Die approbierte Originalversion dieser Dissertation ist an der Hauptbibliothek der Technischen Universität Wien aufgestellt (http://www.ub.tuwien.ac.at).

The approved original version of this thesis is available at the main library of the Vienna University of Technology (http://www.ub.tuwien.ac.at/englweb/).

DISSERTATION

Techno-ökonomische Analyse der regenerativen Produktion von Wasserstoff für den Einsatz in Fahrzeugen

ausgeführt zum Zwecke der Erlangung des akademischen Grades
einer Doktorin der technischen Wissenschaften

unter der Leitung von
a.o. Univ.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Anton Friedl

am Institut für Verfahrenstechnik,
Umwelttechnik und Technische Biowissenschaften, E166

eingereicht an der Technischen Universität Wien
Fakultät für Maschinenwesen und Betriebswissenschaften

von

Angela Miltner
Matr. Nr.: 9427447
Leopold-Ernst-Gasse 15/8
1170 Wien

Wien, Juli 2010

_____

Erst wenn die Mutigen klug und die Klugen mutig geworden sind,

wird das zu spüren sein, was irrtümlicherweise schon oft festgestellt wurde:

ein Fortschritt der Menscheit.

(Erich Kästner)

Für meine Familie.

Danksagung

Zu allererst möchte ich meinem Doktorvater A.o. Prof. DI Dr. Anton Friedl danken. Durch die Anstellung in seiner Arbeitsgruppe hat er mir nicht nur die Durchführung dieser Arbeit, sondern auch die Beschäftigung mit vielen anderen Themenbereichen ermöglicht.

Besonderer Dank gilt auch Univ.-Prof. DI Dr. Herman Hofbauer und DI Dr. Tobias Pröll. Sie haben es mir ermöglicht, die IPSEpro Bibliothek für die Biomassevergasung zu verwenden und meine Arbeit dadurch sehr unterstützt. Darüber hinaus ist mir Tobias Pröll jederzeit mit Rat und Hilfe zur Biomassevergasung zur Verfügung gestanden, wofür ich ihm auch herzlich danke.

Bei DI Dr. Walter Wukovits möchte ich mich ebenfalls besonders bedanken. Er hat mich nicht nur bei der Durchführung des Projektes „Nachhaltige Wasserstoffproduktion in Österreich" tatkräftig unterstützt, sondern auch darüber hinaus mit allen benötigten Informationen zum Thema gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation versorgt.

Bei den MitarbeiterInnen unseres Forschungsbereichs möchte ich mich für die angenehme Arbeitsatmosphäre während all der langen Jahre bedanken.

Ganz speziell möchte ich mich bei meinen Eltern bedanken. Ohne ihre Unterstützung und ihr Verständnis für meine Interessen wäre ich wahrscheinlich nie in der Technik gelandet und hätte wohl auch nie eine Dissertation geschrieben.

Meinem Mann Martin gebührt der größte Dank! Besonders dafür, dass er mich während meines gesamten Studiums unterstützt und mich dazu gebracht hat, eine Dissertation zu beginnen. Aber auch dafür, dass er sich geduldig all meine Probleme angehört hat, mir immer mit Rat und Tat zur Seite gestanden ist und mich in schwierigen Zeiten aufgebaut und zum Durchhalten ermuntert hat.

Kurzfassung

Der Straßenverkehr zählt mit zu den größten Verbrauchern an fossiler Energie weltweit. Aus diesem Grund gibt es international Bestrebungen, die Fahrzeuge auf einen Betrieb mit nachhaltigen Treibstoffen umzustellen. Neben elektrischem Strom aus erneuerbaren Quellen, Biodiesel, Bioethanol und Biogas ist auch Biowasserstoff ein möglicher alternativer Treibstoff. Derzeit ist jedoch zur regenerativen Erzeugung von Wasserstoff nur die alkalische Elektrolyse bei Betrieb mit Strom aus erneuerbaren Quellen kommerziell erhältlich. Für die Erzeugung von Wasserstoff aus Biomasse gibt es hingegen noch keine technisch voll ausgereifte Technologie. Ein Vergleich zwischen verschieden Produktionstechnologien für Biowasserstoff kann daher nicht auf der Grundlage von realen Anlagendaten erfolgen. Es besteht jedoch die Möglichkeit, mit Hilfe der Prozesssimulation eine Datenbasis zu schaffen, die für die Evaluierung verschiedener Technologien und Anlagenlayouts herangezogen werden kann.

In der vorliegenden Arbeit wurden verschiedene, für den Einsatz in Österreich technisch relevante, Wasserstoffproduktionstechnologien mit dem Prozesssimulationsprogramm IPSEpro evaluiert. Im ersten Schritt mussten dazu neue Modelle für die Simulation entwickelt werden, um alle benötigten Prozessschritte abbilden zu können. Im Anschluss wurden ausgewählte Technologien zur regenerativen Wasserstoffproduktion simuliert. Diese Technologien umfassen die alkalische Elektrolyse von Wasser, die Dampfreformierung von Biogas, die Dampfreformierung von Vergasergas, die gekoppelte Dunkel- und Photofermentation sowie die gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation. Alle berücksichtigten Technologien wurden in unterschiedlichen Anlagenlayouts und/oder mit verschiedenen Rohstoffen untersucht. Um einen Vergleich mit dem heutigen Stand der Technik der Wasserstoffproduktion aus fossilen Brennstoffen durchführen zu können, wurde die Dampfreformierung von Erdgas als Referenztechnologie mitbetrachtet. Jede Technologie wurde so ausgelegt, dass sie Wasserstoff in einer Qualität erzeugt, die die Nutzung in Fahrzeugen mit Wasserstoffbrennstoffzellen ermöglicht.

Auf Basis der durchgeführten Simulationsrechnungen wurde zunächst eine Analyse der Produktionseffizienz sowie der Energieeffizienz der Technologien und Anlagenvarianten durchgeführt. Zusätzlich wurden Gesamtprozessketten vom Rohstoff über die Wasserstoffproduktion und den Transport des Wasserstoffs bis hin zur Wasserstofftankstelle und der Nutzung in den Wasserstofffahrzeugen erstellt. Für diese Prozessketten wurde eine Wirtschaftlichkeitsanalyse durchgeführt. Die durchgeführten Analysen haben gezeigt, dass keine generelle Festlegung einer herausragenden Technologie zur nachhaltigen Erzeugung von Wasserstoff möglich ist, sondern dass jede untersuchte Variante gewisse Vor- und Nachteile aufweist, die es in einem konkreten Anwendungsfall abzuwägen gilt.

Abstract

Road traffic is among the major consumers of fossil energy worldwide. Therefore, international trends have been launched to shift the operation of vehicles to renewable fuels. Beside electrical power from renewable resources, biodiesel, bioethanol and biogas another possible alternative fuel is biohydrogen. However, at present the only commercially available technology for the renewable production of hydrogen is the alkaline electrolysis operated with electricity from renewable resources. On the other hand no technology for the production of biohydrogen from biomass is fully developed yet. Hence, it is not possible to base an evaluation of different biohydrogen production technologies on real plant data. But there is the possibility to create a data basis my means of process simulation and to use these data for the evaluation of different technologies and plant layouts.

Within the present work several technical relevant hydrogen production technologies applicable in Austria have been evaluated with the process simulation software IPSEpro. For this purpose new simulation models had to be developed at first to be able to represent all required process steps. Afterwards selected technologies for the regenerative production of hydrogen have been simulated. These technologies comprise the alkaline water electrolysis, the steam reforming of biogas, the steam reforming of gasification gas, the coupled dark and photo fermentation and the coupled dark and biogas fermentation. All considered technologies have been investigated with different plant layouts and/or different raw materials. Furthermore, the steam reforming of natural gas has been included in the evaluation as a reference technology to be able to compare the renewable technologies with the present state of the art technology for hydrogen production. Each technology has been designed to produce hydrogen in a quality that can be used in cars with hydrogen fuel cell drive.

The performed process simulation calculations have then been used to analyse the production efficiency and the energy efficiency of the investigated technologies and plant layouts. Furthermore, whole process chains have been created starting from the raw material via the hydrogen production, the transport of the hydrogen, the filling station and ending with the hydrogen utilization in the cars. These whole process chains have then been analysed economically. The performed analyses have pointed out that it is not possible to determine one outstanding technology for the sustainable production of hydrogen. Each of the investigated technology alternatives has some advantages and some disadvantages that would have to be weighed against each other for a specific application.

Liste der zugehörigen Publikationen

I. A. Miltner, A. Friedl, W. Wukovits, W. Schnitzhofer, W. Ahrer, K. Pollak; Evaluation of possible pathways for the sustainable production of hydrogen for the automotive sector; in 16th European Biomass Conference, Valencia, 2008.

II. A. Miltner, A. Friedl, W. Wukovits, W. Schnitzhofer, W. Ahrer, K. Pollak; Hydrogen for the automotive sector: Evaluation of performance and economy of possible production pathways for Austria; in PRES 2008, included in CD-ROM of Full Texts of CHISA 2008, Praha, 2008.

III. A. Miltner, A. Friedl, W. Wukovits; Evaluation of sustainable hydrogen production pathways; Chemical Engineering Transactions, 2009, 18, 339-334.

IV. A. Miltner, W. Wukovits, T. Pröll, A. Friedl; Renewable hydrogen production: A technical evaluation based on process simulation; Journal of Cleaner Production, 2010, doi: 10.1016/j.jclepro.2010.05.024.

Inhaltsverzeichnis

1 Einführung 1

1.1 Hintergrund 1

1.2 Ziel der Arbeit und Methodik 2

2 Grundlagen 4

2.1 Technologien zur Wasserstoffherstellung 4

2.1.1 Dampfreformierung und CO-Shift-Reaktor 4

2.1.1.1 Dampfreformierung 4

2.1.1.2 Wassergas-Shift-Reaktor (CO-Shift-Reaktor) 9

2.1.2 Alkalische Elektrolyse 9

2.1.3 Biogasfermentation 11

2.1.4 Biomassevergasung 13

2.1.5 Gekoppelte Dunkel- und Photofermentation 15

2.1.5.1 Dunkelfermentation 16

2.1.5.2 Photofermentation 17

2.1.5.3 Gekoppelte Dunkel- und Photofermentation 18

2.1.6 Gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation 19

2.1.7 Gasaufbereitungstechnologien 20

2.1.7.1 Biologische Entschwefelung 20

2.1.7.2 Adsorptive Entfernung von Chlor- und Schwefelsubstanzen inklusive Hydrierung 21

2.1.7.3 Absorptive Entfernung von Teer 23

2.1.7.4 Absorptive Entfernung von CO_2 24

2.1.7.5 Membrantechnik zur Entfernung von CO_2 26

2.1.7.6 Staubfilter 27

2.1.7.7 Druckwechseladsorption (PSA) 28

2.1.7.8 Methanierung 29

2.2 Prozesskette zur Nutzung des Wasserstoffs in Fahrzeugen 31

2.2.1 Speicherung 32
2.2.1.1 Stationäre Speicherung 32
2.2.1.2 Mobile Speicherung 33
2.2.2 Kompression 35
2.2.3 Transport 35
2.2.4 Tankstellen 36
2.2.5 Fahrzeuge 37
3 Modellentwicklung 40
3.1 Verwendete Software 40
3.2 Entwickelte *Connection*-Modelle 44
3.2.1 *Connection*-Modell für die Biogasfermentation (*bio_stream*) 44
3.2.2 *Connection*-Modell für die Dunkel- und Photofermentation bzw. die Dunkel- und Biogasfermentation (*substrate*) 45
3.3 Entwickelte *Global*-Modelle 46
3.3.1 *Global*-Modell für die Biogasfermentation (*biomass*) 46
3.3.2 *Global*-Modelle für die Dunkel- und Photofermentation (*substr_composition und substr_acid*) 47
3.4 Entwickelte *Unit*-Modelle 49
3.4.1 Dampfreformer 49
3.4.2 Wassergas-Shift-Reaktor 54
3.4.3 Alkalische Elektrolyse 55
3.4.4 Maische-Behälter 58
3.4.5 Biogasfermentation 59
3.4.6 Biomassevergasung 63
3.4.7 Hydrolyse 63
3.4.8 Dunkelfermenter 65
3.4.9 Photofermenter 67
3.4.10 Biogasfermentation von Säuren 70
3.4.11 Gasaufbereitungstechnologien 74
3.4.11.1 Biologische Entschwefelung 74
3.4.11.2 Adsorptive Entfernung von Chlor- und Schwefelsubstanzen 76
3.4.11.3 Absorptive Entfernung von CO_2 (nur *BG_Lib*) 78

3.4.11.4 Membrantechnik zur Entfernung von CO_2 80
3.4.11.5 Druckwechseladsorption (PSA) 82
3.4.11.6 Methanierung (nur *BG_Lib*) 84
3.4.12 Weitere modellierte Komponenten 87
3.4.12.1 Feststoffabtrennung 87
3.4.12.2 Wasserkondensator 88
3.4.12.3 Pumpe für den Substratstrom 90
3.4.12.4 Standardkomponenten für den Substratstrom 92
4 Verifizierung der entwickelten Modelle mittels Simulation von Referenzanlagen 93
4.1 Dampfreformierung von Erdgas 93
4.2 Alkalische Elektrolyse 96
4.3 Dampfreformierung von Biogas 97
4.4 Dampfreformierung von Vergasergas 100
4.5 Gekoppelte Dunkel- und Photofermentation 102
4.6 Gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation 105
5 Simulation der gewählten Anlagenvarianten 109
5.1 Dampfreformierung von Erdgas 109
5.2 Alkalische Elektrolyse 110
5.3 Dampfreformierung von Biogas 110
5.3.1 Direkte on-site Reformierung des Biogases 111
5.3.2 On-site Reformierung nach CO_2-Abtrennung aus dem Biogas 112
5.3.3 Zentrale Reformierung des Biogases nach Aufreinigung und Netzeinspeisung 114
5.4 Dampfreformierung von Vergasergas 116
5.4.1 Direkte on-site Reformierung 116
5.4.2 On-site Reformierung nach CO_2-Abtrennung 117
5.4.3 Zentrale Reformierung des Vergasergases nach Aufbereitung und Netzeinspeisung 118
5.5 Gekoppelte Dunkel- und Photofermentation 121
5.6 Gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation 122
5.6.1 Gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation mit Biogasnutzung im Gaskessel 123

5.6.2 Gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation mit Biogasnutzung im Gasmotor 124
5.6.3 Gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation mit Biogasnutzung in einer on-site Dampfreformierungsanlage 125
6 Gesamtprozessketten 128
6.1 Standardprozessketten 128
6.2 Varianten der Standardprozesskette 130
6.3 Wirtschaftlichkeitsberechnung 131
7 Ergebnisse und Diskussion 133
7.1 Effizienzbewertung der betrachteten Technologien 133
7.1.1 Produktionseffizienz der betrachteten Technologien 135
7.1.2 Energieeffizienz der betrachteten Technologien 140
7.2 Wirtschaftlichkeit der Gesamtprozessketten 149
8 Schlussfolgerungen und Ausblick 163
9 Nomenklatur 168
10 Literaturverzeichnis 170
11 Anhang 183
11.1 Verwendete *Connections* für die entwickelten Modelle innerhalb der *BG_Lib* 183
11.1.1 *Connection*-Modell *c_st_g_* 183
11.1.2 *Connection*-Modell *c_st_w_* 184
11.2 Verwendete *Globals* für die entwickelten Modelle innerhalb der *BG_Lib* 185
11.2.1 *Global*-Modell *g_cmp_gas_* 185
11.2.2 *Global*-Modell *g_cmp_org_* 186
11.2.3 *Global*-Modell *g_cmp_sol_* 187
11.3 Daten zum Kraftstoffverbrauch von Fahrzeugen 188
11.4 Kostendaten 189
11.4.1 Verwendete Investitionskosten 189
11.4.2 Verwendete Betriebskosten 191
11.4.3 Verwendete Erlöse 193
11.5 Eingabedaten für die Simulation der gewählten Anlagenvarianten 194
11.5.1 Dampfreformierung von Erdgas 194
11.5.2 Alkalische Elektrolyse 195

11.5.3 Dampfreformierung von Biogas 196
11.5.3.1 Maissilage als Rohstoff 196
11.5.3.2 Kartoffelschalen als Rohstoff 201
11.5.3.3 Grünschnitt als Rohstoff 206
11.5.3.4 Biotonnenabfälle als Rohstoff 211
11.5.4 Dampfreformierung von Vergasergas 216
11.5.5 Gekoppelte Dunkel- und Photofermentation 221
11.5.5.1 Maiskörner als Rohstoff 221
11.5.5.2 Kartoffelschalen als Rohstoff 223
11.5.6 Gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation 226
11.5.6.1 Nutzung des Biogases im Gaskessel 228
11.5.6.2 Nutzung des Biogases im Gasmotor 228
11.5.6.3 Nutzung des Biogases in der on-site Reformierungsanlage 228
12 Lebenslauf 231

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 2.1: Blockdiagramm einer Wasserstofftankstelle 37
Abbildung 3.1: Process Simulation Environment 41
Abbildung 3.2: Model Development Kit 42
Abbildung 3.3: Modell des allothermen Dampfreformers 49
Abbildung 3.4: Modell des Wassergas-Shift-Reaktors 54
Abbildung 3.5: Modell der alkalischen Elektrolyse 56
Abbildung 3.6: Modell des Maische-Behälters 58
Abbildung 3.7: Modell des Biogasfermenters 60
Abbildung 3.8: Modell der Hydrolyse 63
Abbildung 3.9: Modell des Dunkelfermenters 65
Abbildung 3.10: Modell des Photofermenters 68
Abbildung 3.11: Modell des Biogasfermenters für Säuren 71
Abbildung 3.12: Modell der biologischen Entschwefelung 74
Abbildung 3.13: Modell der adsorptiven Entfernung von Chlor- und Schwefelsubstanzen 76
Abbildung 3.14: Modell des MEA-Wäschers zur Entfernung von CO_2 78
Abbildung 3.15: Modell des Membranmoduls zur Entfernung von CO_2 81
Abbildung 3.16: Modell der Druckwechseladsorption 82
Abbildung 3.17: Modell des Methanierungsreaktors 85
Abbildung 3.18: Modell der Feststoffabtrennung 88
Abbildung 3.19: Modell des Wasserkondensators 89
Abbildung 3.20: Modell der Pumpe für den Substratstrom 90
Abbildung 4.1: Flowsheet der Referenzanlage für die Dampfreformierung von Erdgas 94
Abbildung 4.2: Flowsheet der Elektrolyse-Referenzanlagen 96
Abbildung 4.3: Flowsheet der Referenzanlage für die Biogasfermentation 98
Abbildung 4.4: Flowsheet der Referenzanlage für die Biomassevergasung 101
Abbildung 4.5: Flowsheet der Referenzanlage der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation 103

