf Oxyfuel-Wannen erkennbar ist, handelt es sich in der Glasindustrie weitestgehend um zukünftige Potenziale.

Die theoretischen Potenziale der Zementindustrie sind bei vollständiger Nutzung der Oxyfuel-Technologie anstelle von luftbasierten Verfahren ähnlich hoch wie die der Stahlindustrie. Aufgrund der großen Sauerstoffmengen und der oft kostenintensiven Sauerstofferzeugung ist eine vollständige Umstellung auf sauerstoffbasierte Verbrennung in naher Zukunft jedoch nicht zu erwarten. Bisher wird weltweit keine Anlage mit der Oxyfuel-Technologie im industriellen Maßstab betrieben, zwei Anlagen befinden sich jedoch im Testbetrieb.

In der Papier- und Zellstoffindustrie ergeben sich vergleichsweise geringe, dafür flächendeckende Potenziale durch die Sauerstoffdelignifizierung. Es ist davon auszugehen, dass einige der lokalisierten Standorte die Delignifizierung bereits mit Sauerstoff oder Ozon durchführen. Der Betrieb eines PtG-Systems zur Nutzung von Wasserstoff als Energieträger und Sauerstoff zur Delignifizierung birgt durch die duale Nutzung großes Technologiepotenzial.

Aufgrund der ähnlichen, kommunalen Verteilung von Krankenhäusern und Kläranlagen wurden die Potenziale dieser Standorte zur Übersichtlichkeit auf *NUTS 3*-Ebene (Kreisebene) aggregiert. Die Potenziale beider Branchen sind abhängig von der Kapazität der Einrichtungen, welche in starker Abhängigkeit zur Bevölkerungsdichte stehen. Im medizinischen Bereich handelt es sich zwar um geschätzte, reale Bedarfe, jedoch ist die Nutzung von Elektrolyse-sauerstoff aufgrund der strengen Regulatorik mit hohem Aufwand verbunden. Auch bei den Kläranlagen handelt es sich um theoretische Potenziale, da bisher kaum von luft- auf sauer-

stoffbegaste Belebtschlammverfahren umgestellt wurde. Insbesondere die Kläranlagen bieten jedoch aufgrund ihres hohen Stromverbrauchs und der gleichmäßigen räumlichen Verteilung ein hohes Potenzial zur Sektorenkopplung durch PtG-Systeme.

Zuletzt wurde eine Aggregation aller betrachteten Branchen auf *NUTS 3*-Ebene durchgeführt. Die gesamten Potenziale werden dabei durch die recht hohen und gleichmäßigen Potenziale der Kläranlagen geprägt. Jedoch grenzen sich industriell geprägte Regionen durch hohe Sauerstoffpotenziale mitunter stark ab. So besteht das höchste, regional aggregierte Potenzial im Stadtkreis Duisburg durch die dort ansässigen Stahlunternehmen. Tabelle A2 im Anhang fasst die resultierenden Potenziale nach Branchen und Verfahren bzw. Produkt sowie die zur Analyse verwendeten Datensätze zusammen.

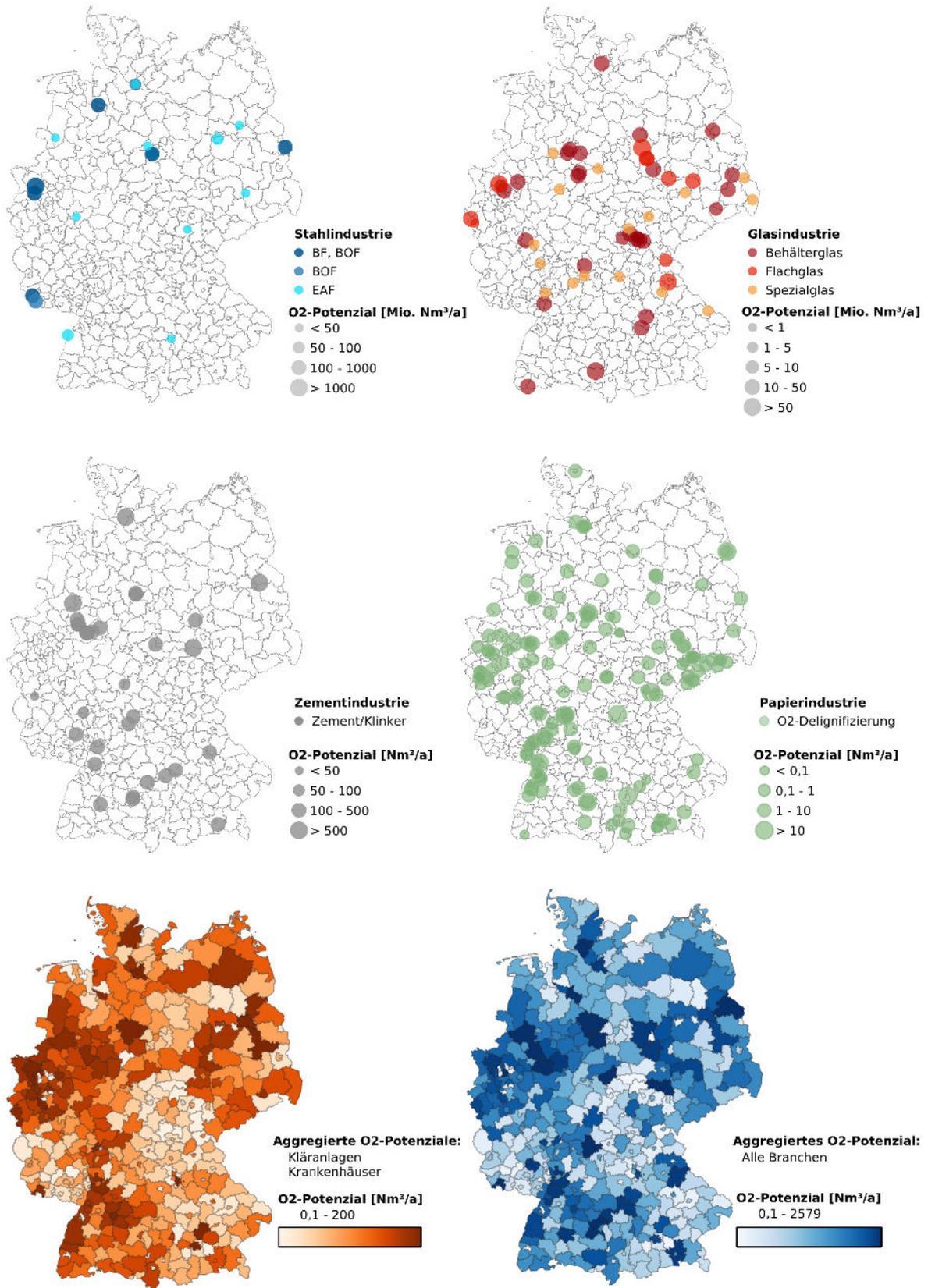


Abbildung 4.11: Ergebnisse der GIS-Potenzialanalyse

5 Diskussion

5.1 Beurteilung der Ergebnisse

In Teilszenario A0 konnte ein signifikanter Einfluss von Skaleneffekten auf die LCOH festgestellt werden, die aus den Kostenfunktionen der technischen Komponenten Elektrolyse, Kompressor und Gasreinigungsanlage resultieren. PtG-Systeme mit höherer Leistung neigen daher grundsätzlich zu geringeren LCOH. Die Optimierung hinsichtlich minimaler LCOH tendiert deshalb zu Systemen mit höherer Leistung. Eine bedarfsgerechte Dimensionierung des PtG-Systems wurde durch entsprechende ökonomische Bilanzierung und das Einführen fiktiver Strafzahlungen bei Nichterfüllung der Bedarfe weitestgehend sichergestellt. In den Simulationsszenarien führen die Skaleneffekte zu abnehmenden Sauerstoffgestehungskosten der betrachteten Technologie mit steigender Elektrolyseleistung. Dies ist für technische Anlagen aufgrund sinkender spezifischer Kosten bei steigender Größe auch in der Realität zu erwarten.

Die Gasreinigung mit anschließender Nutzung von Elektrolysesauerstoff kann einen attraktiven und kostengünstigen Anwendungsfall für Industriestandorte darstellen, bietet jedoch ohne Speicher kaum Flexibilität, da der Bedarf von Industrieprozessen bei ausbleibender Sauerstoffherzeugung nicht bedient werden kann. Für Anwendungen, in denen eine kontinuierliche Bedarfsdeckung als unverzichtbar anzusehen ist, wie z.B. die Schmelzwannen der Glasindustrie, sollten aus diesem Grund ausreichend Speicherkapazitäten vorgesehen werden.

Aufgrund der unterschiedlichen Speicherdrücke bieten die Ergebnisse aus Teilszenario A2 nur begrenzte Vergleichbarkeit der Speichertechnologien, da neben abweichenden Anlagenkosten auch unterschiedliche spezifische Speicherkapazitäten aufgrund des Dichtegradienten der gespeicherten Gase vorliegen. In zukünftigen Arbeiten sollten beide Technologien daher mit verschiedenen Speicherdrücken als Sensitivität der Simulation untersucht werden, um mehr Vergleichbarkeit zu gewährleisten und qualitative Aussagen bezüglich der Speicherung treffen zu können. Für Systeme mit höherer elektrischer Leistung ist die Bündelspeicherung aufgrund des hohen Drucks von 200 bar attraktiver. Für größere PtG-Systeme muss jedoch auch der hohe Flächenbedarf der Bündelspeicherung in Betracht gezogen werden.

Durch den Transport von Elektrolysesauerstoff sowie durch dessen Infrastruktur steigen die Sauerstoffgestehungskosten deutlich an. Eine On-Site-Produktion des Sauerstoffs ist bei vorliegendem Bedarf daher der Anlieferung zu bevorzugen. Im nahezu gesamten Betrachtungsbereich der Elektrolyseleistung und Transportdistanz ist der Bündeltransport kostengünstiger als der *tube*-Trailertransport. Es ist dabei jedoch auch der hohe personelle Aufwand im Be-

trieb des Bündeltransports durch den fortwährenden Austausch der Bündel zu berücksichtigen. Der *tube*-Trailertransport wurde lediglich für einen Betriebsdruck von 200 bar untersucht. Obgleich wird die *steel tube*-Technologie zum Teil auch mit deutlich höheren Betriebsdrücken von beispielsweise 350 bar für den Wasserstofftransport angewendet, sodass die spezifischen Investitionen der Transportinfrastruktur hier geringer ausfallen könnten. Der technische und ökonomische Einfluss des Betriebsdrucks der Transportoptionen sollte in einer weiteren Arbeit untersucht werden.

In den Optimierungsszenarien konnte für jeden untersuchten Verwertungspfad Einsparungen erzielt werden. Der Betrieb eines Elektrolyseurs in Verbindung mit einer Luftzerlegungsanlage in variabler Teillast wurde anhand der Ergebnisse als ökonomisch sinnvoll erachtet, da der Teillastbetrieb der Anlage ein hohes Flexibilitätspotenzial für die Bedarfsdeckung eines Industriestandorts sowie hohe Stromkosteneinsparungen bietet. Die technisch möglichen Grenzen der Teillastfähigkeit der Anlage wurden in den Optimierung voll ausgereizt. Es ist jedoch fraglich, ob ein solch dynamischer Betrieb in geringer Teillast realistisch und vor allem anlagentechnisch möglich ist. Die Frage der Teillastfähigkeit der Anlagen sollte daher in Gesprächen mit Anlagenbetreibern und durch weitere Literaturrecherche geklärt werden. Es wurde in dieser Arbeit von einem linearen Zusammenhang zwischen dem Grad der Teillast und dem spezifischen Energiebedarf ausgegangen. Die Güte dieser linearen Näherung ist durch eine reale Kennlinie des spezifischen Energieverbrauchs in Abhängigkeit der Teillast zu verifizieren.

Bei Installation einer neuen LZA können durch die Nutzung von erzeugtem Elektrolysesauerstoff Investitionen und Stromkosten durch verminderte Anlagenkapazität gegenüber der vollständigen Bedarfsdeckung eingespart werden. Ein zumindest geringfügig flexibler Teillastbetrieb der neuen Anlage kann bei gekoppeltem Betrieb basierend auf den Ergebnissen zu einer Kostenreduktion führen und sollte daher vorgenommen werden. Auch hier sollte überprüft werden, inwiefern der geringfügige Teillastbetrieb einer LZA anlagentechnisch möglich ist und inwieweit sich der spezifische Energieverbrauch der Anlage in Teillast verändert.

Die Substitution von extern angeliefertem Flüssigsauerstoff durch vor Ort produzierten Elektrolysesauerstoff kann ebenfalls zu erheblichen Kostenreduktionen führen. Da die Bedarfe bei der externen Anlieferung von Flüssigsauerstoff meist geringer ausfallen als bei der Versorgung durch eine eigene LZA, ist die Bedarfsdeckung durch die (PEM-)Wasserelektrolyse hier besonders geeignet. Trotz dessen wird in den Optimierungsergebnissen lediglich eine teilweise Deckung durch die Elektrolyse erreicht. Die erzielbaren Einsparungen durch die Substitution von Flüssigsauerstoff sind hochgradig abhängig von den festgelegten Preisen des Flüssigsauerstoffs und des gegebenenfalls zugekauften Sauerstoffs. Der Einfluss dieser Preise sollte in weiteren Arbeiten untersucht werden. Im Zuge dessen sollten reale Preise für Flüssigsauerstoff sowie für gasförmigen Sauerstoff in kleineren Mengen bei großindustriellen Abnehmern oder Gaseherstellern angefragt und mit den in dieser Arbeit gewählten Preisen verglichen werden.