Abbildung 4.6: Flowsheet der Referenzanlage der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation 106
Abbildung 5.1: Flowsheet des gewählten Anlagenlayouts für die Dampfreformierung von Erdgas 110
Abbildung 5.2: Flowsheet der Biogasanlage mit direkter on-site Dampfreformierung 111
Abbildung 5.3: Flowsheet der Biogasanlage mit CO_2-Abtrennung und on-site Reformierung 113
Abbildung 5.4: Flowsheet der Biogasanlage mit Gasaufreinigung, Netzeinspeisung und zentraler Reformeranlage 115
Abbildung 5.5: Flowsheet der Vergaseranlage mit direkter on-site Reformierung 117
Abbildung 5.6: Flowsheet der Vergaseranlage mit CO_2-Abtrennung und on-site Reformierung 118
Abbildung 5.7: Flowsheet der Vergaseranlage mit Methanierung, Netzeinspeisung und zentraler Reformeranlage 119
Abbildung 5.8: Flowsheet der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation 121
Abbildung 5.9: Flowsheet der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation mit Biogasnutzung im Gaskessel 124
Abbildung 5.10: Flowsheet der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation mit Biogasnutzung im Gasmotor 125
Abbildung 5.11: Flowsheet der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation mit Biogasnutzung in einer on-site Dampfreformierungsanlage 126
Abbildung 6.1: Gesamtsystem für die Standardprozesskette von der Produktion bis zur Nutzung des Wasserstoffs im Fahrzeug 129
Abbildung 7.2: Wasserstoffproduktionseffizienz pro kg eingesetztem trockenem Rohmaterial der Technologien basierend auf Biogas und Vergasergas 136
Abbildung 7.3: Wasserstoffproduktionseffizienz pro kg eingesetztem trockenem Rohmaterial der Technologien basierend auf Dunkelfermentation 138
Abbildung 7.4: Energieeffizienz der Technologien basierend auf Biogas und Vergasergas 142
Abbildung 7.5: Energieeffizienz der Technologien basierend auf Dunkelfermentation 145
Abbildung 7.7: Gestehungskosten an der Tankstelle pro kWh für die Technologien basierend auf Biogas und Vergasergas 149
Abbildung 7.8: Gestehungskosten an der Tankstelle pro kWh für die Technologien basierend auf Dunkelfermentation 152

Tabellenverzeichnis

Tabelle 2.1: Technische Daten mobiler Speicher (Altmann et al., 2004) 34
Tabelle 2.2: Anforderungen an die Reinheit von Wasserstoff für Fahrzeuge (California Department of Food and Agriculture, 2008) 39
Tabelle 3.1: Aufbau der *Connection bio_stream* 45
Tabelle 3.2: Aufbau der *Connection substrate* 45
Tabelle 3.3: Aufbau des *Globals biomass* 46
Tabelle 3.4: Aufbau des *Globals substr_composition* 47
Tabelle 3.5: Aufbau des *Globals substr_acid* 48
Tabelle 3.6: Variablen für Prozessbedingungen im Modell des Dampfreformers 50
Tabelle 3.7: Variablen für die chemische Umsetzung im Modell des Dampfreformers 53
Tabelle 3.8: Variablen für das Modell des Wassergas-Shift-Reaktors 55
Tabelle 3.9: Variablen für das Modell der alkalischen Elektrolyse 57
Tabelle 3.10: Variablen für das Modell des Maische-Behälters 59
Tabelle 3.11: Variablen für das Modell des Biogasfermenters 61
Tabelle 3.12: Variablen für das Modell der Hydrolyse 64
Tabelle 3.13: Variablen für das Modell des Dunkelfermenters 66
Tabelle 3.14: Variablen für das Modell des Photofermenters 69
Tabelle 3.15: Variablen für das Modell der Biogasfermentation von Säure 73
Tabelle 3.16: Variablen für das Modell der biologischen Entschwefelung 75
Tabelle 3.17: Variablen für das Modell der adsorptiven Entfernung von Chlor- und Schwefelsubstanzen 77
Tabelle 3.18: Variablen für das Modell der absorptiven CO_2-Entfernung 79
Tabelle 3.19: Variablen für das Modell der CO_2 Abtrennung mittels Membrantechnik 81
Tabelle 3.20: Variablen für das Modell der Druckwechseladsorption (PSA) 83
Tabelle 3.21: Variablen für das Modell der Methanierung 84
Tabelle 3.22: Variablen für das Modell der Feststoffabtrennung 88
Tabelle 3.23: Variablen für das Modell des Wasserkondensators 89
Tabelle 3.24: Variablen für das Modell der Pumpe für den Substratstrom 91

Tabelle 4.1: Verwendete Anlagendaten für die Referenzanlage der Dampfreformierung von Erdgas 95

Tabelle 4.2: Zusammensetzung des eingesetzten Erdgases für die Referenzanlage der Dampfreformierung von Erdgas 95

Tabelle 4.3: Ergebnisse der Simulation und Literaturdaten der Referenzanlage zur Erdgas-Dampfreformierung (Neumann et al., 2003, Pulletz et al., 2003, Stoll et al., 2000) 95

Tabelle 4.4: Verwendete Anlagendaten für die Referenzanlagen der alkalischen Elektrolyse 96

Tabelle 4.5: Ergebnisse der Simulation und Literaturdaten der Referenzanlage Stuart 97

Tabelle 4.6: Ergebnisse der Simulation und Literaturdaten der Referenzanlage Norsk Hydro 97

Tabelle 4.7: Anlagenbeispiele zur Biogasreformierung (Nitzsche et al., 2007; Schmersahl et al., 2007; Friedl et al., 2008) 97

Tabelle 4.8: Verwendete Anlagendaten für die Referenzanlagen der Biogasfermentation ... 99

Tabelle 4.9: Verwendete Rohstoffzusammensetzung für die Referenzanlagen der Biogasfermentation 99

Tabelle 4.10: Ergebnisse der Simulation und Anlagendaten der Biogas-Referenzanlage (Prechtl et al., 2004; Institut für Energetik und Umwelt et al., 2006; Miltner, 2010) 100

Tabelle 4.11: Eigenschaften des gewählten Rohstoffs (Holzhackschnitzel) für die Referenzanlage der Vergasung von Biomasse (Hofbauer et al., 2006) 101

Tabelle 4.12: Verwendete Anlagendaten für die Referenzanlagen der Biomassevergasung 102

Tabelle 4.13: Ergebnisse der Simulation und Literaturdaten der Referenzanlage zur Biomassevergasung (Hofbauer, 2005b; Pröll et al., 2005b; Pröll et al., 2007a; Pröll et al., 2007b) 102

Tabelle 4.14: Zusammensetzung des Rohstoffs Kartoffelschalen für die Referenzanlagen der Dunkel- und Photofermentation (Antal et al., 2000; Claassen et al., 2004) .. 104

Tabelle 4.15: Verwendete Anlagendaten für die Referenzanlagen der Dunkel- und Photofermentation 104

Tabelle 4.16: Ergebnisse der Simulation und Literaturdaten der Referenzanlage für die Dunkel- und Photofermentation (Claassen et al., 2005) 105

Tabelle 4.17: Zusammensetzung des Rohstoffs Kartoffelschalen für die Referenzanlagen der Dunkel- und Biogasfermentation (Antal et al., 2000; Claassen et al., 2004) 107

Tabelle 4.18: Verwendete Anlagendaten für die Referenzanlagen der Dunkel- und Biogasfermentation 107

Tabelle 4.19: Ergebnisse der Simulation und Literaturdaten der Referenzanlage für die Dunkel- und Biogasfermentation (Zhu et al., 2008) 108
Tabelle 7.1: Anzahl an Biogasfermentationsanlagen und Biomassevergasungsanlagen pro zentraler Reformierungsanlage und insgesamt produzierte Wasserstoffmenge 135
Tabelle 11.1: Wichtigste Variablen und *Globals* der *Connection c_st_g_* 184
Tabelle 11.2: Wichtigste Variablen der *Connection c_st_w_* 185
Tabelle 11.3: Wichtigste Variablen des *Global*-Modells *g_cmp_gas _* 185
Tabelle 11.4: Wichtigste Variablen des *Global*-Modells *g_cmp_org _* 186
Tabelle 11.5: Wichtibste Variablen des *Global*-Modells *g_cmp_sol _* 187
Tabelle 11.6: Verwendete Investitionskosten 189
Tabelle 11.7: Verwendete Betriebskosten 191
Tabelle 11.8: Verwendete Erlöse 193
Tabelle 11.9: Eingabedaten für die Simulation der Dampfreformierung von Erdgas 194
Tabelle 11.10: Eingabedaten für die Simulation der kleinen Elektrolyseanlage 195
Tabelle 11.11: Eingabedaten für die Simulation der großen Elektrolyseanlage 195
Tabelle 11.12: Zusammensetzung des Rohstoffs Maissilage (D'Jesús et al., 2006; Thyo et al., 2007) 196
Tabelle 11.13: Eingabedaten für die Simulation der Biogasanlage mit Maissilage 196
Tabelle 11.14: Eingabedaten für die Simulation der on-site Reformierung von Biogas aus Maissilage 197
Tabelle 11.15: Eingabedaten für die Simulation der CO_2-Abtrennung und on-site Reformierung von Biogas aus Maissilage 198
Tabelle 11.16: Eingabedaten für die Simulation der zentralen Reformierung von Biogas aus Maissilage 199
Tabelle 11.17: Zusammensetzung des Rohstoffs Kartoffelschalen (Antal et al., 2000; Suksankraisorn et al., 2003; Claassen et al., 2004; Institut für Energetik und Umwelt et al., 2006) 201
Tabelle 11.18: Eingabedaten für die Simulation der Biogasanlage mit Kartoffelschalen ..201
Tabelle 11.19: Eingabedaten für die Simulation der on-site Reformierung von Biogas aus Kartoffelschalen 202
Tabelle 11.20: Eingabedaten für die Simulation der CO_2-Abtrennung und on-site Reformierung von Biogas aus Kartoffelschalen 203
Tabelle 11.21: Eingabedaten für die Simulation der zentralen Reformierung von Biogas aus Kartoffelschalen 204

Tabelle 11.22: Zusammensetzung des Rohstoffs Grünschnitt (Schmidt et al., 1993; Hartmann et al., 2000) 206

Tabelle 11.23: Eingabedaten für die Simulation der Biogasanlage mit Grünschnitt 206

Tabelle 11.24: Eingabedaten für die Simulation der on-site Reformierung von Biogas aus Grünschnitt 207

Tabelle 11.25: Eingabedaten für die Simulation der CO_2-Abtrennung und on-site Reformierung von Biogas aus Grünschnitt 208

Tabelle 11.26: Eingabedaten für die Simulation der zentralen Reformierung von Biogas aus Grünschnitt 209

Tabelle 11.27: Zusammensetzung des Rohstoffs Biotonnenabfälle (Reisinger, 1997; Institut für Energetik und Umwelt et al., 2006) 211

Tabelle 11.28: Eingabedaten für die Simulation der Biogasanlage mit Biotonnenabfällen 211

Tabelle 11.29: Eingabedaten für die Simulation der on-site Reformierung von Biogas aus Biotonnenabfällen 212

Tabelle 11.30: Eingabedaten für die Simulation der CO_2-Abtrennung und on-site Reformierung von Biogas aus Biotonnenabfällen 213

Tabelle 11.31: Eingabedaten für die Simulation der zentralen Reformierung von Biogas aus Biotonnenabfällen 214

Tabelle 11.32: Eingabedaten für die Simulation der Biomassevergsungsanlage 216

Tabelle 11.33: Eingabedaten für die Simulation der on-site Reformierung von Vergasergas 217

Tabelle 11.34: Eingabedaten für die Simulation der CO_2-Abtrennung und on-site Reformierung von Vergasergas 218

Tabelle 11.35: Eingabedaten für die Simulation der zentralen Reformierung von Vergasergas 219

Tabelle 11.36: Zusammensetzung des Rohstoffs Maiskorn (Schmidt et al., 1993 bzw. Annahmen) 221

Tabelle 11.37: Eingabedaten für die Simulation der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation von Maiskörnern für 80% Wirkungsgrad in Fermentern, 80% H_2-Recovery in PSA-Anlage 221

Tabelle 11.38: Geänderte Eingabedaten Simulation der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation von Maiskörner für 80% Wirkungsgrad in Fermentern, 95% H_2-Recovery in PSA-Anlage 222

Tabelle 11.39: Geänderte Eingabedaten Simulation der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation von Maiskörner für 100% Wirkungsgrad in Fermentern, 80% H_2-Recovery in der PSA-Anlage 223

Tabelle 11.40: Geänderte Eingabedaten Simulation der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation von Maiskörner für 100% Wirkungsgrad in Fermentern, 95% H_2-Recovery in der PSA-Anlage 223

Tabelle 11.41: Zusammensetzung des Rohstoffs Kartoffelschalen (Antal et al., 2000; Suksankraisorn et al., 2003; Claassen et al., 2004; Institut für Energetik und Umwelt et al., 2006) 223

Tabelle 11.42: Eingabedaten für die Simulation der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation von Kartoffelschalen für 80% Wirkungsgrad in Fermentern, 80% H_2-Recovery in der PSA-Anlage 224

Tabelle 11.43: Geänderte Eingabedaten Simulation der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation von Kartoffelschalen für 80% Wirkungsgrad in Fermentern, 95% H_2-Recovery in der PSA-Anlage 225

Tabelle 11.44: Geänderte Eingabedaten Simulation der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation von Kartoffelschalen für 100% Wirkungsgrad in Fermentern, 80% H_2-Recovery in der PSA-Anlage 225

Tabelle 11.45: Geänderte Eingabedaten Simulation der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation von Kartoffelschalen für 100% Wirkungsgrad in Fermentern, 95% H_2-Recovery in der PSA-Anlage 225

Tabelle 11.46: Eingabedaten für die Simulation der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation von Kartoffelschalen für 80/70% Wirkungsgrad in den Fermentern und 80% H_2-Recovery in der PSA-Anlage des Dunkelfermenters . 226

Tabelle 11.47: Geänderte Eingabedaten für die Simulation der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation von Kartoffelschalen für 80/70% Wirkungsgrad in den Fermentern und 95% H_2-Recovery in der PSA-Anlage des Dunkelfermenters . 227

Tabelle 11.48: Geänderte Eingabedaten für die Simulation der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation von Kartoffelschalen für 100/100% Wirkungsgrad in den Fermentern und 80% H_2-Recovery in der PSA-Anlage des Dunkelfermenters . 227

Tabelle 11.49: Geänderte Eingabedaten für die Simulation der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation von Kartoffelschalen für 100/100% Wirkungsgrad in den Fermentern und 95% H_2-Recovery in der PSA-Anlage des Dunkelfermenters . 228

Tabelle 11.50: Eingabedaten für die Nutzung des Biogases im Gaskessel 228

Tabelle 11.51: Eingabedaten für die Nutzung des Biogases im Gaskessel 228

Tabelle 11.52: Eingabedaten für die Nutzung des Biogases in der on-site Reformierungsanlage 228

Den Fortschritt verdanken wir den Nörglern.

Zufriedene Menschen wünschen keine Veränderung!

(Herbert George Wells)

1 Einführung

1.1 Hintergrund

Der weltweite Energiebedarf wird derzeit hauptsächlich durch die Nutzung von fossilen Energieträgern abgedeckt. Im Jahr 2004 wurden weltweit mehr als 9.000 Mtoe (Millionen Tonnen Öl Equivalent) an Kohle, Erdöl und Erdgas verbraucht. Davon wurden in der Europäischen Union (EU-27) über 1.800 Mtoe konsumiert. Nachdem die Eigenreserven an fossilen Rohstoffen innerhalb der EU für die Versorgung nicht ausreichen, mussten rund 50% des Bedarfs über Importe bereitgestellt werden. Alleine innerhalb Österreichs wurden im Jahr 2004 über 25 Mtoe an Primärenergie verbraucht. Um die Versorgung mit den benötigten Mengen an Öl und Gas gewährleisten zu können, mussten dafür rund 13 Mtoe an Öl und 8 Mtoe an Gas importiert werden (European Commission, 2007). Diese Zahlen zeigen nicht nur den enormen Bedarf an fossilen Energieträgern, der darüber hinaus weiter ansteigen wird, sondern vor allem auch die hohe Abhängigkeit der Energieversorgung von Importen, die zu einem großen Teil aus politisch instabilen Gebieten der Erde erfogen muss.

Der Transportsektor ist weltweit nach dem Stromerzeugungssektor der größte Verbraucher von fossilen Ressourcen und damit auch der zweitgrößte Emittent von CO_2-Emissionen weltweit, dicht gefolgt von der Industrie (European Commission, 2007). Aus diesem Grund wird angestrebt, die fossilen Treibstoffe durch erneuerbare Treibstoffe zu ersetzen. Innerhalb der EU wurde dieses Bestreben in Form der Biofuels Directive (European Commission, 2003a) festgeschrieben. Darin ist eine schrittweise Anhebung der erneuerbaren Treibstoffe bis zum Jahr 2005 sowie bis zum Jahr 2010 festgehalten. Österreich hat sich in dieser Direktive dazu verpflichtet, bis zum Jahr 2005 einen Biotreibstoffanteil von 2,5% zu erreichen, tatsächlich wurden jedoch nur 0,93% erreicht (European Commission, 2006). Laut Umweltbundesamt wurde das Substitutionsziel für das Jahr 2008 von 4,66% mit einem tatsächlichen Wert von 5,5% deutlich überschritten (Winter, 2009). Für das Jahr 2010 will Österreich einen Biotreibstoffanteil von 5,75% erreichen (European Commission, 2006).

Derzeit werden die fossilen Treibstoffe hauptsächlich durch Biodiesel und Bioethanol ersetzt. Aus Sicht der „European Technology Platform for Hydrogen and Fuel Cells (HFP)" haben Wasserstoff- und Brennstoffzellentechnologien jedoch das Potenzial dazu, in Zukunft neben dem elektrischen Strom ein weiterer Hauptenergieträger und die Hauptumwandlungstechnologie eines nachhaltigen Energiesystems zu werden. Aus diesem Grund wird für das Jahr 2020 für den Straßenverkehr ein Wasserstoffbedarf zwischen 58.000 t und 750.000 t H_2 vorhergesagt (European Hydrogen Fuel Cell Technology Platform, 2007). Für den Aufbau einer Wasserstoffgesellschaft wäre es notwendig, den Wasserstoff aus konventionellen Energiequellen herzustellen, da die alternativen Produktionstechnologien noch nicht in dem benötigten Ausmaß zur Verfügung stehen. Auf lange Sicht muss der Wasserstoff jedoch aus erneuerbaren Quellen erzeugt werden, um eine nachhaltige Energieversorgung gewährleisten zu können (European Commission, 2003b). Darüber hinaus bietet die nachhaltige Produktion von Wasserstoff auch die Chance, die Treibstoffproduktion möglichst unabhängig von Importen zu gestalten und damit die Wertschöpfung in der Region zu halten. Eine der großen Herausforderungen dabei ist aber, den Wasserstoff in den benötigten Mengen nachhaltig bereitstellen zu können und das zu einem Preis, der für alle leistbar ist.

1.2 Ziel der Arbeit und Methodik

Die vorliegende Arbeit hat zum Ziel, verschiedene Technologien zur nachhaltigen Produktion von Wasserstoff für den Einsatz in Fahrzeugen hinsichtlich ihrer Effizienz und Wirtschaftlichkeit zu beurteilen. Dazu werden zunächst auf Basis einer Literaturrechere die zu berücksichtigenden Technologien ausgewählt. Diese Technologien sollen allesamt in einer Größenordnung untersucht werden, die es ermöglicht, die Anlagen nachhaltig zu betreiben, ohne die Rohstoffe auszubeuten oder enorme Transportwege für den Rohstoff zu erfordern. Daher werden alle Technologien in einem dezentralen Konzept für die Anlagen zur Umwandlung der Rohstoffe betrachtet. Darüber hinaus wurde in der vorliegenden Arbeit davon ausgegangen, dass die ausgewählten Technologien in Österreich eingesetzt werden sollen. Damit scheiden beispielsweise Technologien aus, die auf solarthermischen Kraftwerken beruhen, da für solche Kraftwerke die geografischen Voraussetzungen in Österreich nicht gegeben sind.

Da keine der ausgewählten Technologien bereits so weit entwickelt ist, dass Betriebsergebnisse von existierenden Anlagen für die Evaluierung herangezogen werden können, werden die Analysen in dieser Arbeit auf der Basis von Prozesssimulationsrechnungen durchgeführt. Dazu wird das Prozesssimulationsprogramm IPSEpro eingesetzt, in dem

standardmäßig jedoch nur weinige der benötigten Prozesssimulationsmodelle für die Beschreibung der untersuchten Technologien vorhanden sind. Aus diesem Grund werden vor Beginn der Berechnungen die benötigten neuen Simulationsmodelle entwickelt und getestet. Anschließend werden die ausgewählten Technologien teilweise mit verschiedenen Anlagenverschaltungen und teilweise auch mit unterschiedlichen Rohstoffen simuliert. Dabei sind alle Technologien so ausgelegt, dass sie den Wasserstoff in einer Reinheit produzieren, die für den Einsatz in Fahrzeugen mit Wasserstoffbrennstoffzellen und Wasserstoff-verbrennungsmotoren geeignet ist. Aufbauend auf den Simulationsergebnissen werden die technischen Ergebnisse der Anlagen in Form der Produktionseffizienz sowie der Energieeffizienz beurteilt.

Zusätzlich zu dieser technischen Analyse wird auch eine wirtschaftliche Analyse der Technologien durchgeführt. Diese Wirtschaftlichkeitsbetrachtung erfolgt für Gesamtprozess-ketten, die alle Teilschritte vom Rohstoff über die Umwandlung zu Wasserstoff, dessen Aufreinigung auf die gewünschte Qualität und den Transport zu den Wasserstofftankstellen bis hin zur Nutzung in Wasserstofffahrzeugen umfassen. Anhand dieser Prozessketten wird unter Zuhilfenahme der Software IPSEpro-PSEconomy analysiert, wie hoch die Wasserstoffgestehungskosten an der Tankstelle für die einzelnen Wasserstofftechnologien sowie die unterschiedliche Nutzung in Brennstoffzellen- und Verbrennungskraftmaschinen-fahrzeugen ausfallen. Weiters werden Berechnungen durchgeführt, die eine Beurteilung der Änderung der Gestehungskosten durch den Austausch der Fahrzeuge mit heutigem Treibstoffverbrauch gegen Fahrzeuge mit dem erwarteten Verbrauch im Jahr 2050 ermöglichen.

2 Grundlagen

2.1 Technologien zur Wasserstoffherstellung

In diesem Kapitel werden verschiedene Technologien zur Wasserstoffherstellung beschrieben, die für den Einsatz in Österreich geeignet sind. Dabei werden sowohl Technologien zur direkten Produktion des Wasserstoffs, als auch Prozesse zur Erzeugung der Rohgase, die in weiterer Folge zu Wasserstoff umgesetzt werden, behandelt. Darüber hinaus werden Verfahrensschritte diskutiert, die zur Vorreinigung der Rohgase beziehungsweise zur Aufreinigung des wasserstoffreichen Gases benötigt werden.

2.1.1 Dampfreformierung und CO-Shift-Reaktor

Da die Dampfreformierung meist in Kombination mit einem Hochtemperatur-Shift-Reaktor bzw. in Kombination mit einem Hochtemperatur- und einem Niedertemperatur-Shift-Reaktor ausgeführt wird, werden diese beiden Technologien an dieser Stelle gemeinsam behandelt.

2.1.1.1 Dampfreformierung

Die Dampfreformierung von Erdgas wird weltweit großtechnisch vor allem für die Herstellung von Wasserstoff für die Düngerproduktion und für Hydro-Cracking-Prozesse in Raffinerien eingesetzt (Contadini et al., 2000; Ragwitz et al., 2003). Sie ist damit derzeit die am weitesten verbreitete Technologie zur Wasserstoffherstellung (Hemmes et al., 2003; Chen et al., 2007) und dient in der vorliegenden Arbeit als Referenzprozess für die regenerativen Wasserstoffherstellungstechnologien.

Bei der Dampfreformierung von Erdgas werden die im Ergas enthaltenen Kohlenwasserstoffe mit Dampf nach den folgenden endothermen Reaktionen zu Wasserstoff

umgesetzt (Xu et al., 1989; Contadini et al., 2000; Dreier et al., 2000; Hou et al., 2001; Neumann et al., 2003; Zanfir et al., 2003; OECD/IEA, 2005):

$$C_nH_m + nH_2O \leftrightarrow nCO + (n + \frac{m}{2})H_2 \qquad \text{F 2.1}$$

$$CH_4 + 2H_2O \leftrightarrow CO_2 + 4H_2 \qquad \text{F 2.2}$$

In Gegenwart von Kohlendioxid kommt es neben diesen Wasserdampfreaktionen auch zu trockenen Reformierungsreaktionen zwischen Methan und Kohlendioxid (Xu et al., 1989; Hou et al., 2001; Kolbitsch et al., 2008):

$$CH_4 + CO_2 \leftrightarrow 2CO + 2H_2 \qquad \text{F 2.3}$$

$$CH_4 + 3CO_2 \leftrightarrow 4CO + 2H_2O \qquad \text{F 2.4}$$

Neben den Reformierungsreaktionen (F 2.1 - F2.4) läuft im Reformierungsreaktor auch die Wassergas-Shift-Reaktion ab, in der ein Teil des entstandenen CO mit Wasserdampf zu CO_2 und Wasserstoff umgesetzt wird (Xu et al., 1989; Hou et al., 2001; Zanfir et al., 2003):

$$CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2 \qquad \text{F 2.5}$$

Alle weiteren möglichen Reaktionen im Dampfreformer, wie beispielsweise Reaktionen, die zur Kohlenstoffbildung führen (Armor, 1999; Hou et al., 2001), werden in der vorliegenden Arbeit nicht berücksichtigt. Alle angegebenen Reaktionen sind Gleichgewichtsreaktionen, wobei abhängig von der Verweilzeit der Gase im Reformer und der Reaktionskinetik der entsprechenden Reaktion der Gleichgewichtszustand meist nicht vollständig erreicht wird. Der Gleichgewichtszustand und damit die Gleichgewichtskonstante einer Reaktion kann über das Massenwirkungsgesetz (F 2.6) ermittelt werden. In dieser Gleichung repräsentiert z entweder die Aktivität a, die Konzentration c, den Stoffmengenanteil x oder den Partialdruck p.

$$K_{z,Reaktion} = \frac{\prod (z_{Produkte})^{\upsilon_{Produkt}}}{\prod (z_{Edukte})^{\upsilon_{Edukt}}} \qquad \text{F 2.6}$$

Die Gleichgewichtskonstanten für die obigen Reaktionen sind in den nachfolgenden Gleichungen F 2.7 bis F 2.14 angegeben. Die mathematischen Formulierungen für die Gleichgewichtskonstanten für die Reaktionen von C_2H_4, C_2H_6 und C_3H_8 nach

Reaktionsgleichung F 2.1 wurden selbst ermittelt. Dazu wurde aus den Gibbsschen freien Bildungsenthalpien (Lide, 2005/2006) zunächst die Änderung der Gibbsschen freien Enthalpien während der Reaktionen und daraus anschließend die Gleichgewichtskonstanten für verschiedene Temperaturen berechnet (Poling et al., 2001). Die erhaltenen Datenpunkte wurden schließlich durch mathematische Formulierungen angepasst.

$$K_{p,F2.1_CH4} = \exp\left(\frac{-26.830}{T} + 30{,}114\right) \quad [bar^2] \text{ (Zanfir et al., 2003)} \qquad F\ 2.7$$

$$K_{p,F2.1_C2H4} = \exp\left(\frac{-28.220{,}38}{T} + 44{,}385\right) \quad [bar^2] \qquad F\ 2.8$$

$$K_{p,F2.1_C2H6} = \exp\left(\frac{-45.389{,}06}{T} + 60{,}5721\right) \quad [bar^4] \qquad F\ 2.9$$

$$K_{p,F2.1_C3H8} = \exp\left(\frac{-64.441{,}491}{T} + 90{,}2997\right) \quad [bar^6] \qquad F\ 2.10$$

$$K_{p,F2.2} = \exp\left(\frac{-22.430}{T} + 26{,}078\right) \quad [bar^2] \text{ (Zanfir et al., 2003)} \qquad F\ 2.11$$

$$K_{p,F2.3} = 6{,}780 * 10^{18} * \exp\left(\frac{-31.230}{T}\right) \quad [(kPa)^2] \text{ (Hou et al., 2001)} \qquad F\ 2.12$$

$$K_{p,F2.4} = 2{,}17 * 10^{22} * \exp\left(\frac{-40.030}{T}\right) \quad [(kPa)^2] \text{ (Hou et al., 2001)} \qquad F\ 2.13$$

$$K_{p,F2.5} = \exp\left(\frac{4.400}{T} - 4{,}036\right) \quad [-] \text{ (Zanfir et al., 2003)} \qquad F\ 2.14$$

Die Zusammensetzung des Gasgemisches am Austritt des Reaktors ist stark von den Betriebszuständen abhängig. Um möglichst hohe Wasserstoffausbeuten und einen möglichst geringen Methanverlust zu erzielen, sind hohe Temperaturen und niedrige Drücke anzustreben (Contadini et al., 2000). Reale Anlagen werden bei Temperaturen zwischen 700 °C und 900 °C betrieben. Höhere Temperaturen würden Materialien erfordern, deren Kosten die Wasserstoffgewinne nicht mehr rechtfertigen. Der Betriebsdruck des Reformers liegt bei bis zu 30 bar. Dieser doch relative hohe Druck ergibt sich daraus, dass das eingesetzte Erdgas meist bei Drücken um 30 bar zur Verfügung steht. Darüber hinaus wird

die üblicherweise angeschlossene Druckwechsel-Adsorptionsanlage (PSA) zur Produktgasreinigung bei 20-25 bar betrieben. Damit wird bei einem Reformerdruck um die 30 bar kein zusätzlicher Verdichter vor der PSA-Anlage benötigt.

Eine weitere Einflussgröße auf die Wasserstoffausbeute sowie den Methanverlust stellt die Menge an eingebrachtem Wasserdampf dar. Dabei wird sowohl die Wasserstoffausbeute erhöht als auch der Methanverlust verringert, wenn höhere Mengen an Wasserdampf eingebracht werden. Der höhere Wasserdampfgehalt im Reformer bewirkt zusätzlich auch, dass die Bildung von Koks an der Katalysatoroberfläche und damit die Deaktivierung des Katalysators verringert wird. Höhere Mengen an Wasserdampf bedeuten allerdings auch ein größeres Gasvolumen bei gleichem Erdgasstrom und damit höhere Reaktorkosten, sowie einen erhöhten Brennstoffbedarf für die Erwärmung der zusätzlichen Wasserdampfmengen auf die Reaktionstemperatur. Üblicherweise wird im Dampfreformer daher ein Wasserdampf zu Kohlenstoffverhältnis von H_2O/C = 2,5-3,5 mol/mol eingestellt (Contadini et al., 2000; Hansen, 2005).

In der am häufigsten ausgeführten Bauweise wird das Dampf-Erdgas-Gemisch durch hochlegierte Stahlrohre geleitet, die mit Katalysatoren (üblicherweise auf Nickelbasis) gefüllt und im Inneren eines Feuerraumes angeordnet sind. Um die benötigte Reaktionswärme für die endothermen Reaktionen aufzubringen, wird ein Teil des Erdgases im Feuerraum verbrannt und damit das Gasgemisch in den Katalysatorrohren indirekt über die Rohrwände beheizt (Contadini et al., 2000; Neumann et al., 2003). Der für die Umsetzung verwendete Nickel-Katalysator wird durch Chlor- und Schwefelsubstanzen deaktiviert („vergiftet"), daher muss das eingesetzte Erdgas vor Eintritt in den Dampfreformer von diesen Substanzen befreit werden. Für diesen Reinigungsschritt können beispielsweise Adsorber eingesetzt werden, die in Kapitel 2.1.7.2 näher beschrieben sind.

Die Technologie der Dampfreformierung kann nicht nur mit Erdgas als Rohstoff, sondern auch mit anderen kohlenwasserstoffhältigen Gasen und flüssigen Rohstoffen wie beispielsweise Kerosin durchgeführt werden (Laosiripojana et al., 2006; Yu et al., 2006). Im Zuge der vorliegenden Arbeit wird die Dampfreformierung neben Erdgas auch auf Gase aus der Biogasfermentation sowie der Biomassevergasung angewendet. Der Hauptunterschied dieser Gase zum Erdgas besteht in der unterschiedlichen Gaszusammensetzung. Aufgrund des hohen Anteils an Kohlendioxid in den Gasen treten beispielsweise die beiden trockenen Reformierungsreaktionen F 2.3 und F 2.4 in wesentlich höherem Ausmaß auf als bei der Reformierung von Erdgas. Dabei ist anzumerken, dass bei den in dieser Arbeit gewählten Betriebszuständen für die Reformierung von Erdgas diese trockenen Reformierungsreaktionen de facto gar nicht ablaufen. Die Betriebszustände im Reformer können prinzipiell auch für

andere Gase im gleichen Bereich wie bei der Reformierung von Erdgas gewählt werden. Die konkrete Wahl der Parameter ergibt sich aus einer Kosten-Nutzen-Abwägung zwischen Investitions- und Betriebskosten sowie der erzielten Umsetzung. So könnte beispielsweise der Betriebsdruck im Reformer auf Umgebungsdruck abgesenkt werden, da das Rohgas üblicherweise bei Umgebungsdruck anfällt. Dadurch würde die Wasserstoffausbeute steigen, weil die Gleichgewichtsreaktionen bei niedrigerem Druck auf die Wasserstoffseite verschoben werden. Auf der anderen Seite wird bei niedrigerem Druck aufgrund des größeren Gasvolumens ein größerer Reaktor erforderlich, wodurch die Investitionskosten steigen. In der vorliegenden Arbeit wurden die Betriebsparameter entsprechend der Erdgasreformierung gewählt, da nur für diesen Anlagenbetrieb ausreichend Anlagendaten zur Verfügung standen.

Wie bereits eingangs angedeutet ist die Dampfreformierung von Erdgas für die Produktion von großen Mengen an Wasserstoff (Größenordnung 100.000 Nm^3/h H_2) kommerziell erhältlich und weltweit die gängigste Technologie zur Wasserstoffherstellung. Im kleinen Maßstab (bis 1.000 Nm^3/h) H_2 ist diese Technologie hingegen noch in der Entwicklung, wobei vor allem das Problem der optimalen Wärmeintegration noch gelöst werden muss (Hemmes et al., 2003). In beiden Fällen gibt es noch Entwicklungspotenzial in Hinblick auf die Wasserstoffaufbereitung, um die hohen Reinheitsanforderungen der Automobilindustrie zu erfüllen (Dresselhaus et al., 2004).

Neben der Dampfreformierung gibt es noch zwei weitere Technologien zur Erzeugung von Wasserstoff aus kohlenwasserstoffhältigen Rohstoffen: die partielle Oxidation und die autotherme Reformierung. Bei der partiellen Oxidation werden die Kohlenwasserstoffe mit Sauerstoff zu H_2 und CO sowie CO_2 umgesetzt (Armor, 1999; Choudhary et al., 2007; Corbo et al., 2007). Die autotherme Reformierung stellt im Wesentlichen eine Kombination der Dampfreformierung und der partiellen Oxidation dar. Dabei werden sowohl die Kohlenwasserstoffe als auch Dampf und Sauerstoff in den selben Reaktionsraum geleitet und zur Reaktion gebracht (Hoang et al., 2004; Hoang et al., 2006; Kaila et al., 2006; Murata et al., 2007; Halabi et al., 2008). Damit wird die für die Dampfreformierung benötigte Wärme direkt im Reaktionsraum durch Teilverbrennung des Rohstoffs bereitgestellt. In der vorliegenden Arbeit wurde jedoch die Dampfreformierung von Erdgas als Referenztechnologie gewählt, da sie derzeit die am weitesten verbreitete Technologie zur Wasserstoffherstellung darstellt (Hemmes et al., 2003; Chen et al., 2007). Darüber hinaus wird diese Technologie in Österreich ebenfalls großtechnisch zur Wasserstofferzeugung in der Raffinerie in Schwechat eingesetzt (Pulletz et al., 2003), die auch als Referenzanlage für diese Technologie gewählt wurde.

Weitere Optionen für die Reformierung von Wasserstoff aus regenerativen Quellen sind beispielsweise Bio-Methanol, Bio-Ethanol oder Bio-Öle. Die meisten dieser Verfahren basieren auf dem Prinzip der Dampfreformierung von Flüssigkeiten. Da die Herstellung dieser Ausgangsstoffe jedoch derzeit ebenso noch Thema intensiver Forschungen ist, wie die Verwirklichung der anschließenden Reformierungstechnologie, wurde auf diese Technologien in der vorliegenden Arbeit nicht eingegangen.

2.1.1.2 Wassergas-Shift-Reaktor (CO-Shift-Reaktor)

Das Produktgas aus der Dampfreformierung weist noch Kohlenmonoxidgehalte bis zu 20 vol% (trocken) auf. Um die Wasserstoffausbeute zu erhöhen kann dieser CO-Anteil in einem oder mehreren Reaktoren mit Dampf entsprechend der exothermen Wassergas-Shift-Reaktion (F 2.5) umgesetzt werden. Das Gleichgewicht der Shift-Reaktion liegt bei niedrigeren Temperaturen auf der Seite des Wasserstoffs, allerdings läuft die Reaktion bei höheren Temperaturen schneller ab. Aus diesem Grund wird die Reaktion häufig in zwei getrennten Reaktoren durchgeführt, wobei der erste bei hohen Temperaturen betrieben wird, um schnell den Großteil des CO umzusetzen. Anschließend wird das Gas in einen Niedertemperatur-Reaktor geleitet, in dem es bei niedrigen Temperaturen durch die günstigere Gleichgewichtslage zur weiteren Umsetzung von CO zu Wasserstoff und CO_2 kommt (Giunta et al., 2006; Dalle Nogare et al., 2007).

Der Hochtemperatur-Shift-Reaktor (HTS) wird bei Temperaturen um die 300-500 °C betrieben und ist meist mit einem Katalysator auf Fe-Basis gefüllt. Der Niedertemperatur-Shift-Reaktor (LTS) weist hingegen eine Temperatur zwischen 180-300 °C auf und verwendet einen Katalysator auf Kupferbasis (Contadini et al., 2000; Pasel et al., 2005; Giunta et al., 2006; Dalle Nogare et al., 2007). Da die Shift-Reaktion wie bereits erwähnt exotherm abläuft, muss das Gas zwischen den beiden Shift-Reaktoren abgekühlt werden.