Die Forschungsfrage dieser Arbeit, ob und inwieweit die Sauerstoffnutzung die Wirtschaftlichkeit von Elektrolyseuren verbessern kann, wurde in Anbetracht des erzielten, ökonomischen Vorteils in allen Optimierungsszenarien somit beantwortet. Positive Auswirkungen auf die Wirtschaftlichkeit der Sauerstoffnutzung haben insbesondere hohe Kosten der konventionellen Sauerstofferzeugung sowie eine größtmögliche Flexibilität der Sauerstofferzeugung durch einen variablen Teillastbetrieb der Luftzerlegungsanlagen oder variabler Menge an extern zugekauftem Sauerstoff.

Die Ergebnisse der GIS-Analyse bieten darüber hinaus einen räumlichen Überblick über Sauerstoffpotenziale ausgewählter Industrien. Dabei ist dringend zwischen bereits bestehenden Bedarfen und theoretischen Potenzialen, etwa durch eine Umstellung auf sauerstoffbasierte Verfahren, zu differenzieren. Die erstellten Potenzialkarten treffen diese Unterscheidung jedoch nicht, da die Unterscheidung aufgrund mangelnder Datenverfügbarkeit nicht immer zu treffen ist. Aufgrund der relativ kleinen Auswahl an Branchen bei gleichzeitig gewaltiger Vielfalt an Sauerstoffanwendungen, stellt die Potenzialanalyse in dieser Arbeit nur einen Teil der Potenzialerhebung dar. Die Potenzialanalyse sollte daher in Zukunft auf weitere Branchen wie etwa die Chemieindustrie ausgeweitet werden. Die Sauerstoffpotenziale der einzelnen Branchen wurden in dieser Arbeit durch einen branchenspezifischen Faktor, der mit einem branchenspezifischen Durchsatz des Industriestandorts, z.B. in Tonnen pro Tag, multipliziert wird, quantifiziert. Es wurde somit ein linearer Zusammenhang unterstellt. Die erhobenen Potenziale einzelner Standorte sollten daher stichprobenartig mit Angaben einzelner Sauerstoffanwendern verglichen werden, um die Potenzialerhebung zu verifizieren.

5.2 Beurteilung der Methodik

Das in dieser Arbeit entwickelte Modell in *MATLAB/Simulink* zur Sauerstoffnutzung aus der Elektrolyse basiert auf einer Vielzahl von einzeln modellierten, technischen Komponenten. Basierend auf einer bestehenden Modellbibliothek ergibt sich ein komplexes Modell zur Sauerstofferzeugung und -nutzung aus der Elektrolyse, für das eine Vielzahl von Annahmen und Vereinfachungen getroffen wurden.

So wurde etwa in der Modellierung des Elektrolyseurs und anderer technischer Komponenten keine Volllaststundenbegrenzung eingeführt, sodass Anlagen in einigen Fällen ganzjährig in Volllast betrieben werden. Dies bringt zwar maximale Freiheit in der Optimierung der Anlagen, negiert jedoch die Notwendigkeit von Wartungsintervallen.

Für den Strombezug des Elektrolyseurs wurden exemplarisch Zeitreihen realer PV- und Windenergieanlagen verwendet, die jedoch nicht am selben Ort installiert sind. Der Bezug von erneuerbarer Energie in diesem Modell ist damit nur bedingt repräsentativ. Für den Netzstrombezug wurden weiterhin reale Strompreiszeitreihen für das Jahr 2021 verwendet. Diese sind aufgrund der zum Zeitpunkt der Ausarbeitung herrschenden Strompreiskrise und COVID-19-

Pandemie im Vergleich zu den Vorjahren deutlich erhöht. Hohe Strompreise begünstigen in einigen Optimierungsfällen Stromkosteneinsparungen durch die Sauerstoffnutzung sowie den Ausbau erneuerbarer Energien, sodass Optimierungsgrößen mit anderen Strompreiszeitreihen unterschiedlich und Einsparungen geringer ausfallen können.

Als ökonomische Vergleichsgröße zur Bewertung der Wirtschaftlichkeit der Sauerstoffnutzung wurde die Kostendifferenz der LCOH zwischen dem kostenoptimalen Fall mit Sauerstoffnutzung und dem Referenzfall ohne Sauerstoffnutzung herangezogen. Die LCOH des Referenzfalls ohne Sauerstoffnutzung sind dabei lediglich Ergebnis einer Simulation mit den Optimierungsgrößen des kostenoptimalen Falls mit Sauerstoffnutzung. Es werden daher die selben Parameter für den Elektrolysebetrieb mit und ohne Sauerstoffnutzung angenommen. Obwohl die Kostendifferenz einen guten Indikator bezüglich potenzieller Einsparungen durch die Sauerstoffnutzung darstellt, suggeriert diese einen identischen Betrieb beider PtG-Systeme. Es ist jedoch sehr wahrscheinlich, dass der Elektrolysebetrieb ohne Sauerstoffnutzung aufgrund des fehlenden Sauerstoffbedarfs Abweichungen in Elektrolyseleistung und Zahl der Volllaststunden zeigt. In zukünftigen Betrachtungen sollten daher zeitaufwendige Optimierungs- anstelle der Simulationsergebnisse der Elektrolyse ohne Sauerstoffnutzung als ökonomische Vergleichsgröße dienen.

In der Optimierung treten ferner geringfügige, nicht reproduzierbare Abweichungen der Optimierungsvariablen auf. Ursachen für das Auftreten von Unregelmäßigkeiten in der Optimierung sind unter anderem die durch Abbruchkriterien bestimmte Optimierungsdauer, sprunghafte Änderungen der Optimierungsgrößen durch die Verwendung von *switches*, die das Verharren in lokalen Optima begünstigen können sowie ein geringfügiger Einfluss der optimierten Größen auf die Zielgröße LCOH. Der Einfluss solcher Unregelmäßigkeiten auf die LCOH ist jedoch als gering einzuschätzen, da in einer großen Anzahl an Iterationen stets ähnliche oder identische LCOH erzielt wurden und die Abweichungen im Vergleich zu den Unsicherheiten durch getroffene Annahmen und Vereinfachungen ohnehin gering sind.