In der vorliegenden Arbeit wird aufgrund der Konfiguration der gewählten Referenz-Reformierungsanlage in der Raffinerie Schwechat nur ein HTS-Reaktor berücksichtigt, wie in Kapitel 4.1 näher ausgeführt wird.

2.1.2 Alkalische Elektrolyse

Die Spaltung von Wasser in Wasserstoff und Sauerstoff mittels Elektrolyse ist ein weit verbreitetes und kommerziell verfügbares Verfahren, wobei die alkalische Elektrolyse derzeit die gängigste Technologie darstellt. Sie besteht aus einer Wasseraufbereitung, in der das Wasser entsalzt und deionisiert wird, einem Spannungsgleichrichter und Spannungsanpasser,

dem Elektrolyse-Zellblock, einer Elektrolytrückführung und -aufbereitung sowie einer eventuellen Gasaufbereitung. Der Zellblock ist aus einer Serie von unipolar oder bipolar geschalten Zellen aufgebaut und die eingesetzten Elektroden werden üblicherweise aus nickelhaltigen Werkstoffen hergestellt. Als Elektrolyt wird meist Kalilauge (KOH) eingesetzt, da deren elektrische Leitfähigkeit sehr hoch ist und somit hohe Wirkungsgrade erzielt werden können. (Dreier et al., 2000; Ivy, 2004; Solmaz et al., 2007).

Durch das Anlegen einer elektrischen Spannung zwischen den beiden Elektroden kommt es zum Ablauf der folgenden Reaktionen (Ivy, 2004; Solmaz et al., 2007):

Kathode: $4H_2O + 4e^- \rightarrow 4OH^- + 2H_2$ F 2.15

Anode: $4OH^- \rightarrow O_2 + 2H_2O + 4e^-$ F 2.16

Die beiden Gasströme werden getrennt voneinander abgeleitet, sie sind jedoch nicht völlig rein, da auch ein gewisser Anteil an Sauerstoff an der Kathode und Wasserstoff an der Anode entsteht. Darüber hinaus sind die Gase wasserdampfgesättigt, was zu einer weiteren Verunreinigung führt. Die meisten kommerziellen Elektrolyse-Systeme haben bereits eine integrierte Gasaufreinigung, die zumindest eine Abscheidung des Wasseranteils beinhaltet. Somit können je nach Elektrolysesystem Reinheiten des Wasserstoffstroms von 99,9 bis 99,9998 vol% erreicht werden (Ivy, 2004). Der Druck, bei dem die Elektrolyse durchgeführt wird, variiert zwischen Atmosphärendruck und ca. 35 bar, wobei der atmosphärische Betrieb am weitesten verbreitet ist. In der vorliegenden Arbeit werden allerdings Elektrolyseprozesse betrachtet, die bei höherem Druck (im Bereich von 25-33 bar) arbeiten, um den Aufwand für die Wasserstoffkompression für den Transport und die gasförmige Speicherung zu verringern.

Die alkalische Elektrolyse ist Stand der Technik und wird im kleinen Bereich bis 500 Nm^3/h eingesetzt. Aufgrund des hohen Bedarfs an elektrischer Energie zur Herstellung des Wasserstoffs (4-5 kWh/Nm^3 H_2) wird diese Technologie jedoch hauptsächlich im Bereich bis 50 Nm^3/h eingesetzt (Neumann et al., 2003; Altmann et al., 2004; Ivy, 2004). Das Entwicklungspotenzial liegt hauptsächlich darin, die Elektrolyse bei höherem Druck durchzuführen, sowie in der Entwicklung von Prozessen, die mit schwankender Energiemenge arbeiten können, um die direkte Anbindung an regenerative Stromerzeuger wie Windkraftanlagen zu ermöglichen. Darüber hinaus werden Anstrengungen unternommen, den Wirkungsgrad über neue Elektrodenwerkstoffe zu erhöhen (Altmann et al., 2004; Marceta Kaninski et al., 2006; Wei et al., 2007).

Neben der alkalischen Elektrolyse gibt es auch noch die kommerziell verbreiteten Technologien der Membranelektrolyse, bei der protonenleitende Membranen als Elektrolyt eingesetzt werden (Badwal et al., 2006; Grigoriev et al., 2006; Marshall et al., 2007) sowie die Hochtemperatur-Wasserdampfelektrolyse, bei der meist Keramikmembranen zur Sauerstoffionenleitung eingesetzt werden (Mansilla et al., 2007; Shin et al., 2007). Letztere wird oft in Verbindung mit Geothermie, Hochtemperatur-Kernreaktoren sowie solarthermischen Kraftwerken eingesetzt, die zur Erzeugung des Wasserdampfes herangezogen werden (Mansilla et al., 2007; Miri et al., 2007; Shin et al., 2007). Darüber hinaus gibt es noch weitere Technologien, die sich überwiegend noch im Entwicklungsstadium befinden. Dazu zählen die Wasserelektrolyse mit ionischen Flüssigkeiten als Elektrolyt, die Plasmaelektrolyse und die Elektrolyse von alkoholischen Lösungen(Chaffin et al., 2006; de Souza et al., 2007; Take et al., 2007). Im vorliegenden Projekt wurde jedoch aufgrund der breiten Anwendung sowie der fehlenden geografischen Voraussetzungen für die sehr vielversprechende Koppelung der Hochtemperaturelektrolyse mit solarthermischen Kraftwerken nur die alkalische Elektrolyse betrachtet.

2.1.3 Biogasfermentation

Die Biogaserzeugung ist eine weit verbreitete Technologie, bei der biogene Rohstoffe mittels anaerober Fermentation, d.h. mit Hilfe von Mikroorganismen und unter Ausschluss von Sauerstoff, abgebaut werden. Bei diesem Prozess entsteht ein Gas, das zum größten Teil aus Methan und Kohlendioxid besteht. Das produzierte Biogas enthält aber immer auch Wasserdampf und Spuren von H_2S. Darüber hinaus können auch noch weitere Substanzen wie NH_3 oder Siloxane enthalten sein. Für die Herstellung des Biogases kommen unterschiedliche Verfahrensvarianten in Frage. So kann die Fermentation ein- oder mehrstufig durchgeführt werden und es können verschiedene Mikroorganismen zum Einsatz kommen, die auf unterschiedlichen Temperaturniveaus die maximale Ausbeute liefern. In der vorliegenden Arbeit wurde aufgrund der weiten Verbreitung ein einstufiges Verfahren mit mesophilen Mikroorganismen gewählt (Gronauer et al., 2004; Institut für Energetik und Umwelt et al., 2006).

Bei diesem Verfahren wird das Substrat in einem ersten Schritt, der so genannten Anmaischung mit Flüssigkeit vermischt, um es pumpfähig zu machen. Als Flüssigkeiten kommen dabei Wasser und Biogasgülle zum Einsatz. Durch die Verwendung eines Teiles der bereits fermentierten Biogasgülle für diese Anmaischung ergeben sich die Vorteile, dass die Menge an benötigtem Wasser reduziert werden kann und das Substrat bereits in diesem Verfahrensschritt mit den Bakterien für die Fermentation geimpft wird. Je nach Substrat kann

laut den gesetzlichen Vorschriften auch ein Hygienisierungsschritt vor der Anmaischung erforderlich sein. Das vorbehandelte Substrat wird anschließend in den Fermenter gepumpt, wo die mikrobielle Umwandlung zu Biogas bei 30-42 °C stattfindet. Da im Fermenter nicht alles Substrat umgesetzt wird, sollte möglichst ein Nachgärbehälter nachgeschaltet werden, um die Gasausbeute zu erhöhen. Der Biogasanteil aus dieser Nachgärung kann bis zu 20% der produzierten Gesamtmenge an Biogas betragen. Gleichzeitig fungiert der Nachgärbehälter auch als Gaslager und Lager für das vergorene Substrat, da in unseren Breiten die Ausbringung der Biogasgülle auf die Felder im Winter verboten ist. Das entstandene Biogas wird anschließend in einer biologischen Entschwefelung (siehe Kapitel 2.1.7.1) bis unter 50 ppm H_2S entschwefelt (Gronauer et al., 2004; Institut für Energetik und Umwelt et al., 2006). Das so erzeugte Biogas kann neben der üblichen Verwertung in Blockheizkraftwerken unter anderem auch zur Herstellung von flüssigen Treibstoffen mittels Fischer-Tropsch-Synthese (Claußen, 2003; Hofbauer et al., 2006), zur Herstellung von synthetischem Erdgas (Miltner et al., 2008b; Miltner et al., 2008a) oder auch als Einsatzgas für eine Dampfreformierungsanlage zur Herstellung von Wasserstoff verwendet werden. Die Reformierung von Biogas zu Wasserstoff wird in der vorliegenden Arbeit untersucht und wurde bereits in Kapitel 2.1.1 behandelt.

Die Reaktionen, die im Fermenter und im Nachgärbehälter bei der Umwandlung des Substrates in Biogas ablaufen, sind sehr komplex und formelmäßig nur bedingt beschreibbar. Eine Methode der Beschreibung wurde von Buswell (Buswell et al., 1952) vorgeschlagen und wird durch den folgenden Formelzusammenhang dargestellt:

$$C_nH_aO_b + \left(n - \frac{a}{4} - \frac{b}{2}\right)H_2O \rightarrow \left(\frac{n}{2} - \frac{a}{8} + \frac{b}{4}\right)CO_2 + \left(\frac{n}{2} + \frac{a}{8} - \frac{b}{4}\right)CH_4 \qquad \text{F 2.17}$$

Durch diesen Zusammenhang wird die maximal mögliche Ausbeute an CO_2 und CH_4 aus einem vorgegebenen Rohstoff beschrieben. Andere Gase, die bei der Fermentation ebenfalls entstehen können, wie H_2S oder NH_3, werden damit nicht berücksichtigt. In der Realität laufen die Reaktionen der Mikroorganismen jedoch nicht immer nach diesem Formelzusammenhang ab, daher kommt es in vielen Fällen zur Produktion eines von Formel F 2.17 abweichenden Verhältnisses von CO_2 und CH_4 im Biogas. Das liegt hauptsächlich daran, dass ein Rohstoff nicht aus einem einheitlichen Gemisch der Zusammensetzung $C_nH_aO_b$, sondern aus einer Mischung unterschiedlichster Substanzen wie Zucker, Stärke, Kohlenhydraten, Fetten oder Proteinen besteht. Diese Substanzen werden von den Mikroorganismen auf unterschiedlichen Reaktionswegen zu Biogas umgesetzt, wodurch sich der erwähnte Unterschied zur Buswell-Gleichung ergibt. Die Buswell-Gleichung dient jedoch

zur einfachen Ermittlung der Maximalwerte für CO_2 und CH_4 und stellt somit ein nützliches Instrument für Berechnungen der möglichen Biogaszusammensetzung dar.

2.1.4 Biomassevergasung

Ziel der Vergasung von Biomasse ist es, die in der Biomasse enthaltenen Anteile an Wasserstoff, Kohlenstoff und Sauerstoff in ein Gasgemisch aus brennbaren Gasen umzusetzen. Diese Umsetzung läuft endotherm ab, daher muss dem System Wärme zugeführt werden, um die gewünschten Reaktionen ablaufen zu lassen. Diese benötigte Energie kann entweder direkt durch Verbrennung eines Teils des eingebrachten Brennstoffs im Reaktor (autotherme Verfahren) oder durch indirekte Wärmezufuhr über Wärmetauscher bzw. umlaufende Wärmeträgermaterialen bereitgestellt werden (allotherme Verfahren).

Im der vorliegenden Arbeit wurde aus der Vielzahl der möglichen Vergasungsverfahren die Dampf-Vergasung nach dem FICFB-Prinzip (Fast Internal Circulating Fluidised Bed Vergasungsprozess) als Umwandlungstechnologie ausgewählt. Bei diesem von der TU Wien entwickelten Vergasungsprozess finden die Vergasungs- und die Verbrennungsreaktionen zur Wärmegewinnung gleichzeitig in zwei getrennten Wirbelschichten statt, die jedoch miteinander gekoppelt sind. Die Vergasung erfolgt in einer stationären Wirbelschicht mit Dampf als Fluidisierungs- und Oxidationsmittel bei Temperaturen um 850 °C. Dabei entsteht ein Gas, das 30-40% H_2, 20-30% CO und 8-12% CH_4 (Angaben in vol% trockenes Gas) enthält. Neben diesen gasförmigen Komponenten sind im Produktgas Staub (10-20 g/Nm^3), Teer (0,5-1,5 g/Nm^3), Ammoniak (500-1.000 ppm) und H_2S (20-50 ppm) enthalten (Hofbauer et al., 2002; Wolf, 2002; Rauch et al., 2004; Hofbauer, 2005a). Das nach der Vergasung verbleibende Gemisch aus Koks und Bettmaterial gelangt in eine zirkulierende Wirbelschicht, in der der Koks mit Luft verbrannt wird. Durch die bei der Verbrennung freiwerdende Energie wird das Bettmaterial erwärmt. Das heiße Bettmaterial gelangt nach der Abtrennung aus dem Gasstrom in einem Zyklon zurück in die stationäre Vergaser-Wirbelschicht, womit der Wärmekreislauf geschlossen wird. Durch die Trennung in zwei Reaktoren ergeben sich zwei getrennte Gasströme für das Produkt- und das Rauchgas und somit ein nahezu stickstofffreies Produktgas. Partikelförmige Bestandteile des Produktgases, wie Asche oder Abrieb des Bettmaterials, werden in einem Schlauchfilter abgetrennt und anschließend Teer sowie Ammoniak und andere wasserlösliche Gase in einem Wäscher mit Rapsmethylester als Waschlösung entfernt (Hofbauer et al., 2002; Pröll et al., 2005b; Pröll et al., 2007a).

Das gereinigte Vergasergas kann entweder zur Energieerzeugung, beispielsweise durch Verwertung in Blockheizkraftwerken ähnlich wie beim Biogas, zur Erzeugung von

flüssigen Treibstoffen mittels Fischer-Tropsch-Synthese (Hofbauer et al., 2006; Ripfel-Nitsche et al., 2007), zur Herstellung von synthetischem Erdgas (Seemann et al., 2005; Hofbauer et al., 2006), aber auch zur Erzeugung von Wasserstoff herangezogen werden. In der vorliegenden Arbeit wird das Vergasergas in einem Dampfreformer zu Wasserstoff umgesetzt. In Kapitel 2.1.1 wurden bereits die Unterschiede der Reformierung zwischen Vergasergas und Erdgas ausgeführt. Aufgrund des verbleibenden Teergehaltes des gereinigten Vergasergases würde darüber hinaus ein hohes Risiko der Verkokung bei den handelsüblichen Reformer-Katalysatoren bestehen. Daher ist entweder eine weitere Abtrennung des Teers, beispielsweise in einem weiteren Teerwäscher, oder die Auswahl eines geeigneten Reformierungsverfahrens erforderlich, das dieses Risiko minimiert. Im Zuge dieser Arbeit wurde die Variante der Teerabtrennung mit einem zusätzlichen Teerwäscher gewählt. Eine weitere Möglichkeit den Teergehalt im Vergasergas zu senken, stellt die Zugabe von Katalysatoren dar. Dabei kann beispielsweise ein Nickel-Katalysator zum Bettmaterial zugemischt werden, wodurch auch eine Erhöhung des Wasserstoffgehalts im Vergasergas erreicht werden kann (Pfeifer et al., 2004). Da sich diese Technologie jedoch erst im Versuchsstadium befindet, wurde sie in der vorliegenden Arbeit nicht untersucht.

Neben dem hier verwendeten Verfahren der Dampf-Vergasung gibt es, wie erwähnt, noch weitere Vergasungsverfahren. Ein Verfahren, das derzeit beispielsweise ebenfalls mit dem FICFB Vergasungskonzept durchgeführt wird, ist der AER-Prozess (Marquard-Möllenstedt et al., 2004; Hofbauer, 2005b; Pfeifer et al., 2007). In diesem Prozess wird der oben beschriebene Prozess der Dampfvergasung unter Anwesenheit eines Adsorptionsmittels bei 600-700 °C durchgeführt. Dazu wird mit dem Bettmaterial auch ein Adsorptionsmittel in den Vergaser eingebracht, an den das entstandene CO_2 adsorbiert und somit aus dem Vergasergas entfernt wird. Dieser Adsorptionsvorgang gibt dem Verfahren auch seinen Namen (Adsorption Enhanced Reforming - AER). Im Verbrennungsteil der Vergaseranlage wird das adsorbierte CO_2 durch Erwärmung auf 800-900 °C wieder freigesetzt und das Adsorptionsmaterial dadurch regeneriert. Als Adsorptionsmittel können dabei beispielsweise Calcite oder Dolomite eingesetzt werden.

Unter den diversen Vergasungsverfahren sollen hier noch weitere Vergasungsverfahren genannt werden, die im Gegensatz zu den beiden obigen Verfahren auf vollkommen anderen Prinzipien beruhen: das Carbo-V®-Verfahren sowie die Biomassevergasung mit überkritischem Wasser. Das Carbo-V®-Verfahren ist ein dreistufiges, autothermes Vergasungsverfahren (Wolf, 2002; Blades et al., 2005; Rudloff, 2005). Dabei wird zunächst in einem Niedertemperaturvergaser bei 400-500 °C unter O_2/CO_2-Atmosphäre und Einsatz von Dampf ein teerhaltiges Schwelgas erzeugt, das anschließend im Carbo-V®-Vergaser bei hohen Temperaturen (>1.400 °C) partiell oxidiert wird. Die hohen

Temperaturen führen dazu, dass auch die Teere gespalten werden, wodurch ein nahezu teerfreies Gas entsteht. Der Schwelkoks aus dem Niedertemperaturvergaser wird am Ende des Carbo-V®-Vergasers eingeblasen, wodurch es zu einer endothermen Reaktion zwischen dem Koks und dem Gas kommt, die das Gas stark abgekühlt (auf ca. 900 °C). Zuletzt werden in einem Staubabscheider die Asche und in einem Wäscher CO_2 und andere wasserlösliche Gase entfernt.

Die Biomassevergasung mit überkritischem Wasser ist, im Unterschied zu den bisher genannten Verfahren, für die Umsetzung nasser Biomasse ausgelegt. Die Biomasse wird zuerst zerkleinert und anschließend die gewünschte Konzentration des wässrigen Gemisches durch Wasserzugabe eingestellt. Danach wird die Lösung mit einer Hochdruckpumpe auf 200-500 bar gebracht und im Reaktor bei 600-750°C (überkritischer Zustand des Wassers) vergast. Das Produktgas wird anschließend gekühlt und das Wasser aus dem Gas abgetrennt (Boukis et al., 2004; Demirbas, 2004).

Aus den angeführten Verfahren wurde die Dampf-Vergasung nach dem FICFB-Prinzip gewählt, da es bereits sehr weit entwickelt ist und darüber hinaus auf eine große Basis an verfügbaren Betriebsdaten zurückgegriffen werden kann.

2.1.5 Gekoppelte Dunkel- und Photofermentation

Die Dunkel- sowie die Photofermentation stellen Technologien dar, die es ermöglichen, wasserstoffreiche Gase auf biochemischem Weg direkt aus der Biomasse zu gewinnen. Allerdings muss diese Biomasse vor der eigentlichen Fermentation in einem Hydrolyseschritt in verwertbaren Zucker umgewandelt werden. Bei der Hydrolyse wird die Biomasse mit Wasser und Enzymen (beispielsweise Amylasen) versetzt und auf bestimmten pH-Werten und Temperaturen gehalten, um eine optimale Umsetzung der Biomasse zu Zucker zu erreichen. Die Wahl der Enzyme, pH-Werte und Temperaturen hängt dabei von der Art der Biomasse ab (Claassen et al., 2002; de Vrije et al., 2002; Claassen et al., 2004; Chen et al., 2008b). Im Anschluss an die Hydrolyse werden die verbliebenen Feststoffe aus dem Strom abgetrennt. In dem feststofffreien Flüssigkeitsstrom befinden sich neben dem Zucker auch andere wasserlösliche Substanzen der Biomasse, wie Proteine, organische Säuren oder Fette. Dieser vorbehandelte Biomassestrom, der wie gesagt zu einem großen Anteil aus Zucker besteht, kann anschließend in einer Dunkelfermentation umgesetzt werden.

2.1.5.1 Dunkelfermentation

Bei der Dunkelfermentation (auch thermophile Fermentation genannt) handelt es sich um eine anaerobe Fermentation, die unter Ausschluss von Licht stattfindet. Dabei bauen Bakterien unter Anwesenheit von Wasser den vorhandenen Zucker ab um Energie zu gewinnen und produzieren dabei Säuren, Alkohole, CO_2 und Wasserstoff (Ren et al., 2006). Ähnlich wie bei der Biogasfermentation gibt es auch hier unterschiedliche Bakterienstämme, die jeweils bei unterschiedlichen Bedingungen die optimale Umsetzung von Zucker in Wasserstoff aufweisen. Dabei wird zwischen mesophilen (25-40 °C), thermophilen (40-65 °C), extrem thermophilen (65-80 °C) und hyperthermophilen (>80 °C) Bakterien unterschieden, die bei den jeweils angegebenen Temperaturen die optimale Umsetzung aufweisen (Levin et al., 2004). Beispiele für extrem thermophile Bakterien, die in der vorliegenden Arbeit betrachtet werden, sind Caldicellulosiruptor saccharolyticus und Thermotoga elfii. Weitere Bakterienstämme, die bei der Dunkelfermentation eingesetzt werden, können der Literatur entnommen werden (Levin et al., 2004; Kapdan et al., 2006).

Die Umsetzung des Zuckers kann auf unterschiedlichen Wegen verlaufen, wobei als Endprodukte unterschiedliche Mengen an Wasserstoff sowie Kohlendioxid und verschiedene Arten an Säuren entstehen. Daneben kann es auch zur Bildung von Methan, Kohlenmonoxid oder Schwefelwasserstoff kommen (Levin et al., 2004), die jedoch unerwünscht sind und durch die Reaktionsführung weitgehend vermieden werden. Die höchste Wasserstoffausbeute wird erzielt, wenn der Zucker in Form von Glukose nach folgender Reaktion zu Essigsäure umgesetzt wird:

$$C_6H_{12}O_6 + 2H_2O \rightarrow 2CH_3COOH + 4H_2 + 2CO_2 \qquad \text{F 2.18}$$

Üblicherweise gelingt es jedoch nicht, die Reaktionsbedingungen so einzustellen, dass nur diese Reaktion abläuft. Meist kommt es auch zur Bildung von Buttersäure (Mizuno et al., 2000; Tao et al., 2007; Zhu et al., 2008) nach Reaktion F 2.19, wobei der Anteil an gebildeter Buttersäure durchaus die Menge an gebildeter Essigsäure überwiegen kann.

$$C_6H_{12}O_6 \rightarrow CH_3CH_2CH_2COOH + 2H_2 + 2CO_2 \qquad \text{F 2.19}$$

Alle anderen möglichen Reaktionswege zu Milchsäure oder anderen Säuren werden in der vorliegenden Arbeit vernachlässigt, da sie unerwünscht sind und durch die Wahl der Reaktionsbedingungen möglichst vermieden werden sollten. Weiters wird in dieser Arbeit davon ausgegangen, dass Zucker nur in Form von Glukose vorliegt. Alle anderen Hexosen sowie Pentosen, die ebenfalls zur Wasserstoff und Säuren umgesetzt werden können, werden

vernachlässigt. Neben der Bildung von Säuren wird die Glukose zu einem gewissen Anteil auch für das Wachstum der Bakterien genutzt.

Die Ausbeute der thermophilen Fermentation hängt von sehr vielen Faktoren ab. Dazu zählen die Konzentration an Zucker im Fermenter, der pH-Wert in der Lösung, aber auch der Wasserstoffpartialdruck im Fermenter (van Niel et al., 2003). Dabei wird die Wasserstoffproduktion im Fermenter umso mehr gehemmt, je höher der Wasserstoffpartialdruck ist, womit auch die Wasserstoffausbeute sinkt. Um diesen Effekt zu verhindern, wird üblicherweise ein Spülgas in den Fermenter eingeleitet, das den produzierten Sauerstoff aus dem Fermenter ableitet. Als Spülgase kommt Stickstoff (Mizuno et al., 2000) aber auch andere Inertgase (z.B. Argon) sowie Wasserdampf in Frage. In der vorliegenden Arbeit wurde eine Variante gewählt, in der im Dunkelfermenter selbst so viel Wasserdampf erzeugt wird, dass damit der Wasserstoff ausgespült werden kann. Dazu wird der Fermenter bei Unterdruck betrieben, damit bei einer Betriebstemperatur von 65-80 °C die erforderliche Menge an Wasserdampf erzeugt werden kann, um einen Wasserstoffpartialdruck $<10^3$-10^4 Pa einzustellen.

Als Rohstoffe kommen für die Dunkelfermentation zucker- und stärkehaltige Pflanzen wie Zuckerrübe, Mais, Miscanthus, Süßhirse und Kartoffeln aber auch Abfallprodukte aus der Lebensmittelindustrie oder Papierschlamm als Abfallprodukt aus der Papierindustrie in Frage (Kádár et al., 2003; Claassen et al., 2005; Kapdan et al., 2006).

2.1.5.2 Photofermentation

Bei der Photofermentation wird die Tatsache ausgenutzt, dass bestimmte Bakterienstämme aus organischen Säuren unter Einwirkung von Licht Wasserstoff erzeugen. Bei diesen Bakterien handelt es sich um Nicht-Schwefel-Purpurbakterien, zu denen beispielsweise Rhodobacter capsulata, Rhodobacter sheroides aber auch Arten von Rhodopseudomonas zählen (Tsygankov et al., 1998; Hoekema et al., 2002; Kapdan et al., 2006; Chen et al., 2008a). Die Fermentation erfolgt meist bei Temperaturen zwischen 30 und 35 °C und wird bei einem pH-Wert von 7-8 durchgeführt.

Für die Umsetzung der organischen Säuren zu Wasserstoff wird neben Photonen in Form von Sonnenlicht auch Wasser benötigt. Je nach Art der Säure finden dabei unterschiedliche Reaktionen statt. In Gleichung F 2.20 ist die Reaktionsgleichung für die Umsetzung von Essigsäure dargestellt, in Gleichung F 2.21 diejenige für Buttersäure als Ausgangsmaterial. Neben den genannten können auch weitere Säuren umgewandelt werden, wie beispielsweise Milchsäure oder Äpfelsäure (Kapdan et al., 2006), auf die hier

jedoch nicht näher eingegangen wird. Wie bei der Dunkelfermentation wird auch bei der Photofermentation ein Teil des Substrates, also ein Teil der Säuren, für das Wachstum der Bakterien verwendet.

$$CH_3COOH + 2H_2O \rightarrow 4H_2 + 2CO_2 \qquad \text{F 2.20}$$

$$CH_3(CH_2)_2COOH + 6H_2O \rightarrow 10H_2 + 4CO_2 \qquad \text{F 2.21}$$

Wie die Dunkelfermentation wird auch die Photofermentation von vielen Parametern beeinflusst, wozu der pH-Wert und die Säurekonzentration zählen (Fang et al., 2005). Es muss daher darauf geachtet werden, dass im Reaktor die optimalen Betriebsbedingungen eingestellt werden, um die maximale Ausbeute zu erzielen. Bei der Gestaltung des Photoreaktors ist zu beachten, dass ein hohes Verhältnis von Oberfläche zu Volumen benötigt wird, um gute Ausbeuten zu erzielen. Mögliche Typen von Photoreaktoren sind vertikale Kolonnen, Flachpaneele oder Röhrenreaktoren (Akkerman et al., 2002). Die Lichtausbeute bei der Photofermentation ist sehr niedrig (<10%) und darüber hinaus sinkt sie meist mit steigender Lichtintensität (Barbosa et al., 2001; Akkerman et al., 2002). Damit verbunden werden derzeit sehr große Fermenteroberflächen für die Produktion technisch relevanter Mengen an Wasserstoff benötigt. Diese Problematik soll durch weitere intensive Forschungstätigkeit in Zukunft wesentlich verbessert werden.

2.1.5.3 Gekoppelte Dunkel- und Photofermentation

Wie in den beiden vorangegangenen Kapiteln ausgeführt wurde, entstehen bei der Dunkelfermentation organische Säuren als Nebenprodukte, bei der Photofermentation werden hingegen organische Säuren als Einsatzstoffe benötigt. Daher liegt eine Kopplung dieser beiden Technologien nahe, um eine möglichst hohe Gesamtausbeute an Wasserstoff aus einem vorgegebenen Rohstoff zu erzielen.

Wie bereits früher erwähnt, ist bei der Kopplung dieser beiden Technologien darauf zu achten, dass nicht unbedingt die Wasserstoffausbeute in jedem Einzelschritt, sondern in der Gesamtkette maximiert wird. Aus diesem Grund sind die beiden Produktionswege über die Essigsäure und die Buttersäure gleichwertig, da in beiden Fällen eine Gesamtausbeute von 12 mol H_2 /mol Glukose erzielt wird. Diese Betrachtung ist natürlich nur rein theoretischer Natur. In der Praxis muss überprüft werden, wie hoch die Umsätze über die verschiedenen Pfade tatsächlich sind. Dabei spielt auch die Auswahl der eingesetzten Mikroorganismen eine Rolle, da nicht alle Mikroorganismen jedes Substrat gleich verwerten. Die Herausforderung besteht also darin, die richtige Kombination aus Mikroorganismen und

Betriebsbedingungen zu finden, um die Gesamtausbeute möglichst nahe an das theoretische Maximum zu bringen.

Es muss angemerkt werden, dass sich diese gekoppelte Betrachtung von Dunkel- und Photofermentation noch im Stadium der Grundlagenforschung befindet und daher noch relativ wenig Erfahrung auf diesem Gebiet vorliegt. Laufende Forschungsprojekte wie das Projekt HYVOLUTION (Claassen et al., 2006) zeigen jedoch viel versprechende erste Ergebnisse. Im Zuge der vorliegenden Arbeit wurden aufgrund der geringen Menge an vorhandenen Daten nicht nur reale Umsatzwirkungsgrade, sondern auch die theoretisch maximal erreichbare Menge an Wasserstoff bei 100% Umsatz, sowie derzeit als realistisch eingeschätzte Wirkungsgrade für die Dunkel- und die Photofermentation betrachtet. In den entsprechenden Kapiteln wird auf diese Tatsache noch einmal gesondert hingewiesen.

2.1.6 Gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation

Bei der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation werden die Technologien der Dunkelfermentation (siehe Kapitel 2.1.5.1) und der Biogasfermentation (siehe Kapitel 2.1.3) miteinander kombiniert. Dabei wird der säurehaltige Substratrückstand der Dunkelfermentation als Einsatzmaterial für die Biogasfermentation herangezogen. Die Verwertung des säurehaltigen Substrats im Biogasfermenter läuft dabei prinzipiell gleich ab wie bei anderen Biogassubstraten. Es entsteht also auch bei der Kopplung der Dunkelfermentation mit der Biogasfermentation ein Biogas, das hauptsächlich aus CH_4 und CO_2 besteht und neben Wasserdampf auch noch geringe Mengen an unerwünschten Gaskomponenten wie H_2S oder NH_3 enthält.

Die Kopplung der Dunkel- und Biogasfermentation steht, ebenso wie die Kopplung der Dunkel- mit der Fotofermentation, noch am Beginn der Forschungstätigkeit. Zahlreiche Arbeiten auf diesem Thema zeigen jedoch, dass die Kombination dieser beiden Fermentationsschritte möglich ist und zu durchaus viel versprechenden Ergebnissen führt (Liu et al., 2006; Kyazze et al., 2007; Antonopoulou et al., 2008; Chu et al., 2008; Xie et al., 2008; Zhu et al., 2008). Aufgrund der Tatsache, dass die Technologie noch am Beginn der Entwicklung steht, sind auch die derzeit erzielten Versuchsergebnisse nicht als optimale Ergebnisse anzusehen. Um dieser Tatsache Rechnung zu tragen, wurden die Berechnungen für diese Technologie zusätzlich auch für die, natürlich nur theoretisch erreichbare, vollständige Umsetzung der jeweils eintretenden Substrate durchgeführt.

Bei der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation kommt es im Gegensatz zu den bisher behandelten Technologien dazu, dass zwei verschiedene Arten von Gasen

produziert werden. Aus der Dunkelfermentation wird ein wasserstoffreiches Gas erhalten, das nur noch einen Prozessschritt zur Aufreinigung auf den gewünschten Reinheitsgrad erfordert. Die Biogasfermentation liefert hingegen ein methanreiches Gas, das auf verschiedene Arten genutzt werden kann. Es kann einerseits zu Wasserstoff umgewandelt werden, wobei beispielsweise eine Dampfreformierungsanlage zum Einsatz kommen kann, wie in Kapitel 2.1.1 beschrieben ist. Andererseits kann das produzierte Biogas auch zur Deckung des Strom- und/oder Wärmebedarfs in der Anlage herangezogen werden. Dadurch wird zwar der Wasserstoffertrag der Technologie verringert, dafür aber die Unabhängigkeit von fremden Energiequellen erhöht. Darüber hinaus können Überschüsse an produziertem Strom in das Stromnetz eingespeist und dadurch die Wirtschaftlichkeit der Anlage verbessert werden. In der vorliegenden Arbeit wurden sowohl die Umsetzung des Biogases zu Wasserstoff in einer Dampfreformierungsanlage als auch die Nutzung des Gases in einem Gaskessel zur Wärmeerzeugung sowie die Nutzung des Biogases in einem Gasmotor zur Produktion von Strom und Wärme untersucht.

2.1.7 Gasaufbereitungstechnologien

In diesem Abschnitt werden alle Technologien beschrieben, die notwendig sind, um das Rohgas vor der Reformierung zu Wasserstoff auf eine Qualität zu reinigen, die für den Reformer benötigt bzw. gewünscht wird, oder um das wasserstoffreiche Produktgas auf die gewünschte Qualität aufzureinigen.

2.1.7.1 Biologische Entschwefelung

Die biologische Entschwefelung wird im Zuge der vorliegenden Arbeit für die Aufbereitung von Biogas eingesetzt. Im produzierten Biogas ist neben den Hauptbestandteilen CH_4 und CO_2 auch H_2S vorhanden, das je nach eingesetztem Substrat Anteile bis zu 5.000 ppmv und in seltenen Fällen auch mehr annehmen kann. Da der Schwefelwasserstoff zu Korrosion in den nachgeschalteten Anlagenteilen führt, muss er vor der Weiterverwendung des Biogases abgetrennt werden. Für diese Abtrennung stehen mehrere Technologien zur Verfügung, wie die adsorptive Entfernung, die chemische Fällung, die chemische Absorption, die Membrantrennung und eben auch die biologische Oxidation des Schwefelwasserstoffs (Weiland, 2003). Diese biologische Entschwefelung mittels Oxidation kann direkt im Fermenter durchgeführt werden, wenn Abscheidegrade bis ca. 95% erreicht werden sollen. In diesem Fall wird Sauerstoff in Form von Luft in den Gasraum des Fermenters eingeblasen und der Schwefelwasserstoff durch die im Fermenter vorhandenen Schwefelbakterien abgebaut (Prechtl et al., 2003; Weiland, 2003).

In dieser Arbeit wurde allerdings die biologische Entschwefelung in einer separaten Entschwefelungskolonne gewählt. In diesem Fall findet die Entschwefelung in einer Kolonne statt, die mit einem Trägermaterial gefüllt ist, auf dem die Schwefelbakterien immobilisiert sind. Diese Kolonne wird sowohl vom Biogas als auch dem sauerstoffhaltigen Gas (Luft oder reines O_2) durchströmt. Das Trägermaterial wird mit Flüssigkeit umspült, das die Bakterien mit Nährstoffen und Wasser versorgt und die wasserlöslichen Abbauprodukte entfernt. Die Mikroorganismen bauen den Schwefelwasserstoff ab, um die bei der Reaktion freiwerdende Energie für den CO_2-Stoffwechsel zu gewinnen. Dabei läuft der Abbau des H_2S nach den folgenden Reaktionen ab (Forkmann et al., 2003; Prechtl et al., 2003):

$$2H_2S + O_2 \rightarrow 2S + 2H_2O \qquad \text{F 2.22}$$

$$2S + 2H_2O + 3O_2 \rightarrow 2H_2SO_4 \qquad \text{F 2.23}$$

$$H_2S + 2O_2 \rightarrow H_2SO_4 \qquad \text{F 2.24}$$

Je nach Betriebsbedingungen kann entweder der Reaktionsweg zu elementarem Schwefel (F 2.22) beziehungsweise die Bildung von H_2SO_4 über die Weiterreaktion des Schwefels (F 2.23) oder die direkte Oxidation von H_2S (F 2.24) bevorzugt werden. Mit diesem Verfahren können Abscheideleistungen von 99% und mehr erreicht werden. Damit ist es möglich, die H_2S Konzentration in üblichen Anwendungsfällen (Rohgas $<$6.000 ppmv H_2S) auf unter 50 ppmv zu senken (Weiland, 2003; Institut für Energetik und Umwelt et al., 2006).

In der vorliegenden Arbeit wurde davon ausgegangen, dass die gesamte Menge an abgeschiedenem H_2S zu Schwefelsäure umgewandelt wird, da diese Reaktion energetisch bevorzugt ist (Forkmann et al., 2003; Prechtl et al., 2003). Darüber hinaus wird die Entschwefelung mit reinem Sauerstoff durchgeführt, um den Eintrag von Stickstoff über die Luft zu vermeiden, der in der weiteren Prozessfolge nur sehr schwer wieder aus dem Gas abgetrennt werden kann.

2.1.7.2 Adsorptive Entfernung von Chlor- und Schwefelsubstanzen inklusive Hydrierung

Soll ein Gas in einer Anlage weiterverarbeitet werden, in der Katalysatoren zum Einsatz kommen, so muss das Gas üblicherweise so weit wie möglich von Schwefelsubstanzen befreit werden, da diese auch bei niedrigsten Konzentrationen im Gas in Hohem Maße am Katalysator adsorbiert werden und somit den Katalysator vergiften. Eine andere

Möglichkeit bestünde in der Anwendung von schwefeltoleranten Katalysatoren. In der vorliegenden Arbeit werden jedoch alle verwendeten Katalysatoren (im Reformer, im CO-Shift-Reaktor sowie im Methanierungsreaktor) als nicht schwefeltolerant angenommen, daher ist in allen diesen Fällen eine Feinreinigung der Schwefelsubstanzen erforderlich. Eventuell im Gas enthaltene Chlorsubstanzen haben auf diese Katalysatoren ebenfalls eine vergiftende Wirkung, daher wird üblicherweise sicherheitshalber auch eine Chlorreinigungsstufe inkludiert. Weiters wird auch für die Einspeisung von synthetischem Erdgas aus Biogas bzw. Vergasergas in das Erdgasnetz eine Schwefelfeinreinigung benötigt, um die geforderten Spezifikationen der Gasnetzbetreiber zu erfüllen.