6 Fazit

6.1 Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine techno-ökonomische Analyse der Nutzung von Sauerstoff als Nebenprodukt der Wasserelektrolyse durchgeführt. Für diesen Zweck wurde die Wasserstoffherzeugung durch die PEM-Elektrolyse sowie konkrete Pfade zur Sauerstoffnutzung in *MATLAB/Simulink* modelliert, um zu klären, ob und inwieweit die Sauerstoffnutzung die Wirtschaftlichkeit von Elektrolyseuren verbessert.

Zunächst wurde eine ausführliche Literaturrecherche durchgeführt, in der die theoretischen Grundlagen von Power-to-Gas-Systemen und der Wertschöpfungskette von der Sauerstoffherzeugung bis zur Nutzung beleuchtet wurden. Anschließend wurden potenzielle Sauerstoffanwendungen in der Industrie lokalisiert und Bedarfe abgeleitet. Die in dieser Arbeit betrachteten Branchen mit Sauerstoffanwendungen sind die Stahlindustrie, die Glasindustrie, Zementindustrie, Papier- und Zellstoffindustrie, Kläranlagen zur Abwasserbehandlung und der medizinische Sektor. Zuletzt wurden ökonomische Betrachtungsmethoden der Kuppelproduktion erörtert und Studien zur Sauerstoffnutzung aus der Elektrolyse recherchiert. Die Literaturrecherche hat ergeben, dass bisher keine systematische, modellbasierte, techno-ökonomische Analyse der Sauerstoffnutzung aus der Wasserelektrolyse, die über Einzelfallbetrachtungen einzelner Branchen hinausgeht, vorliegt. Diese Forschungslücke wurde durch diese Arbeit geschlossen.

In einem ersten Schritt der Modellierung wurden in *MATLAB/Simulink* Simulationen zur Untersuchung der Sauerstoffgestehungskosten der Technologien zur Konditionierung und Bereitstellung von Elektrolysesauerstoff durchgeführt. Hierfür wurden die technischen Komponenten der Wasserstoffherzeugung sowie der Sauerstoffnutzung in *Simulink* modelliert. Für die Modellierung der technischen Komponenten zur Sauerstoffnutzung wurden neue Blöcke programmiert sowie bestehende Blöcke aus einer Modellbibliothek des Fraunhofer ISE modifiziert. Die modellierten Blöcke zur Sauerstoffnutzung umfassen unter anderem Gasreinigungsanlagen, Kompressoren, Speicher, Anlagen zur konventionellen Sauerstoffherzeugung sowie Einheiten zur Steuerung und Regelung der Anlagen. Die bestehende Modellbibliothek zur Modellierung von Wasserstoffsystemen wurde damit um die Modellierung der Sauerstoffnutzung erweitert.

Die LCOH nehmen im entwickelten Modell aufgrund von Skaleneffekten der technischen Komponenten grundsätzlich mit steigender Elektrolyseleistung ab. Bei der techno-ökonomischen Untersuchung der Gasreinigungsanlage konnten geringe Sauerstoffgestehungskosten festge-

stellt werden. Die Reinigung mit anschließender Nutzung von Elektrolysesauerstoff stellt einen attraktiven und kostengünstigen Anwendungsfall für Industriestandorte dar, sofern keine Notwendigkeit der Speicherung besteht. In Abhängigkeit der Elektrolyseleistung und der gewählten Speicherdauer wurden die Technologien der Gasflaschenbündelspeicherung und der Tankspeicherung hinsichtlich Sauerstoffgestehungskosten untersucht. Für die betrachteten Elektrolysekapazitäten und Speicherdauern wurden aufgrund unterschiedlicher Speicherdrücke und daraus resultierenden Kompressorkosten für die Bündelspeicherung höhere Sauerstoffgestehungskosten als für die Tankspeicherung festgestellt. Die Sauerstoffgestehungskosten beider Optionen nehmen dabei mit steigender Speicherdauer zu. Durch den Transport des Elektrolysesauerstoffs steigen die Sauerstoffgestehungskosten deutlich an. Bei der Untersuchung der Transportkosten in Abhängigkeit der Elektrolyseleistung und der Transportdistanz konnten im nahezu gesamten Betrachtungsbereich geringere Kosten für den Bündeltransport als für den *tube*-Trailertransport nachgewiesen werden. Die Transportkosten steigen dabei mit zunehmender Transportdistanz.

Durch Optimierung mittels evolutionärem Algorithmus hinsichtlich minimaler LCOH wurde in einem zweiten Schritt der ökonomische Einfluss konkreter Verwertungspfade der Sauerstoffnutzung auf die Wasserstoffherzeugung quantifiziert. Der Betrieb eines Elektrolyseurs in Verbindung mit einer bereits bestehenden, aber teillastfähigen Luftzerlegungsanlage zur Deckung des Sauerstoffbedarfes eines Industriestandorts hat sich dabei als ökonomisch sinnvoll erwiesen. Durch die hohe Flexibilität des Systems zur Bereitstellung von Sauerstoff wurden dabei hohe Stromkosteneinsparungen und Reduktionen der LCOH erzielt. Eine verkleinerte Dimensionierung bei Neuinstallation einer Anlage aufgrund paralleler Nutzung des Elektrolysesauerstoffs kann zu Einsparung durch geringere Investitionen sowie Stromkosteneinsparungen führen. Ein besonders großes Einsparpotenzial konnte bei der Substitution von LOX-Anlieferungen durch Elektrolysesauerstoff nachgewiesen werden. Für jeden Verwertungspfad wurden außerdem verschiedene Betriebsweisen des Elektrolyseurs untersucht. Die Betriebsweisen unterscheiden sich jeweils in der Priorisierung der zu deckenden Bedarfe bzw. des Energiebezugs des Elektrolyseurs. Für alle untersuchten Betriebsweisen konnte die Wirtschaftlichkeit der Sauerstoffnutzung nachgewiesen werden. Durch die Erzeugung von grünem Wasserstoff im Betrieb mit ausschließlich erneuerbarer Energie ergab sich sowohl ein ökonomischer als auch ein ökologischer Vorteil. Der technische Einfluss der Sauerstoffnutzung auf die Elektrolyse in den einzelnen Verwertungspfaden wurde anhand von Leistungskennzahlen bewertet. Es ergeben sich in allen Szenarien Energie- und CO₂-Einsparungen mit bis zu 31 GWh bzw. 13 000 t jährlich. Es konnten durch die Sauerstoffnutzung Verbesserungen des Wirkungsgrades des Elektrolyseurs um bis zu 2,3 % nachgewiesen werden. Es wurde außerdem eine räumliche Analyse der Sauerstoffpotenziale ausgewählter Branchen in einem Geoinformationssystem durchgeführt und die erhobenen Potenziale in Potenzialkarten visualisiert.