Für die Entfernung der Schwefelsubstanzen bieten sich mehrere Verfahren an, wie Absorption mit unterschiedlichen Lösungsmitteln und Adsorption an verschiedenen Materialien (Siddle et al., 2003). Für die Feinentschwefelung vor dem Einsatz von Katalysatoren wie im Dampfreformierungsprozess oder der Methanierung wird üblicherweise eine kombinierte Hydrierung und Adsorption (Hydrodesulphurisation, HDS) eingesetzt, da damit im Gegensatz zu den meisten anderen Verfahren eine Vielzahl an unterschiedlichen Schwefelverbindungen abgetrennt werden kann (Contadini et al., 2000; Broadhurst et al., 2002; Siddle et al., 2003; Hofbauer et al., 2006). Im ersten Schritt dieses Prozesses werden organische Schwefelverbindungen mit Wasserstoff zu H_2S hydriert. Diese Reaktion läuft in Gegenwart eines HDS-Katalysators (meist eine Mischung aus Cobaltoxid, Molybdänoxid und Aluminium) und bei Temperaturen um 350 °C-400 °C nach Reaktionsgleichung F 2.25 ab (Dicks, 1996; Broadhurst et al., 2002; Hofbauer et al., 2006):

$$R_1 - S - R_2 + 2H_2 \rightarrow H_2S + H - R_1 + H - R_2 \qquad \text{F 2.25}$$

Der benötigte Wasserstoff für die Reaktion kann entweder direkt aus dem Gasstrom entnommen werden (wie beispielsweise beim Vergasergas) oder, wie in der Reformeranlage, extern zugeführt werden, indem ein Teil des produzierten Wasserstoffs der Anlage in den HDS-Reaktor zurückgeführt wird. Anschließend an diesen Hydrierungsschritt werden das gebildete sowie das bereits ursprünglich vorhandene H_2S mittels Adsorption an einem Zinkoxidbett entfernt. Dieser Adsorptionsschritt läuft im gleichen Temperaturbereich wie die Hydrierung und nach Gleichung 2.26 ab (Dicks, 1996; Contadini et al., 2000; Broadhurst et al., 2002; Hofbauer et al., 2006). Alternativ könnte anstelle von ZnO auch FeO eingesetzt werden.

$$H_2S + ZnO \rightarrow ZnS + H_2O \qquad \text{F 2.26}$$

Sind im Rohgas chlorhaltige Bestandteile enthalten, so gibt es verschiedene Wege diese zu entfernen. Liegt das Chlor nur in Form von HCl vor, so kann es vor dem HDS-Schritt direkt durch Adsorption an Metallen entfernt werden. Liegen auch andere Chlorsubstanzen vor, so wird zunächst eine Hydrierungsstufe durchlaufen, um die gesamte Menge an vorhandenem Chlor in HCl umzuwandeln. Die Adsorption des HCl erfolgt anschließend bei Temperaturen über 350 °C an metallischen Adsorbenzien wie beispielsweise Natrium-aluminat ($NaAlO_2$) nach folgender Reaktion (Broadhurst et al., 2002; Hofbauer et al., 2006):

$$HCl + NaAlO_2 \rightarrow NaCl + HAlO_2 \qquad \text{F 2.27}$$

Meist werden alle drei Prozessschritte Hydrierung, Chloradsorption und Schwefel-adsorption in einem Reaktor durchgeführt, der in unterschiedliche Zonen unterteilt ist. Sollen auch Chlorbestandteile hydriert werden, wird die Stufe für die Adsorption des Chlors meist vor der Schwefeladsorption angeordnet.

2.1.7.3 Absorptive Entfernung von Teer

Bei der Vergasung von Biomasse entstehen neben den gewünschten gasförmigen Produkten unter anderem auch Teere. Diese Teere stellen Gemische aus höheren Kohlenwasserstoffen dar, die eine sehr hohe Kondensationstemperatur (je nach Zusammensetzung bis 350-400 °C) aufweisen und damit im Laufe des Gasverwertungs-prozesses auskondensieren würden (Boerrigter et al., 2005). Da die Teerablagerung in der Anlage zu Schäden und Behinderungen des Betriebs führen würde, müssen die Teerbestandteile aus dem Gasstrom entfernt werden. Dazu gibt es einige Möglichkeiten, wie das katalytische Cracken der Teere in Gegenwart von Katalysatoren, wobei hier die Schwefelempfindlichkeit der Katalysatoren problematisch ist (Vogel et al., 2006). Eine weitere Variante ist die Entfernung der Teere durch Auswaschen aus dem Gasstrom. Für dieses Verfahren bietet sich die Anwendung von organischen Lösungsmitteln an, da beim Einsatz von Wasser ein teergesättigtes Gas zurück bleibt, aus dem bei nachfolgender Abkühlung oder Verdichtung neuerlich die Teere auskondensieren (Vogel et al., 2006). Beispiele für die absorptive Entfernung der Teere mit organischen Lösungsmitteln sind das OLGA-Verfahren des Energy Research Centre of the Netherlands (ECN), das verschiedene Öle als Lösungsmittel einsetzt (Boerrigter et al., 2005), und die Teerwäsche mit Rapsmethylester (RME), wie sie in der Vergasungsanlage in Güssing eingesetzt wird (Pröll et al., 2005b). Im Zuge dieser Arbeit wurde die Teerwäsche mit Rapsmethylester als Abscheidetechnologie ausgewählt.

Das Vergasergas tritt in den Teerwäscher mit einer Temperatur um 170 °C ein und wird durch die Waschflüssigkeit auf 40-50 °C abgekühlt. Durch diese Abkühlung werden sowohl die Teere als auch der enthaltene Wasserdampf teilweise auskondensiert. Zusätzlich zu dieser Teerentfernung durch Kondensation kommt es auch zu einer weiteren Abscheidung durch Absorption der Teere im Rapsmethylester. RME kann bei einer Austrittstemperatur von 50 °C bis zu 0,5 kg Teer pro kg RME absorbieren (Pröll et al., 2005b). Dadurch kann eine Reduktion des Teergehalts von ursprünglich 1.500-4.500 mg/Nm³ auf 10-40 mg/Nm³ (Angaben bezogen auf trockenes Gas) erzielt werden (Rauch, 2005).

Wie bereits erwähnt, kommt es neben der Teerkondensation auch zu einer Kondensation des Wasserdampfes. Die damit vorliegende flüssige Wasserphase im Absorber führt wiederum dazu, dass entsprechend dem Gesetz von Henry wasserlösliche Gase in dieser Wasserphase absorbiert werden. Im Fall des Vergasergases werden beispielsweise NH_3, H_2S und CO_2 absorbiert. Da diese Gasabtrennung im Teerwäscher in der vorliegenden Arbeit nicht mitberücksichtigt wird, soll an dieser Stelle nur auf weiterführende Literatur verwiesen werden (Pröll et al., 2005b).

2.1.7.4 Absorptive Entfernung von CO_2

Im Zuge dieser Arbeit wird die Entfernung von CO_2 aus einem Gasgemisch für verschiedene Zwecke eingesetzt. Vor der Reformierung eines Gases kann die Abtrennung des CO_2-Anteils beispielsweise zu einer Verringerung der benötigten Menge an Brenngas für die Erwärmung des zu reformierenden Gases führen. Eine weitere Anwendung im Zuge der vorliegenden Arbeit ist etwa die Abtrennung des Kohlendioxids als Bestandteil einer Anlage zur Aufbereitung eines Gases auf Erdgasqualität. Für diese Abtrennung kommen mehrere Verfahren in Frage. Dazu zählen die Absorption in Lösungsmitteln, die Abtrennung mittels Membrantechnik, die Adsorption, beispielsweise in Form einer PSA-Anlage, und die kryogene Abtrennung durch die Verflüssigung des CO_2 bei tiefen Temperaturen (Persson et al., 2006). In Kapitel 2.1.7.5 wird die Membrantechnik zur CO_2-Abtrennung näher ausgeführt, da sie in der vorliegenden Arbeit am häufigsten zur Abtrennung des Kohlendioxids angewendet wird. Im Fall der direkten Abtrennung des CO_2 aus dem Vergasergas kann die betrachtete Technologie der Membrantechnik jedoch nicht eingesetzt werden. Grund dafür ist, dass im Vergasergas ein hoher Anteil an Wasserstoff enthalten ist, der ja das gewünschte Endprodukt jeder Anlage darstellt. Dieser Wasserstoffanteil würde in der eingesetzten Membran gemeinsam mit dem CO_2 abgetrennt werden. Aus diesem Grund wurde für diese Anlage die Variante der absorptiven Kohlendioxidentfernung gewählt.

Die Absorption von CO_2 kann mit Hilfe unterschiedlicher Lösungsmittel erfolgen. Beispiele dafür sind die Absorption in Aminlösungen, in Wasser oder Polyethylenglykol (Persson et al., 2006). Dabei weisen die organischen Lösungsmittel gegenüber Wasser den Vorteil auf, dass die Löslichkeit des CO_2 in den organischen Lösungsmitteln wesentlich höher ist. Damit kann die Menge an eingesetztem Lösungsmittel und auch die benötigte Energie für die Regeneration des Lösungsmittels verringert werden. In der vorliegenden Arbeit wurde die Variante der Aminwäsche ausgewählt, wobei aus den üblicherweise eingesetzten Aminen (Monoethanolamin (MEA), Diethanolamin (DEA) und N-Methyldiethanolamin (MDEA)) die Variante mit einer MEA-Lösung ausgewählt wurde.

Der Prozess der Absorption beruht darauf, dass sich Gase entsprechend dem Henry-Gesetz (F 2.28) unterschiedlich gut in einer Flüssigkeit lösen.

$$p_{ges} * y_i = H_i * x_i \qquad \text{F 2.28}$$

Im Fall der Absorption von CO_2 in einer MEA-Wasser-Lösung kommt es darüber hinaus zur Reaktion zwischen CO_2 und Wasser sowie Folgereaktionen im Lösungsmittel (Gabrielsen et al., 2005; Vrachnos et al., 2006):

$$CO_2 + 2H_2O \leftrightarrow HCO_3^- + H_3O^+ \qquad \text{F 2.29}$$

$$MEA + HCO_3^- \leftrightarrow MEACOO^- + H_2O \qquad \text{F 2.30}$$

$$MEA + H_3O^+ \leftrightarrow MEAH^+ + H_2O \qquad \text{F 2.31}$$

Damit ist die Absorption nicht nur von der reinen Henry-Absorption aufgrund der physikalischen Löslichkeit, sondern auch von der Einstellung der Reaktionsgleichgewichte im Lösungsmittel abhängig. Durch die Weiterreaktion des CO_2 wird damit die Abtrennleistung des Prozesses erhöht, da das CO_2 als solches aus der Lösung entfernt und damit entsprechend dem Henry-Gesetz wieder neues CO_2 absorbiert werden kann.

Die MEA-Absorption wird üblicherweise in einer Kolonne mit Füllkörpern zur Verbesserung des Phasenübergangs zwischen Gas- und Flüssigphase durchgeführt. Die Lösungsmittelkonzentration liegt in einem Bereich von 15-50 gew% MEA, wobei die gebräuchlichsten Werte bei 30 gew% liegen. Die Absorption findet in einem Temperaturbereich von 40-55 °C und bei Drücken zwischen Normaldruck und 3 bar statt (Rao et al., 2002; Persson et al., 2006; Tobiesen et al., 2007). Um den Bedarf an Lösungsmittel zu minimieren, wird nicht immer frische MEA-Lösung zugeführt, sondern das Lösungsmittel regeneriert. Ein Teil des Lösungsmittels muss trotzdem durch frische Lösung ausgetauscht

werden, um den Verbrauch an Lösungsmittel, etwa durch Bildung von Salzen mit Störgasen wie SO_2 oder NO_x, auszugleichen.

Die Regenerierung des Lösungsmittels erfolgt üblicherweise in einer weiteren Kolonne, in der die Flüssigkeit mittels Dampf erhitzt wird. Da mit steigender Temperatur das Absorptionsvermögen des Lösungsmittels für das CO_2 sinkt, wird durch den vom Dampf verursachten Temperaturanstieg das gelöste Gas wieder desorbiert. Die Temperatur liegt dabei meist im Bereich von 100-120 °C, der Druck liegt im Bereich des Drucks im Absorptionsschritt (Rao et al., 2002; Persson et al., 2006; Tobiesen et al., 2007).

2.1.7.5 Membrantechnik zur Entfernung von CO_2

Die Membrantechnik wird in mehrere verschiedene Arten von Prozessen unterteilt. Diese umfassen die Umkehrosmose, die Nanofiltration, die Ultrafiltration, die Elektrodialyse, die Pervaporation sowie die Gaspermeation. Diese Prozesse unterscheiden sich nach der Phase in der die Ein- und Austrittsströme vorliegen (flüssig oder gasförmig), nach der Art der Triebkraft (Druckdifferenz in unterschiedlicher Höhe, elektrisches Feld) und der Art der eingesetzten Membran (Rautenbach, 1997). Daraus ergibt sich wiederum für jedes Verfahren ein anderes Anwendungsgebiet.

Für die Abtrennung von CO_2 aus einem Gasgemisch wird die Technologie der Gaspermeation eingesetzt. Bei diesem Verfahren sind sowohl der Eingangsstrom als auch die beiden austretenden Ströme aus der Membran gasförmig. Als Membran wird eine meist porenfreie, asymmetrische Lösungs-Diffusions-Membran eingesetzt und die Triebkraft der Trennung wird durch Anlegen eines Überdrucks auf der Feedseite beziehungsweise durch Anlegen eines partiellen Vakuums auf der Permeatseite erzeugt (Rautenbach, 1997). Die Trennung über die Membran beruht prinzipiell darauf, dass verschiedene Komponenten eines Gasgemisches unterschiedlich gut und schnell durch die eingesetzte Membran hindurchdringen können bzw. von der Membran zurückgehalten werden. Im Fall der Gaspermeation und der dabei eingesetzten porenfreien Polymermembranen wird der Stofftransport durch die Membran mit Hilfe des Lösungs-Diffusions-Modells beschrieben (Rautenbach, 1997). Dieses Modell beschreibt die Tatsache, dass der Transport durch die porenfreie Membran nicht nur von der Triebkraft, also der Differenz der Partialdrücke einer Komponente über die Membran, sondern zu einem wesentlichen Anteil auch von der Kombination aus Löslichkeit der Gaskomponente in der Membran und Diffusivität der Gaskomponente durch die Membran bestimmt wird. Dabei beeinflusst die Partialdruck-differenz über die Membran im Wesentlichen den Molenfluss der Komponente durch die

Membran, wohingegen das Produkt aus Löslichkeit und Diffusivität die Selektivität der Gastrennung beeinflusst (Rautenbach, 1997).

Die CO_2-Abtrennung wurde in der vorliegenden Arbeit nach dem Aufbau gewählt, der in Bruck an der Leitha in Niederösterreich eingesetzt wird, um Biogas durch Abtrennung von CO_2 auf Erdgasqualität aufzubereiten (Harasek et al., 2007; Miltner et al., 2008a). Hier wird eine Polyimidmembran eingesetzt, die in Form von Hohlfasermodulen implementiert ist. Die Membran ist sehr durchlässig für CO_2, H_2O, H_2S, NH_3, H_2 und zu geringerem Anteil durchlässig für O_2. CH_4 und N_2 werden hingegen fast gänzlich zurückgehalten. Damit ergibt sich im Retentat der Membran ein Gasstrom, der reich an CH_4 ist, wohingegen das Permeat reich an CO_2 und allen anderen Komponenten ist und nur einen geringen Anteil an CH_4 aufweist. Um die Trennwirkung zu erhöhen und den Methanverlust zu verringern, wird die Membrananlage zweistufig ausgeführt, d.h. das Retentat der ersten Membranmodulstufe wird als Feed in eine zweite Modulstufe geleitet, zusätzlich wird das Permeat der zweiten Stufe wieder vor die erste Stufe rückgeführt (Harasek et al., 2007; Miltner et al., 2008a). Damit kann der Methanverlust auf 2-3% der produzierten Menge an Methan im Retentat reduziert werden. Der Methangehalt im Retentat kann je nach Prozessführung bis zu 99 vol% betragen, der Restanteil besteht hauptsächlich aus CO_2 und geringen Mengen an Wasserdampf.

2.1.7.6 Staubfilter

Bei der Vergasung von Biomasse entstehen neben den gasförmigen Produkten auch Staub und Asche, die sich teilweise im Gasstrom wieder finden. Um die Verschmutzung nachfolgender Anlagenteile zu verhindern und die geforderten Abgasgrenzwerte bei der Abgabe der Gase in die Atmosphäre einzuhalten, ist eine Abtrennung dieser Partikel am Austritt des Vergasers sowie vor dem Eintritt des Abgases in den Kamin erforderlich. Diese Abtrennung kann prinzipiell mit unterschiedlichen Technologien durchgeführt werden. Dazu zählen die Zyklonabscheidung, die elektrostatische Abscheidung, die Abscheidung in Wäschern und die Abscheidung in Staubfiltern (Nussbaumer, 2001). Da in der verwendeten Referenzanlage für die Vergasung in Güssing Staubfilter eingesetzt werden, soll hier nur diese Technologie betrachtet werden.

Im Fall der Partikelabtrennung mittels Filter beruht die Trennwirkung darauf, dass die festen Teilchen an der Oberfläche des Filtermediums zurückgehalten werden, wohingegen das Gas durch dieses Filtermedium hindurchströmt. Die zurückgehaltenen Partikel bilden eine Ablagerungsschicht auf dem Filtermedium, die in der Folge den Hauptanteil der Filterwirkung übernimmt (Löffler, 1988). Durch den Widerstand den das Filter für die

Gasströmung darstellt, kommt es im Apparat zu einem Druckverlust. Durch das Anwachsen des Filterkuchens steigt dieser Druckverlust im Laufe der Zeit weiter an. Mit diesem Druckverlust erhöht sich auch der Leistungseintrag für das Gasgebläse, weshalb bei Überschreiten eines vorgegebenen Maximaldruckverlusts eine Abreinigung der abgelagerten Partikelschicht erfolgt. Als Filtermedien werden Gewebe, Filter und Vliese eingesetzt, die meist in Form von Schläuchen oder Taschen ausgeführt sind. Der Abscheidegrad solcher Filter kann bei über 99,9% liegen (Löffler, 1988). In manchen Fällen wird der Staubfilter nicht nur zur Abtrennung der Partikel, sondern auch dazu benutzt, ungewünschte Gasbestandteile (z.B. HCl) durch Adsorption aus dem Gas zu entfernen. Das kann entweder durch reine Adsorption der Gase an den Partikeln selbst oder durch Einbringung von zusätzlichen Adsorbenzien wie Kalk erfolgen (Nussbaumer, 2001).

2.1.7.7 Druckwechseladsorption (PSA)

In der vorliegenden Arbeit wurde als Feinreinigungsschritt am Ende jedes Wasserstoffproduktionswegs eine Druckwechseladsorption (pressure swing adsorption - PSA) gewählt. Die Wahl fiel auf diese Technologie, da sie für verschiedenste Gasgemische einsetzbar ist und die Reinigung auf die geforderte Wasserstoffqualität ermöglicht. Darüber hinaus stellt sie die gebräuchlichste Reinigungstechnologie innerhalb von Dampfreformierungsanlagen dar (Contadini et al., 2000; Dreier et al., 2000; Neumann et al., 2003). Eine andere Methode der Gasaufreinigung würden Membranen, wie beispielsweise Palladium-Membranen, darstellen, die den Wasserstoff aus dem Gasstrom abtrennen und die Verunreinigungen im Retentat zurücklassen (Chiappetta et al., 2006). Allerdings sind diese Membranen noch am Anfang der Entwicklung und nur im kleinen Maßstab erhältlich, weshalb sie hier nicht berücksichtigt wurden. Im Fall der biologischen Wasserstoffproduktion mittels Dunkel- und Photofermentation würde möglicherweise auch eine CO_2-Entfernung mittels MEA-Wäsche als Reinigungstechnologie ausreichen. Da allerdings noch nicht endgültig sichergestellt ist, dass außer CO_2 keine weiteren Bestandteile aus dem Gas entfernt werden müssen, und um die Vergleichbarkeit mit den anderen Technologien zu erleichtern, wurde auch in diesem Fall eine Feinreinigung mittels PSA-Anlage ausgewählt.

Bei der Druckwechseladsorption handelt es sich – wie der Name bereits verrät – um eine Adsorptionstechnologie. Diese Technologie nützt die Tatsache aus, dass Feststoffe die Eigenschaft besitzen, verschiedene Gase in unterschiedlichem Ausmaß an ihre Oberfläche zu binden. Diese Bindungsfähigkeit wird nicht nur von der Art des Gases, sondern auch von den Reaktionsbedingungen beeinflusst. Bei der Druckwechseladsorption wird dementsprechend ausgenutzt, dass die unerwünschten Gasbestandteile bei hohem Druck in großer Menge, bei niedrigem Druck jedoch nur in geringem Maße an die Feststoffoberfläche

gebunden werden. Da mit steigender Beladung der Oberfläche die Adsorptionsgeschwindigkeit sinkt, wird die Adsorptionskolonne nur bis zu einem Bruchteil der maximal möglichen Beladung betrieben. Danach muss der Feststoff durch Absenken des Druckes und Spülen mit Wasserstoff wieder regeneriert werden. Um einen kontinuierlichen Betrieb der Anlage zu ermöglichen, müssen in großtechnischen Anlagen mit hohen Gasdurchsätzen viele Adsorberbetten parallel betrieben werden. In der Praxis werden zur Wasserstoffreinigung bis zu 12 Betten kombiniert, die sich in aufeinander abgestimmten Zuständen innerhalb des Betriebszyklus (Druckbeaufschlagung – Adsorption – Druckabsenkung – Regenerierung) befinden. Damit ist es möglich, ein Produktgas mit einer Reinheit von bis zu 99,999 vol% H_2 zu erzeugen (Contadini et al., 2000; Dreier et al., 2000; Neumann et al., 2003).

Als Bettmaterialien kommen Aktivkohle, Molekularsiebe, aktiviertes Aluminium, Zeolite oder Silicagel zum Einsatz. Die PSA-Anlage wird üblicherweise bei Temperaturen um 40 °C und einem Druck zwischen 15 und 35 bar betrieben (Voss, 2005). Die Desorption findet durch Druckwechsel auf 0,14-1,5 bar und Spülung mit H_2 statt (Contadini et al., 2000; Voss, 2005). Ist die PSA-Anlage ein Bestandteil einer Reformierungsanlage, so hat der desorbierte Gasstrom der PSA-Anlage (Offgas) einen relativ hohen Heizwert und wird daher zur Befeuerung des Dampfreformers herangezogen.

2.1.7.8 Methanierung

Im Zuge der vorliegenden Arbeit wird auch ein Produktionsweg betrachtet, in dem Gas aus der Biomassevergasung auf Erdgasqualität gebracht und ins Erdgasnetz eingespeist wird. Um dies zu ermöglichen, ist es erforderlich, den Methangehalt des Vergasergases wesentlich zu erhöhen. Eine Möglichkeit hierfür ist die Technologie der Methanierung.

Bei der Methanierung laufen prinzipiell die gleichen Reaktionen wie bei der Dampfreformierung ab (vgl. Kapitel 2.1.1.1), allerdings liegen die Reaktionsgleichgewichte bei den Betriebsbedingungen im Methanierungsreaktor teilweise auf der anderen Seite als im Dampfreformer (Khorsand et al., 2007). Das Gleichgewicht der schon aus der Dampfreformierung bekannten Reaktion F 2.1 liegt für höhere Kohlenwasserstoffe auf der Seite von CO und H_2. Für Methan liegt das Gleichgewicht hingegen auf der Seite des Methans, wie in Gleichung F 2.32 dargestellt ist.

$$C_nH_m + nH_2O \leftrightarrow nCO + (n + \frac{m}{2})H_2 \qquad \text{F 2.1}$$

$$CO + 3H_2 \leftrightarrow CH_4 + H_2O \qquad \text{F 2.32}$$

Neben dieser Methanierungsreaktion laufen auch alle anderen Reaktionen ab, die im Kapitel Dampfreformierung erwähnt wurden. Dabei läuft allerdings nur die CO-Shift-Reaktion F 2.5 in der dort präsentierten Richtung ab, alle anderen Reaktionen führen im Gegensatz zur Reformierung zur Bildung von Methan, wie in den Gleichungen F 2.33 bis F 2.35 dargestellt ist.

$$CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2 \qquad \text{F 2.5}$$

$$CO_2 + 4H_2 \leftrightarrow CH_4 + 2H_2O \qquad \text{F 2.33}$$

$$2CO + 2H_2 \leftrightarrow CH_4 + CO_2 \qquad \text{F 2.34}$$

$$4CO + 2H_2O \leftrightarrow CH_4 + 3CO_2 \qquad \text{F 2.35}$$

Wie bei der Reformierung bereits erwähnt, handelt es sich bei den angegebenen Reaktionen um Gleichgewichtsreaktionen, wobei es auch hier wieder, abhängig von der Aufenthaltszeit im Methanierungsreaktor und der Reaktionskinetik, meist nicht zur vollständigen Einstellung des Reaktionsgleichgewichtes kommt. Um die Gleichgewichts-einstellung zu fördern, wird die Methanierung in Gegenwart eines Katalysators durchgeführt, wobei meist Nickel-Katalysatoren eingesetzt werden. Da es sich bei den oben angegebenen Reaktionen, wie bereits erwähnt, um die gleichen Reaktionen wie bei der Dampfreformierung handelt, berechnen sich die Gleichgewichtskonstanten auch nach den bei der Dampfreformierung angegebenen Gleichungen F 2.7 bis F 2.14. Da die Reaktionen bei der Methanierung jedoch in entgegen gesetzter Richtung ablaufen wie bei der Dampf-reformierung, gilt für die Gleichgewichtskonstanten folgender Zusammenhang:

$$K_{p,F2.32} = \frac{1}{K_{p,F2.1_CH4}} \qquad \text{F 2.36}$$

$$K_{p,F2.33} = \frac{1}{K_{p,F2.2}} \qquad \text{F 2.37}$$

$$K_{p,F2.34} = \frac{1}{K_{p,F2.3}} \qquad \text{F 2.38}$$

$$K_{p,F2.35} = \frac{1}{K_{p,F2.4}} \qquad \text{F 2.39}$$

Neben den hier angeführten Gleichungen kann es auch bei der Methanierung zur Bildung von reinem Kohlenstoff kommen (Khorsand et al., 2007), der zur Verkokung des Katalysators führen kann, wodurch der Katalysator deaktiviert wird. In der vorliegenden Arbeit wurden diese Reaktionen jedoch, ähnlich wie bei der Reformierung, nicht mitberücksichtigt.

Die Methanierung wird bei 300-450 °C und einem Druck zwischen 1 und 10 bar durchgeführt (Hofbauer et al., 2006). Da bis auf die Reformierungsreaktion F 2.1 alle ablaufenden Reaktionen exotherm sind, muss der Methanierungsreaktor laufend gekühlt werden, um im bevorzugten Temperaturbereich zu bleiben. Als Reaktortypen können Wirbelschichtreaktoren oder gestufte Festbettreaktoren eingesetzt werden (Seemann et al., 2006). Wie bereits früher erwähnt, ist der Nickel-Katalysator empfindlich gegen Schwefel- und Chlorsubstanzen. Da bei der Vergasung von Biomasse nicht ausgeschlossen werden kann, dass solche Verbindungen im produzierten Gas vorliegen, muss vor dem Methanierungsreaktor eine Reinigungsstufe vorgesehen werden. Ein Beispiel für diese Gasreinigung wurde bereits in Kapitel 2.1.7.2 vorgestellt. Wie in Versuchen gezeigt werden konnte, muss der Teeranteil nicht aus dem Vergasergas entfernt werden, da die Teere beinahe vollständig in Methan umgewandelt werden (Seemann et al., 2004; Seemann et al., 2005).

2.2 Prozesskette zur Nutzung des Wasserstoffs in Fahrzeugen

Um den produzierten Wasserstoff letztendlich in Fahrzeugen nutzen zu können, ist eine Reihe von Prozessschritten erforderlich. Diese Prozesskette reicht dabei von der Überführung des Wasserstoffs in einen bestimmten Zustand (Druck, Temperatur, Aggregatzustand) für den anschließenden Transport zur Tankstelle bis hin zur Befüllung des Tanks im Fahrzeug. Darüber hinaus gibt es auch im Fahrzeug verschiedene Technologien zur Umwandlung des Wasserstoffs in nutzbare Antriebsenergie.

In den nachfolgenden Kapiteln werden die einzelnen benötigten Technologien für diesen Weg vom produzierten Wasserstoff bis zur Nutzung im Fahrzeug beschrieben. In der vorliegenden Arbeit werden nur Systeme mit gasförmigem Wasserstoff betrachtet. Darüber

hinaus besteht auch noch die Möglichkeit, den Wasserstoff in flüssiger Form oder in Form von Metallhydriden zu transportieren und zu speichern. Diese Variante wurde jedoch nicht betrachtet, da aus derzeitiger Sicht die gasförmigen Routen bevorzugt werden. Ein Hauptgrund dafür ist der hohe Energieaufwand, der für die Verflüssigung des Wasserstoffs erforderlich ist. In den nachfolgenden Kapiteln werden daher auch nur die Technologien für die gasförmigen Routen behandelt.

2.2.1 Speicherung

Bei der Speicherung von Wasserstoff muss zwischen der stationären Speicherung, beispielsweise in Tankstellen, und der Speicherung in den Fahrzeugen selbst unterschieden werden. In beiden Fällen kann der Wasserstoff entweder gasförmig, flüssig oder an Metalle gebunden gespeichert werden. Die verschiedenen Speichermöglichkeiten werden nachfolgend beschrieben.

2.2.1.1 Stationäre Speicherung

Die stationäre Speicherung von Wasserstoff kann, wie bereits erwähnt, gasförmig in Druckspeichern, flüssig oder in Form von Metallhydriden erfolgen. Bei großen Speichermengen ist die Flüssigspeicherung kostengünstiger als die Druckspeicherung. Die Speicherung in Form von Hydriden ist derzeit noch nicht kommerziell verfügbar. Die flüssige Speicherung hat den Nachteil, dass ein Teil des Wasserstoffs durch Erwärmung wieder in den gasförmigen Zustand übergeht und abgeblasen werden muss (Altmann et al., 2004; Burke et al., 2005; Strategiekreis Wasserstoff, 2005), wodurch sich natürlich ein Wasserstoffverlust ergibt. Als Möglichkeiten zur stationären Wasserstoffspeicherung kommen folgende Methoden in Frage:

- Druckspeicherung großer Wasserstoffmengen in Salzkavernen, Gas- und Öl-lagerstätten (Altmann et al., 2004; Strategiekreis Wasserstoff, 2005).
- Dezentrale Druckspeicherung kleinerer Mengen in Gasometern, Druckröhrentanks oder Kugelbehältern bei Drücken bis zu 800 bar (Strategiekreis Wasserstoff, 2005).
- Flüssigspeicherung großer Mengen in Tanks mit Perlit-Vakuumisolierung, Abdampf-verluste unter 0,03% pro Tag (Strategiekreis Wasserstoff, 2005).
- Flüssigspeicherung von 100-75.000 l in Behältern mit Vakuumpulver- bzw. Vakuum-Superisolierungen mit kontinuierlicher Abgaskühlung und Abdampfraten von 0,4-2% pro Tag (Strategiekreis Wasserstoff, 2005).

- Physikalisch in Metallhydriden oder chemisch in chemischen Hydriden (Altmann et al., 2004).
- Speicherung in Aktivkohle (je nach Porengröße flüssig bzw. gasförmig) (Altmann et al., 2004; Burke et al., 2005).

2.2.1.2 Mobile Speicherung

Die mobile Wasserstoffspeicherung kann ebenfalls in Form der gasförmigen Druckspeicherung, der Flüssigspeicherung, der Speicherung in Metallhydriden oder aber auch durch Speicherung in Aktivkohle erfolgen. Die mobile Druckspeicherung in den Fahrzeugen wird derzeit meist in Tanks aus Verbundwerkstoffen bei Drücken bis 350bar durchgeführt. Bei diesem Druck hat Wasserstoff eine Dichte von 23,5 g/l. Um die Reichweite dieser Druckspeicher von nur ca. 150km auf Reichweiten von mehr als 600 km zu erweitern, ist eine Steigerung des Drucks auf 700 bar erforderlich. Bei diesem Druck beträgt die Dichte bereits 38,7 g/l und die Speicherdichte wird von 0,6 kWh/ auf 1 kWh/l erhöht (Altmann et al., 2004; Burke et al., 2005; Strategiekreis Wasserstoff, 2005).

Die Flüssigspeicherung von Wasserstoff erfolgt bei einer Temperatur von 20 K, bei der der Wasserstoff eine Dichte von 70,8 g/l aufweist. Die Flüssigspeicherung hat neben der bereits bei der stationären Speicherung angesprochenen Abdampfung von Wasserstoff auch den Nachteil, dass zur Verflüssigung des Wasserstoffs mehr als das Dreifache der Energie benötigt wird, die für die Kompression von gasförmigem Wasserstoff auf 700 bar benötigt wird. Es können Energiedichten von 4,5 kWh/kg erreichen werden, wobei die Abdampfraten 1% pro Tag betragen (Burke et al., 2005; Strategiekreis Wasserstoff, 2005).

Die mobile Speicherung kann auch in Metallhydrid-Systemen erfolgen, wobei Hochtemperatur-Hydride wegen der hohen Temperaturen, die benötigt werden um den Wasserstoff wieder freizusetzen (>200 °C), für Fahrzeuge nicht in Frage kommen. Durch die Weiterentwicklung der verwendeten Materialien für Gehäuse und Speichermedium wird die Absenkung der Freisetzungstemperatur auf unter 200 °C (also in den Bereich der derzeitigen Mitteltemperatur-Hydride) erwartet. Metallhydride weisen eine hohe Speicherdichte von 0,1-0,12 kg H_2/l Speichervolumen auf, können aber derzeit nur 0,02-0,03 kg H_2 pro kg Speichermaterial aufnehmen (Altmann et al., 2004; Burke et al., 2005; Strategiekreis Wasserstoff, 2005). Derzeit stellen die Metallhydride daher noch keine großtechnische Alternative zur Druckgas- bzw. Flüssigspeicherung von Wasserstoff dar. Langfristig wird jedoch erwartet, dass Metallhydride aufgrund ihrer hohen möglichen Speicherdichte und der Vorteile gegenüber der flüssigen und gasförmigen Speicherung in Punkto Sicherheit die beste on-board Speichermethode darstellen werden. Bis dahin besteht jedoch noch viel

Forschungsbedarf, um die optimalen Metalle zu finden, die hohe Speicherdichte, niedrige Desorptionstemperatur, schnelle Kinetik, niedrige Energieverluste, hohe Zyklenstabilität und lange Lebensdauer vereinen (Sakintuna et al., 2007).

Eine weitere Art der mobilen Speicherung ist die Speicherung in Aktivkohle. Die Aktivkohle befindet sich in einem Kryotank, der bei der Befüllung mit flüssigem Wasserstoff gekühlt werden muss. Der Wasserstoff wird in den Mikroporen flüssig und in den Makroporen gasförmig durch Physisorption gespeichert. Die Desorptionswärme ist hier gegenüber Metallhydriden relativ niedrig. Auch bei der Aktivkohlespeicherung kommt es dazu, dass der Wasserstoff mit der Zeit durch Erwärmung gasförmig wird und bei Überschreiten eines kritischen Drucks abgeblasen werden muss. Allerdings dauert es bei der Aktivkohlespeicherung sechsmal so lange, bis abgeblasen werden muss, als bei der Flüssigspeicherung (Burke et al., 2005).

Die wichtigsten technischen Daten aller angeführten mobilen Speichertechnologien sind in Tabelle 2.1 zusammengefasst.

Tabelle 2.1: Technische Daten mobiler Speicher (Altmann et al., 2004)

Typ	Speicherdichte	Parameter
Druckspeicher	1,8 kWh H_2/kg Speicher, 0,6-1,0 kWh H_2/l Speicher	p = 350-700 bar
Flüssigspeicher	3,5 kWh H_2/kg Speicher, 1,5 kWh H_2/l Speicher	T = 20 K
Metallhydride	0,4 kWh H_2/kg Speicher, 1,1 kWh H_2/l Speicher	T <353 K, p <30 bar
Nano-Metallhydride	1,1 kWh H_2/kg Speicher, 1,0 kWh H_2/l Speicher	T >423 K
Aktivkohle	1,4 kWh H_2/kg Speicher, 1,0 kWh H_2/l Speicher	T = 80 K, p = 40 bar

In der vorliegenden Arbeit wurde für die mobile Speicherung ein System mit gasförmiger Speicherung ausgewählt (entweder bei 350 bar oder bei 700 bar), da nach momentanem Stand der Technik, wie oben ausgeführt, die flüssige Speicherung zu energieintensiv und die Speicherung in Metallhydriden bzw. in Aktivkohle noch nicht ausgereift genug für einen Einsatz ist. Da ein Wechsel zwischen flüssigem und gasförmigem Zustand des Wasserstoffs innerhalb der Prozesskette energetisch ungünstig wäre, wurde auch die stationäre Speicherung gasförmig betrachtet.

2.2.2 Kompression

Da im Zuge dieser Arbeit nur gasförmiger Transport und gasförmige Speicherung berücksichtigt werden, wird an dieser Stelle nur die Kompression von Wasserstoff, nicht aber die Verflüssigung behandelt. Informationen zur Verflüssigung von Wasserstoff können der Literatur entnommen werden entnommen werden (siehe beispielsweise Altmann et al., 2004; Burke et al., 2005; Strategiekreis Wasserstoff, 2005).