6.2 Ausblick

In dieser Arbeit wurde ein erstes Modell zur techno-ökonomischen Analyse der Sauerstoffnutzung aus der Elektrolyse geschaffen. Darauf aufbauend sollten weitere Modellierungen und Berechnungen zur Untersuchung der Wirtschaftlichkeit der Sauerstoffnutzung durchgeführt werden. Die Untersuchung der Sauerstoffgestehungskosten wurde lediglich für ausgewählte Nennleistungen des PtG-Systems durchgeführt. In folgenden Arbeiten sollten weitere Simulationen mit breitem Leistungsspektrum des Elektrolyseurs vorgenommen werden, um den Einfluss der installierten Leistung auf die Sauerstoffgestehungskosten zu untersuchen. Um die Speicherung von Elektrolysesauerstoff näher zu beleuchten, sollte in zukünftigen Arbeiten der Speicherdruck der Speicheroptionen als Sensitivität der Simulationen variiert werden, um mehr Vergleichbarkeit der Speichertechnologien zu gewährleisten. Ebenso sollten beim Sauerstofftransport, insbesondere beim *tube*-Trailertransport, verschiedene Betriebsdrücke der Transportoptionen untersucht und deren Einfluss auf die Wirtschaftlichkeit des Transports quantifiziert werden. Eine nicht betrachtete Option des Sauerstofftransports stellt der Transport per Pipeline dar. Insbesondere für sehr hohe, konstante Bedarfe großer Industrieannehmer könnte dies ein attraktives Szenario darstellen, das in zukünftigen Modellen techno-ökonomisch untersucht werden sollte. Bei steigender Relevanz der industriellen Wasserstoffherzeugung durch die Elektrolyse könnte ein Netzwerk aus Wasserstoff- und Sauerstoffrohrleitungen Erzeuger und Anwender der Produktgase symbiotisch verbinden.

In zukünftigen Arbeiten sollten Optimierungsszenarien, in denen Luftzerlegungsanlagen einen Teil der Sauerstoffversorgung eines Industriestandorts übernehmen, modelliert und das Teillastverhalten der Anlagen untersucht werden. Das Flexibilitätspotenzial und Lastmanagement von Luftzerlegungsanlagen im Verbund mit der Elektrolyse zur Bereitstellung von Sauerstoff sollte im Anschluss an die Arbeit analysiert werden. In den Modellen dieser Arbeit wurde für alle Verwertungspfade ein Sauerstoffbedarf eines Industriestandorts implementiert. Dabei kann es für Industriestandorte, die zukünftig grünen Wasserstoff aus der Elektrolyse für die eigene Versorgung erzeugen, ebenso ökonomisch sinnvoll sein, den als Nebenprodukt anfallenden Sauerstoff zu verkaufen. Sauerstoffherzeuger könnten daher in den Markt für den Kauf und Verkauf von Sauerstoff eingebunden werden, um so einen ökonomischen Nutzen aus der Sauerstoffherzeugung zu ziehen. Der Verkauf und anschließende Transport von Sauerstoff könnte basierend auf den Ergebnissen der GIS-Potenzialanalyse in einen zeitlichen und räumlichen Kontext gesetzt werden, in dem Erzeuger und Anwender miteinander verbunden werden. Dabei könnten geographische und infrastrukturelle Rahmenbedingungen, wie etwa Distanz zwischen Erzeuger und Anwender sowie Entfernungen zu Autobahnen und Bahnhöfen, berücksichtigt werden. Die repräsentativen, theoretischen Verwertungspfade können durch die Modellierung konkreter Anwendungen der einzelnen Branchen bestätigt werden. Die GIS-Potenzialanalyse ist dahingehend um die infrastrukturelle Dimension und auf weitere Branchen mit Sauerstoffanwendungen auszuweiten.

Literaturverzeichnis

- [1] Fraunhofer ISE. *Wege zu einem klimaneutralen Energiesystem – Update Klimaneutralität 2045*. 2021.
- [2] Michael Sterner und Ingo Stadler. *Energiespeicher - Bedarf, Technologien, Integration*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2014.
- [3] V. Quaschnig. *Sektorkopplung durch die Energiewende: Anforderungen an den Ausbau erneuerbarer Energien zum Erreichen der Pariser Klimaschutzziele unter Berücksichtigung der Sektorkopplung*. 2016.
- [4] Deutsche Bahn AG. *Zukunftstechnologie in Frankfurt: Weltgrößte Flotte an Wasserstoffzügen wird im Werk von DB Regio instandgehalten*. URL: <https://www.deutschebahn.com/pr-frankfurt-de/Zukunftstechnologie-in-Frankfurt-Weltgroesste-Flotte-an-Wasserstoffzuegen-wird-im-Werk-von-DB-Regio-instandgehalten-6272654> (besucht am 01.08.2022).
- [5] Deutscher Industrie- und Handelskammertag e.V. *Wasserstoff: DIHK-Faktenpapier*. 2020.
- [6] Shell Deutschland, Wuppertal Institut. *Shell Wasserstoff-Studie: Energie der Zukunft?* 2017.
- [7] Agora Energiewende und Agora Industrie. *12 Thesen zu Wasserstoff*. 2022.
- [8] Deutscher Bundestag. *Grenzwerte für Wasserstoff (H₂) in der Erdgasinfrastruktur*. 2019.
- [9] Norman Gerhardt u. a. *Wasserstoff im zukünftigen Energiesystem: Fokus Gebäudewärme: Studie zum Einsatz von H₂ im zukünftigen Energiesystem unter besonderer Berücksichtigung der Gebäudewärmeversorgung*. Hrsg. von Fraunhofer-Institut für Energiewirtschaft und Energiesystemtechnik IEE. 2020.
- [10] Peter Kurzweil. *Angewandte Elektrochemie*. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden, 2020.
- [11] T. Smolinka u. a. „Wasserstoffherzeugung durch Elektrolyse und weitere Verfahren“. In: *Wasserstofftechnologien*. Hrsg. von Reimund Neugebauer. Wiesbaden: Springer Vieweg, 2022, S. 207–258.
- [12] Emanuele Taibi u. a. *Green hydrogen cost reduction: Scaling up electrolyzers to meet the 1.5C climate goal*. Hrsg. von The International Renewable Energy Agency. 2020.
- [13] T. Smolinka, M. Günther und J. Garche. *Stand und Entwicklungspotenzial der Wasserelektrolyse zur Herstellung von Wasserstoff aus regenerativen Energien*. 2011.
- [14] Graf F., Schoof R., Zdrallek M. *Power-to-Gas: Grundlagen – Konzepte – Lösungen*. Essen: Vulkan Verlag, 2021.

- [15] J. Eichman, K. Harrison und M. Peters. *Novel Electrolyzer Applications: Providing More Than Just Hydrogen*. 2014.
- [16] Marcelo Carmo u. a. „A comprehensive review on PEM water electrolysis“. In: *International Journal of Hydrogen Energy* 38.12 (2013), S. 4901–4934.
- [17] G. Tjarks. *PEM-Elektrolyse-Systeme zur Anwendung in Power-to-Gas Anlagen*. 2017.
- [18] Tobias Fichter und Philipp Creutzburg. *Energiewende in der Industrie: Flexibilitätssteckbrief der Grundstoffchemie*. 2020.
- [19] Linde Engineering. *Air separation plants*. 2022. URL: <https://www.linde-engineering.com/en/process-plants/air-separation-plants/index.html> (besucht am 22.09.2022).
- [20] D. Schweer, G. Scholz und M. Heisel. „On-Site-Verosrgung von Erdölraffinerien mit technischen Gasen“. In: *Praktiker* 118.3 (2002).
- [21] Fraunhofer-Institut für keramische Technologien und Systeme IKTS. *Dezentrale Sauerstoffproduktion*. 2022.
- [22] A. Sauer, E. Abele und H.S Buhl. *Energieflexibilität in der deutschen Industrie: Ergebnisse aus dem Kopernikus-Projekt*. 2019.
- [23] Bundesnetzagentur. *SMARD Strommarktdaten: Großhandelspreise*. 2022. URL: <https://www.smard.de> (besucht am 12.08.2022).
- [24] Takeyoshi Kato u. a. „Effective utilization of by-product oxygen from electrolysis hydrogen production“. In: *Energy* 30.14 (2005), S. 2580–2595.
- [25] Marius Stöckmann und Martin Bertau. „Kohlenstoff-Recycling aus Abfallbehandlungsanlagen – Baustein für eine biobasierte Industrie?“ In: *Chemie Ingenieur Technik* 92.11 (2020), S. 1700–1710.
- [26] Recharge. *World’s largest green hydrogen project – with 100MW electrolyser – set to be built in Egypt*. 2021. URL: <https://www.rechargenews.com/energy-transition/worlds-largest-green-hydrogen-project-with-100mw-electrolyser-set-to-be-built-in-egypt/2-1-1104709> (besucht am 19.08.2022).
- [27] H. Tschöke und H. Hölz. „Kompressoren, Verdichter“. In: *Dubbel*. Hrsg. von K. Grote und J. Feldhusen. Bd. 1. 2014, S. 1061–1081.
- [28] Linde. *Tankanlagen zur Versorgung mit verflüssigten Gasen*. 2022. URL: https://static.prd.echannel.linde.com/wcsstore/DE_REC_Industrial_Gas_Store/Assets/anwendungen/Tankanlagen_Fluessiggase.pdf (besucht am 15.08.2022).
- [29] Spartan Environmental Technologies. *Liquid Oxygen Systems (LOX) for Ozone Generators*. 2022. URL: <https://spartanwatertreatment.com/ozone-generator-lox-systems/> (besucht am 15.08.2022).
- [30] Linde. *Produktdatenblatt - Sauerstoff*. 2022. URL: https://static.prd.echannel.linde.com/wcsstore/DE_REC_Industrial_Gas_Store/datasheets/pds/sauerstoff.pdf (besucht am 15.08.2022).
- [31] Österreichischer Rundfunk. *CoV: Spitäler benötigen mehr Sauerstoff*. 2021. URL: <https://wien.orf.at/stories/3095774/> (besucht am 15.08.2022).

- [32] Markus Hurskainen und Jari Ihonen. „Techno-economic feasibility of road transport of hydrogen using liquid organic hydrogen carriers“. In: *International Journal of Hydrogen Energy* 45.56 (2020), S. 32098–32112.
- [33] K. Baumgärtner. *Sauerstoff-Bereitstellung für Großverbraucher in Chemie und Stahlindustrie*. 1974.
- [34] Markus Reuß. *Techno-ökonomische Analyse alternativer Wasserstoffinfrastruktur*. 2019.
- [35] Umweltbundesamt. *BVT-Festlegung in ausgewählten industriellen Bereichen als Beitrag zur Erfüllung der Klimaschutzziele und weiterer Immissionsschutzrechtlicher Anforderungen - Teilvorhaben 02: Erarbeitung eines deutschen Beitrages zur Revision des BVT-Merkblattes für die Glas- und Mineralfaserindustrie*. 2007.
- [36] N. Pardo und J. Moya. „Prospective scenarios on energy efficiency and CO₂ emissions in the European Iron & Steel industry“. In: *Energy* 54 (2013), S. 113–128.
- [37] Christian Achtelik, Matthias Schimmel und Jan-martin Rhiemeier. *Energiewende in der Industrie: Branchensteckbrief der Grundstoffchemie*. 2020.
- [38] M. Beermann u. a. *Die Öko-Wasserstoff-Tankstelle der Zukunft: Demonstration der gekoppelten elektrolytischen Erzeugung und Nutzung von Wasserstoff, Sauerstoff und Wärme aus Öko-Strom am HyCentA*. 2011.
- [39] C. Baukal. *Oxygen-Enhanced Combustion*. 2. Aufl. CRC Press, 2013.
- [40] Jannik Schlemme, Matthias Schimmel und Christian Achtelik. *Energiewende in der Industrie: Branchensteckbrief der Eisen- und Stahlindustrie*. 2020.
- [41] M. Weigel. *Ganzheitliche Bewertung zukünftig verfügbarer primärer Stahlherstellungsverfahren: Einschätzung der möglichen Rolle von Wasserstoff als Reduktionsmittel*. 2014.
- [42] R. Remus u. a. *Best available techniques (BAT) reference document for iron and steel production: Industrial emissions Directive 2010/75/EU : integrated pollution prevention and control*. Luxembourg, 2013.
- [43] K. Hegemann und R. Guder. *Stahlerzeugung*. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden, 2020.
- [44] Bundesministerium für Wirtschaft und Klimaschutz. *Spitzengespräch zur Stahlindustrie: Wege zur Umstellung auf CO₂-arme und langfristig klimaneutrale Produktion*. 2021. URL: <https://www.bmwk.de/Redaktion/DE/Pressemitteilungen/2021/06/20210621-spitzengespraech-der-stahlindustrie.html#:~:text=Die%20Stahlindustrie%20ist%20die%20Branche,6%25%20der%20Gesamtemissionen%20in%20Deutschland>. (besucht am 08.08.2022).
- [45] Deutsche Energie-Agentur GmbH. *Factsheet zur Stahlproduktion*. 2018.
- [46] Umweltbundesamt. *Massenprodukt Glas*. 2020. URL: <https://www.umweltbundesamt.de/daten/ressourcen-abfall/verwertung-entsorgung-ausgewaehlter-abfallarten/glas-altglas#massenprodukt-glas> (besucht am 23.09.2022).
- [47] Deutscher Verein des Gas- und Wasserfaches e.V. *Abschlussbericht - Wasserstofftoleranz der Erdgasinfrastruktur inklusive aller assoziierten Anlagen*. 2014.

- [48] Schott AG. *SCHOTT und Mainzer Stadtwerke testen Glasherstellung mit klimafreundlichem Wasserstoff*. Mainz, 2022. URL: <https://www.schott.com/de-de/news-and-media/pressemitteilungen/2022/schott-und-mainzer-stadtwerke-testen-glasherstellung-mit-klimafreundlichem-wasserstoff> (besucht am 12.08.2022).
- [49] WWF Deutschland. *Klimaschutz in der Beton- und Zementindustrie*. 2019.
- [50] Umweltbundesamt. *Dekarbonisierung der Zementindustrie*. 2020.
- [51] *Oxyfuel-Technologie zur CO₂-Abscheidung im HeidelbergCement-Werk Colleferro*. 2019. URL: <https://www.heidelbergcement.com/de/ecra-oxyfuel> (besucht am 09.08.2022).
- [52] O. Marin, O. Charon und J. Dugue. *Simulating the Impact of Oxygen Enrichment in a Cement Rotary Kiln Using Advanced Computational Methods*. 2000.
- [53] Frank Zeman. „Oxygen combustion in cement production“. In: *Energy Procedia* 1.1 (2009), S. 187–194.
- [54] Umweltbundesamt. *Zellstoff- und Papierindustrie*. 2022. URL: <https://www.umweltbundesamt.de/themen/wirtschaft-konsum/industriebereiche/holz-zellstoff-papierindustrie/zellstoff-papierindustrie#umweltauswirkungen> (besucht am 09.08.2022).
- [55] Michael Suhr u. a. *Best available techniques (BAT) reference document for the production of pulp, paper and board: Industrial emissions directive 2010/75/EU (integrated pollution prevention and control)*. Luxembourg, 2015.
- [56] J. Gullichsen u. a. *Chemical Pulping*. Chemical Pulping. Fapet Oy, 1999.
- [57] Deutsche Vereinigung für Wasserwirtschaft, Abwasser und Deutsche Abfall e. V. *DWA-Positionen - Positionen zur Energie- und Wasserwirtschaft*. Hennef, 2013.
- [58] Hossein Mohammadpour u. a. „Utilisation of oxygen from water electrolysis – Assessment for wastewater treatment and aquaculture“. In: *Chemical Engineering Science* 246 (2021).
- [59] K. Rudolph, G. Müller-Czygan und M. Bombeck. *Reinsauerstoffbelüftung auf kleinen Industriekläranlagen: Energieeinsparpotenziale und Kapazitätssteigerungen am Beispiel der Kläranlage der Fa. Emsland Frischgeflügel GmbH*. 2012.
- [60] Franziska Hönig, Matthias Ebert und Ulrich Blum, Hrsg. *Kläranlagen in Kombination mit der Wasserelektrolyse als neue Anbieter von Regelerzeugnissen*. 2018. (Besucht am 29.08.2022).
- [61] S. Büttner u. a., Hrsg. *Sektorenkopplung im Rahmen der Energiewende - Einsatz von Elektrolysesauerstoff auf kommunalen Kläranlagen*. Stralsund: HOST - Hochschule Stralsund, 2018.
- [62] M. Jentsch und S. Büttner. „Dezentrale Umsetzung der Energie- und Verkehrswende mit Wasserstoffsystemen auf Kläranlagen“. In: *gwf Gas+Energie* 160.6/2019 (2019). URL: https://hyson.de/wp-content/uploads/2020/09/Sonderdruck_gwf-gas-Jentsch_Buettner.pdf (besucht am 23.09.2022).

- [63] European Commission's Fuel Cell and Hydrogen Joint Undertaking. *REFHYNE*. 2022. URL: <https://refhyne.eu/> (besucht am 10.08.2022).
- [64] PATH. *COVID-19 Oxygen Needs Tracker*. 2022. URL: <https://www.path.org/programs/market-dynamics/covid-19-oxygen-needs-tracker/> (besucht am 11.08.2022).
- [65] E. Maltepe und O. Saugstad. „Oxygen in health and disease: regulation of oxygen homeostasis—clinical implications“. In: *Pediatric research* 65.3 (2009), S. 261–268.
- [66] Miguel Gómez-Chaparro, Justo García-Sanz-Calcedo und Luis Armenta Márquez. „Analytical Determination of Medical Gases Consumption and Their Impact on Hospital Sustainability“. In: *Sustainability* 10.8 (2018).
- [67] G. Maggio, G. Squadrito und A. Nicita. „Hydrogen and medical oxygen by renewable energy based electrolysis: A green and economically viable route“. In: *Applied Energy* 306 (2021).
- [68] J. Weber. *Gabler Wirtschaftslexikon: Kuppelprodukte*. 2018. URL: <https://wirtschaftslexikon.gabler.de/definition/kuppelprodukte-40672/version-264052> (besucht am 16.08.2022).
- [69] J. Dock, S. Wallner und T. Kienberger. *Energieeffizienz und Flexibilität bei der Elektrostahlproduktion*. 2022.
- [70] Katja Kuparinen, Esa Vakkilainen und Peter Ryder. „Integration of electrolysis to produce hydrogen and oxygen in a pulp mill process“. In: *Appita : Technology, Innovation, Manufacturing, Environment* 69.1 (2016), S. 81–88.
- [71] A. Rispoli, N. Verdone und G. Vilardi. „Green fuel production by coupling plastic waste oxy-combustion and PtG technologies: Economic, energy, exergy and CO₂-cycle analysis“. In: *Fuel Processing Technology* 221 (2021).
- [72] Bundesnetzagentur. *Kraftwerksliste*. 2022. URL: https://www.bundesnetzagentur.de/DE/Sachgebiete/ElektrizitaetundGas/Unternehmen_Institutionen/Versorgungssicherheit/Erzeugungskapazitaeten/Kraftwerksliste/start.html (besucht am 12.08.2022).
- [73] Karsten Weicker. *Evolutionäre Algorithmen*. 3., überarbeitete und erweiterte Auflage. Lehrbuch. Wiesbaden: Springer Vieweg, 2015.
- [74] Ulrich Pape. *Gabler Wirtschaftslexikon: Annuitätenmethode*. 2018. URL: <https://wirtschaftslexikon.gabler.de/definition/annuitaetenmethode-29301> (besucht am 18.08.2022).
- [75] Agora Verkehrswende und Agora Energiewende. *The Future Cost of Electricity-Based Synthetic Fuels*. 2018.
- [76] T. Smolinka, N. Wiebe und M. Thomassen. *Cost Break Down and Cost Reduction Strategies for PEM Water Electrolysis Systems*. 2017.
- [77] Tom Smolinka u. a. *Studie IndWEde - Industrialisierung der Wasserelektrolyse in Deutschland: Chancen und Herausforderungen für nachhaltigen Wasserstoff für Verkehr, Strom und Wärme*. 2018.

- [78] Sebastian Grünäugl. *Wasserstoff und SNG als Stromspeicheroptionen: STE Student Research Report*. 2012.
- [79] Giorgio Soave. „Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state“. In: *Chemical Engineering Science* 27.6 (1972), S. 1197–1203.
- [80] Mohamed Elhelw, Abdurrahman A. Alsanousie und Abdelhamid Attia. „Novel operation control strategy for conjugate high-low pressure air separation columns at different part loads“. In: *Alexandria Engineering Journal* 59.2 (2020), S. 613–633.
- [81] European Cement Research Academy. *ECA CCS Project - Report about Phase II*. 2009.
- [82] Bundesnetzagentur und Bundeskartellamt. *Monitoringbericht 2021*. 2022.
- [83] Markus Reuß u. a. „Hydrogen Road Transport Analysis in the Energy System: A Case Study for Germany through 2050“. In: *Energies* 14.11 (2021).
- [84] Marius Neuwirth u. a. „The future potential hydrogen demand in energy-intensive industries - a site-specific approach applied to Germany“. In: *Energy Conversion and Management* 252 (2022).
- [85] Umweltbundesamt. *CO₂-Emissionen pro Kilowattstunde Strom steigen 2021 wieder an*. 2022. URL: <https://www.umweltbundesamt.de/themen/co2-emissionen-pro-kilowattstunde-strom-steigen#:~:text=Das%20zeigen%20aktuelle%20Berechnungen%20des,2019%20bei%2041%20g%2FkWh>. (besucht am 13.08.2022).
- [86] BV Glas. *Mitgliedsunternehmen des Bundesverbands Glasindustrie e. V. und ihre Standorte*. 2022. URL: https://www.bvglas.de/media/Facts_and_figures_Jahresberichte/Standortkarten/2022_Januar_Standortkarte_BV_Glas.pdf (besucht am 21.09.2022).
- [87] European Environment Agency. *Waterbase - UWWTD: Urban Waste Water Treatment Directive*. 2022. URL: <https://www.eea.europa.eu/data-and-maps/data/waterbase-uwwtd-urban-waste-water-treatment-directive-8> (besucht am 21.09.2022).
- [88] Statistische Ämter des Bundes und der Länder. *Krankenhausatlas: Datenlizenz Deutschland – Namensnennung – Version 2.0*. 2016. URL: <https://krankenhausatlas.statistikportal.de/> (besucht am 21.09.2022).

Anhang

Zu Kapitel 3

Tabelle A1 fasst die Optimierungsvariablen der einzelnen Teilszenarien der Optimierung zusammen. Tabelle 3.4 stellt eine Übersicht über die Bedarfe und Preisannahmen der einzelnen Teilszenarien und Betriebsweisen zusammen.

Tabelle A1: Optimierungsvariablen der einzelnen Teilszenarien der Optimierung

Betriebsart	B1	B2	B3
O2	P_{EL}	P_{EL}	P_{EL}
	P_{PV}	P_{PV}	P_{PV}
	P_{Wind}	P_{Wind}	P_{Wind}
	x_{grid}	x_{grid}	x_{grid}
	V_{O_2}	V_{O_2}	V_{O_2}
	p_{init,O_2}	p_{init,O_2}	p_{init,O_2}
		$\dot{V}_{ASU,N}$	
H2	P_{EL}	P_{EL}	P_{EL}
	P_{PV}	P_{PV}	P_{PV}
	P_{Wind}	P_{Wind}	P_{Wind}
	x_{grid}	x_{grid}	x_{grid}
	V_{O_2}	V_{O_2}	V_{O_2}
	p_{init,O_2}	p_{init,O_2}	p_{init,O_2}
	V_{H_2}	$\dot{V}_{ASU,N}$	V_{H_2}
	p_{init,H_2}	V_{H_2}	p_{init,H_2}
	p_{init,H_2}		
EE	P_{EL}	P_{EL}	P_{EL}
	P_{PV}	P_{PV}	P_{PV}
	P_{Wind}	P_{Wind}	P_{Wind}
	x_{grid}	x_{grid}	x_{grid}
	V_{O_2}	V_{O_2}	V_{O_2}
	p_{init,O_2}	p_{init,O_2}	p_{init,O_2}
		$\dot{V}_{ASU,N}$	

Zu Kapitel 4

Tabelle A2 stellt einen Überblick über die erfassten Standorte, die resultierenden Sauerstoffpotenziale und spezifischen Kapazitäten sowie die zur Analyse verwendeten Datensätze nach Branchen und Verfahren bzw. Produkt dar.

Tabelle A2: Datengrundlage und resultierende Potenziale der GIS-Potenzialanalyse

Branche	Verfahren/Produkt	Standorte	O ₂ -Potenzial	Einheit	Spez. Kapazität	Einheit	Quellen
Stahlindustrie	Hochofenverfahren	7	2230	[Mio. Nm ³ /a]	15,59	[Mt/a]	[84]
	Sauerstoffblasverfahren	9	2548	[Mio. Nm ³ /a]	17,82	[Mt/a]	[84]
	Elektrolichtbogenverfahren	11	389	[Mio. Nm ³ /a]	6,83	[Mt/a]	[84]
Glasindustrie	Behälterglas	29	477	[Mio. Nm ³ /a]	2,15	[Mt/a]	[84, 86]
	Flachglas	10	388	[Mio. Nm ³ /a]	1,75	[Mt/a]	[84, 86]
	Spezialglas	16	65	[Mio. Nm ³ /a]	0,29	[Mt/a]	[84, 86]
Zementindustrie	Zement/Klinker	32	9962	[Mio. Nm ³ /a]	49,81	[Mt/a]	[84]
Papierindustrie	Altpapier	25	27	[Mio. Nm ³ /a]	2,41	[Mt/a]	[84]
	Chemischer Zellstoff	6	94	[Mio. Nm ³ /a]	8,58	[Mt/a]	[84]
	Grafikpapier	29	160	[Mio. Nm ³ /a]	14,55	[Mt/a]	[84]
	Karton	88	211	[Mio. Nm ³ /a]	19,15	[Mt/a]	[84]
	Papiertücher	14	39	[Mio. Nm ³ /a]	3,57	[Mt/a]	[84]
Kläranlagen	Belebtschlammverfahren	3802	9586	[Mio. Nm ³ /a]	147,48	[Mio. EW]	[87]
Krankenhäuser	Medizinischer Sauerstoff	1834	170	[Mio. Nm ³ /a]	485049	[Betten]	[88]