Die Kompression von Wasserstoff kann mit Kolben-, Membran- oder Hydraulikkompressoren erfolgen. Die Ausführung der Kompressoren ist sehr ähnlich zu Erdgaskompressoren. Bei Einbau geeigneter Dichtungen für den Einsatz mit Wasserstoff können Erdgaskompressoren sogar direkt eingesetzt werden. Die Verdichtung erfolgt in mehreren Stufen mit Zwischenkühlung, womit Wirkungsgrade bis 80% erzielt werden können. Diese annähernd isotherme Verdichtung bewirkt auch, dass der Zusammenhang zwischen Druck und Verdichtungsarbeit logarithmisch verläuft. Daher sinken der Mehraufwand der Verdichtung mit steigendem Verdichterenddruck und damit auch die Verdichtungsarbeit bezogen auf die erzielte Druckdifferenz (Altmann et al., 2004; Burke et al., 2005; Strategiekreis Wasserstoff, 2005).

In der vorliegenden Arbeit wird die Wasserstoffkompression sowohl in der Wasserstoffproduktionsanlage als auch in der Wasserstofftankstelle berücksichtigt, wie in Kapitel 6 detailliert beschrieben wird. In der Produktionsanlage wird der Wasserstoff für den Transport zur Tankstelle komprimiert, in der Tankstelle selbst wird der Wasserstoff hingegen für die Befüllung in die Fahrzeugtanks auf den dafür erforderlichen Druck gebracht. In beiden Fällen, sowohl bei der Befüllung der Wasserstofftransportbehälter als auch bei der Befüllung der Fahrzeugtanks, kommt es zu einer Temperaturerhöhung und damit zu einer Volumenausdehnung des Wasserstoffs. Um nach der Temperaturabsenkung auf die vorgesehene Betriebstemperatur den gewünschten Betriebsdruck zu erhalten, müssen die Behälter daher auf einen höheren Druck als den Betriebsdruck befüllt werden. Um das zu erreichen muss daher auch auf einen höheren Druck komprimiert werden (DWV, 2003; Altmann et al., 2004). Die in der vorliegenden Arbeit verwendeten Druckdaten sind in Kapitel 6 angegeben.

2.2.3 Transport

Für den Transport von gasförmigem Wasserstoff stehen mehrere Optionen zur Verfügung. Für den Fall, dass die Wasserstoffproduktion direkt an der Tankstelle stattfindet, kann der Wasserstoff direkt über eine kurze Rohrleitung in den Wasserstoffspeicher der

Tankstelle geleitet werden. Diese Variante wird jedoch voraussichtlich eher selten auftreten. In den überwiegenden Fällen wird ein Transport über längere Strecken (>100 km) erforderlich sein. Für diesen Fall kann der Wasserstofftransport entweder in Druckbehältern auf Lastkraftwagen bzw. auf Güterzügen oder in Pipelines durchgeführt werden. Der Transport mit Güterzügen macht jedoch nur bei sehr weiten Entfernungen Sinn. Da in der vorliegenden Arbeit jedoch nur ein Transportradius von 100 km zwischen der Wasserstoffproduktion und der Tankstelle vorgesehen ist, wird diese Option nicht mitberücksichtigt.

Für den Transport mittels LKW wird der Wasserstoff in Druckgasflaschen befüllt, die einen Druck zwischen 160 und 200 bar aufweisen. Diese Flaschen können einzeln oder in Bündeln transportiert werden und werden üblicherweise an der Wasserstofftankstelle als stationäre Speicher genutzt. Daher wird nicht nur für jeden LKW sondern auch für jede Tankstelle eine Ladung an Druckgasflaschen benötigt (Simbeck et al., 2002; DWV, 2003; Altmann et al., 2004). Der Transport mittels LKW hat den Vorteil der flexiblen Streckenplanung und den Vorteil, dass dafür keine neue Infrastruktur benötigt wird.

Der Wasserstofftransport zwischen Wasserstoffproduktion und Tankstelle mittels Pipeline ist derzeit noch nicht wirtschaftlich durchführbar, da die Infrastruktur noch nicht vorhanden ist. Der Aufbau eines Wasserstoffnetzes wird voraussichtlich erst dann in Betracht gezogen werden, wenn abzusehen ist, dass sich die Wasserstofftechnologie tatsächlich gegenüber der erdölbasierten Fahrzeugtechnologie durchsetzen wird. Wasserstoffpipelines könnten mit einem Druck zwischen 30 und 120 bar betrieben werden, wobei etwas größere Rohrdurchmesser als für Erdgaspipelines erforderlich wären (Simbeck et al., 2002; Altmann et al., 2004; Strategiekreis Wasserstoff, 2005). Für den Aufbau eines Wasserstoffpipeline-Netzwerks kommen zu Beginn nur Strecken in Frage, die entlang einer hohen Dichte an Wasserstofftankstellen verlaufen. Beispiele dafür sind etwa Autobahnen oder innerstädtische Pipelines in Großstädten.

2.2.4 Tankstellen

Wie bereits in den vorangegangenen Kapiteln erwähnt, werden nur Tankstellen mit gasförmigem Wasserstoff betrachtet. Jede Tankstelle ist dafür ausgelegt, etwa 1.000 Fahrzeuge zu versorgen. Unter der Annahme, dass jedes Fahrzeug etwa 14.000 km pro Jahr zurücklegt und entweder 0,0078 kg H_2/km (Brennstoffzellenfahrzeug) oder 0,014 kg H_2/km (Fahrzeug mit H_2-Verbrennungskraftmotor) verbraucht (EUCAR et al., 2007), ergibt sich damit ein Wasserstoffumsatz von ca. 460 kg H_2/d für eine Wasserstofftankstelle.

Wie in Kapitel 2.2.3 erwähnt wurde, wird der Wasserstoff im Fall des LKW-Transportes zwischen Wasserstoffproduktion und Tankstelle zunächst in den für den Transport verwendeten Druckgasflaschen gespeichert. Anschließend wir der Wasserstoff in einem Kompressor auf den erforderlichen Druck für die Fahrzeugbefüllung gebracht und in einem stationären Speicher zwischengespeichert, um einen reibungslosen Betrieb der Zapfsäule gewährleisten zu können. Dieser Speicher ist so dimensioniert, dass er den durchschnittlichen Absatz einer Tankstelle in 3 Stunden speichert. Die letzte Komponente der Tankstelle ist der Zapfhahn, der den Wasserstoff in die Fahrzeuge füllt. Das Blockdiagramm einer Tankstelle ist in Abbildung 2.1 dargestellt.

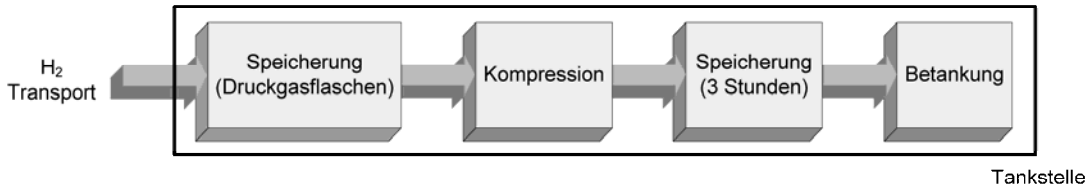


Abbildung 2.1: Blockdiagramm einer Wasserstofftankstelle

2.2.5 Fahrzeuge

Für den Einsatz von Wasserstoff im Automobilbereich kommen zwei Antriebskonzepte in Frage: Verbrennungsmotoren und Brennstoffzellen. Bei den Verbrennungsmotoren kann zwischen Motoren mit äußerer (Saugrohreinspritzung) und mit innerer Gemischbildung (Direkteinspritzung) unterscheiden werden, wobei das Konzept der inneren Gemischbildung erst etwa ab dem Jahr 2010 praktische Anwendung finden wird. Beide Motorentypen haben eine Leistungsdichte auf dem Niveau von Benzinmotoren und weisen nur bei höheren Lasten Stickoxide als relevante Emissionen auf. Mit Hilfe eines durchdachten Betriebsmanagements lassen sich auch diese Stickoxidemissionen unter den Grenzwert absenken. Dazu ist eine lastabhängige Änderung des Wasserstoff-Luft-Gemisches und der Einbau eines NO_x-Katalysators nötig (Strategiekreis Wasserstoff, 2005).

Als Brennstoffzellen werden im automobilen Bereich derzeit nur PEM-Brennstoffzellen (**P**roton **E**xchange **M**embrane Fuel Cell) eingesetzt, weil SOFC-Brennstoffzellen (**S**olid **O**xid **F**uel **C**ell) nicht in der Lage sind, schnellen Laständerungen zu folgen und daher nicht für den Einsatz in Fahrzeugen geeignet sind. Auf dem Gebiet der Brennstoffzellentechnik für Fahrzeuge wird noch intensiv geforscht, wobei hauptsächlich das Luftversorgungssystem, die

erforderliche Elektrodenbefeuchtung, die Regelung der Zellen und die Stack-Technologie weiterer Entwicklung bedürfen (Altmann et al., 2004; Strategiekreis Wasserstoff, 2005).

Brennstoffzellen für den Automotivbereich weisen zum heutigen Zeitpunkt bessere Wirkungsgrade als Verbrennungsmotoren auf. Darüber hinaus haben Brennstoffzellen ein besseres Teillastverhalten als Verbrennungsmotoren. Für den Einsatz in Fahrzeugen ist das gute Teillastverhalten besonders vorteilhaft, da ein Großteil aller Fahrten im Straßenverkehr im Teillastbereich stattfindet. Weitere Vorteile sind bessere Beschleunigungswerte bei gleicher Motorleistung und geringere Lärmentwicklung. Nachteile von PEM-Brennstoffzellen sind die Probleme beim Kaltstart sowie der Energieaufwand für die Herstellung, der noch etwa doppelt so hoch wie für Verbrennungsmaschinen ist. Bei der Umstellung auf eine Massenfertigung von Brennstoffzellen kann der benötigte Energiebedarf jedoch erheblich gesenkt werden (Altmann et al., 2004; Strategiekreis Wasserstoff, 2005).

Der Einsatz von Wasserstoff in Verbrennungsmotoren und PEM-Brennstoffzellen stellt spezielle Anforderungen an die Reinheit des Wasserstoffs. Vor allem Schwefel, Kohlenwasserstoffe und Kohlenmonoxid führen bei Brennstoffzellen zur „Vergiftung". Durch die Entwicklung verbesserter Anodenwerkstoffe und Katalysatormaterialen ist zu erwarten, dass vor allem die CO-Toleranz erhöht werden kann. Dennoch muss die ausreichende Abtrennung der Störgase gewährleistet werden (Dresselhaus et al., 2004).

Die Anforderungen an die Reinheit des Wasserstoffs als Brennstoff für Fahrzeuge sind bereits in Normen, wie beispielsweise der ISO 14687 (ISO, 2001), geregelt. Derzeit wird jedoch weltweit an neuen Regelungen der Wasserstoffqualität gearbeitet, die die Erfahrungen auf diesem Gebiet mit einfließen lassen. Ein Beispiel dafür ist die Verordnung des California Department of Food and Agriculture zur Spezifikation von Wasserstoff für die Verwendung in Verbrennungsmotoren und Brennstoffzellen in Fahrzeugen (California Department of Food and Agriculture, 2008). In dieser Verordnung ist eine Wasserstoffqualität von H_2 >99,97 vol% vorgesehen. Die ISO 14687 fordert hingegen für den Einsatz von gasförmigem Wasserstoff in mobilen Verbrennungsmotoren und Brennstoffzellen nur eine Reinheit von H_2 >98 mol%. Der Einsatz von flüssigem Wasserstoff in Fahrzeugen ist in dieser ISO-Norm nicht explizit vorgesehen. Die Bestimmungen für flüssigen Wasserstoff in Flug- und Raumfahrzeugen verlangen jedoch zumindest eine Reinheit von 99,995 mol%, womit die Anforderungen hier höher als bei der kalifornischen Verordnung sind (ISO, 2001; California Department of Food and Agriculture, 2008). In der vorliegenden Studie wurden aufgrund der Aktualität die Richtlinien der kalifornischen Verordnung (siehe Tabelle 2.2) als Qualitätskriterien für den erzeugten Wasserstoff gewählt.

Tabelle 2.2: Anforderungen an die Reinheit von Wasserstoff für Fahrzeuge (California Department of Food and Agriculture, 2008)

	Wert	
Wasserstoff, minimal	99,97	vol%
Summe Verunreinigungen, maximal	300	ppmv
Wasser, maximal	5	ppmv
Summe Kohlenwasserstoffe, maximal	2	ppmv
Sauerstoff, maximal	5	ppmv
Helium, maximal	300	ppmv
Stickstoff und Argon, maximal	100	ppmv
Kohlendioxid, maximal	2	ppmv
Kohlenmonoxid, maximal	0,2	ppmv
Summe Schwefelkomponenten, maximal	0,004	ppmv
Formaldehyde, maximal	0,01	ppmv
Ameisensäure, maximal	0,2	ppmv
Ammoniak, maximal	0,1	ppmv
Summe halogenierte Substanzen, maximal	0,05	ppmv
Partikelgröße, maximal	10	μm
Partikelkonzentration, maximal (bei 0 °C und 1 atm)	1	μg/l

3 Modellentwicklung

3.1 Verwendete Software

Die Simulationen wurden mit dem kommerziellen Prozesssimulationsprogramm IPSEpro®, Version 4.0, Build 874 durchgeführt. Dieses Programm besteht aus zwei Paketen (Perz et al., 2007):

- die Simulationsumgebung (*Process Simulation Environment – PSE*), in der die Fließbilder aufgebaut und die Simulationsrechnungen durchgeführt werden und
- die Modellentwicklungsumgebung (*Model Development Kit – MDK*), in der die Entwicklung von Modellen inklusive der zugehörigen Ströme stattfindet.

Die Simulation in IPSEpro *PSE* erfolgt auf Basis einer graphischen Benutzeroberfläche, in der die Modelle der einzelnen Prozesskomponenten durch graphische Symbole repräsentiert werden. Der Aufbau eines Prozesses kann daher sehr einfach durch das Platzieren der Symbole auf dem Fließbild (*Flowsheet*) und das Verbinden der Symbole durch Ströme erfolgen (siehe Abbildung 3.1). Nach Eingabe aller erforderlichen Daten für die Komponentenmodelle und die verbindenden Ströme erfolgt die Simulation des aufgebauten *Flowsheets*. Der Lösungsprozess läuft dabei semiparallel ab, was eine Kombination zwischen sequentiell modularem Lösungsansatz und gleichungsorientiertem Lösungsansatz darstellt (Perz, 1991). Dabei werden die thermodynamischen Daten ähnlich wie beim sequentiell modularen Ansatz ermittelt, d.h. die Berechnung erfolgt jeweils für eine Komponente nach der anderen mittels Übertragungsfunktionen, die den Zusammenhang zwischen Ein- und Ausgang darstellen. Die Massen- und Energiebilanzen werden hingegen nach dem gleichungsorientierten Ansatz gelöst, bei dem die Gleichungen explizit aufgestellt und parallel gelöst werden. Die genaue Vorgehensweise bei der Lösung der Simulationsaufgabe kann der Literatur (Perz, 1991) entnommen werden. Weitere Details zum *PSE*-Paket können dem Handbuch (SimTech, 2003c)entnommen werden.

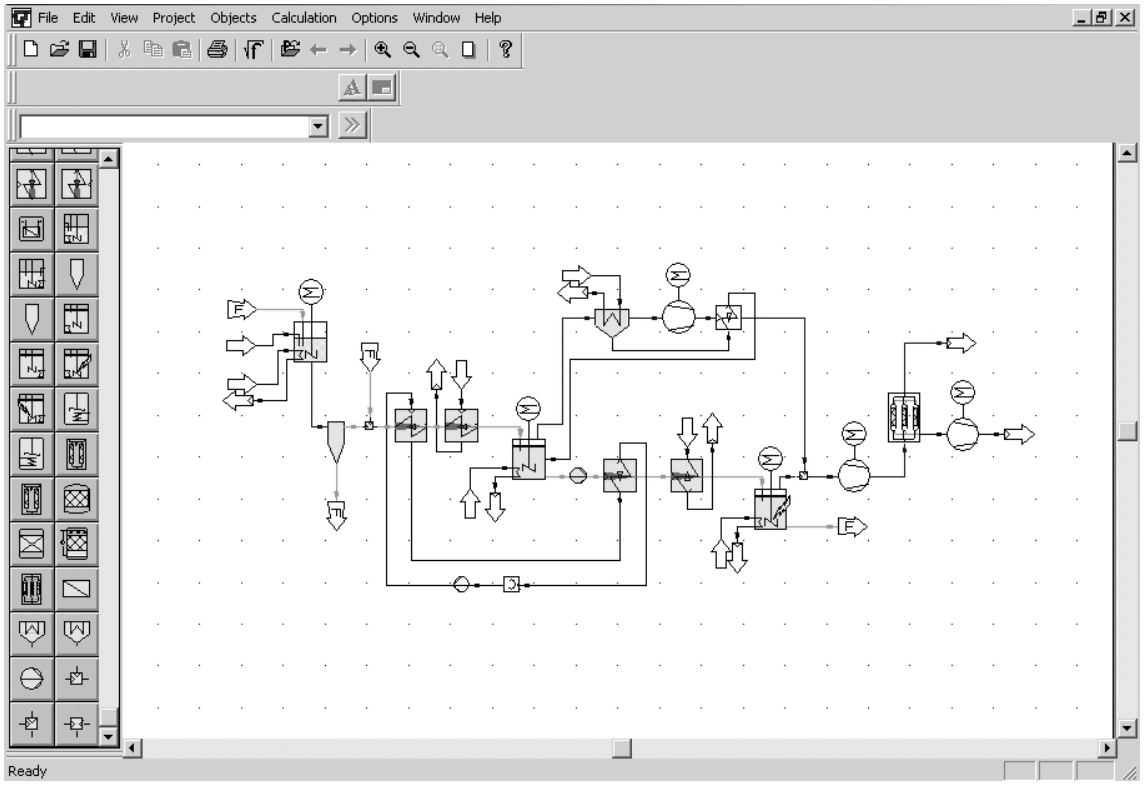


Abbildung 3.1: Process Simulation Environment

Im *Model Development Kit* werden die Modelle erstellt und in Modellbibliotheken zusammengefasst. Die Modelle umfassen dabei sowohl das graphische Layout als auch die mathematischen Gleichungen zur Beschreibung des Modellverhaltens (siehe Abbildung 3.2). In IPSEpro werden die folgenden drei Typen von Modellen unterschieden:

- *Units* (Grundoperationen),
- *Connections* (Verbindungen) und
- *Globals* (global verfügbare Informationen).

Die *Units* repräsentieren meist Prozesskomponenten wie Wärmetauscher oder Turbinen. Sie können jedoch auch rein fiktive Komponenten darstellen, wie beispielsweise Monitore, in denen die Zusammensetzungen von Strömen angezeigt werden. Innerhalb einer *Unit* können mehrere Untermodelle verfügbar sein, die beispielsweise unterschiedlich detaillierte mathematische Modelle des Apparates darstellen. Jedes der Modelle beinhaltet Variablen, Parameter und mathematische Gleichungen, die den Zusammenhang zwischen

den Eingängen, Ausgängen, Variablen und Parametern beschreiben, sowie Testabfragen, um die unsachgemäße Verwendung eines Modells zu verhindern. Darüber hinaus können in den Modellen auch tabellarische oder über Funktionen formulierte Zusammenhänge, Auswahlfelder sowie Aufrufe externer Funktionen implementiert werden.

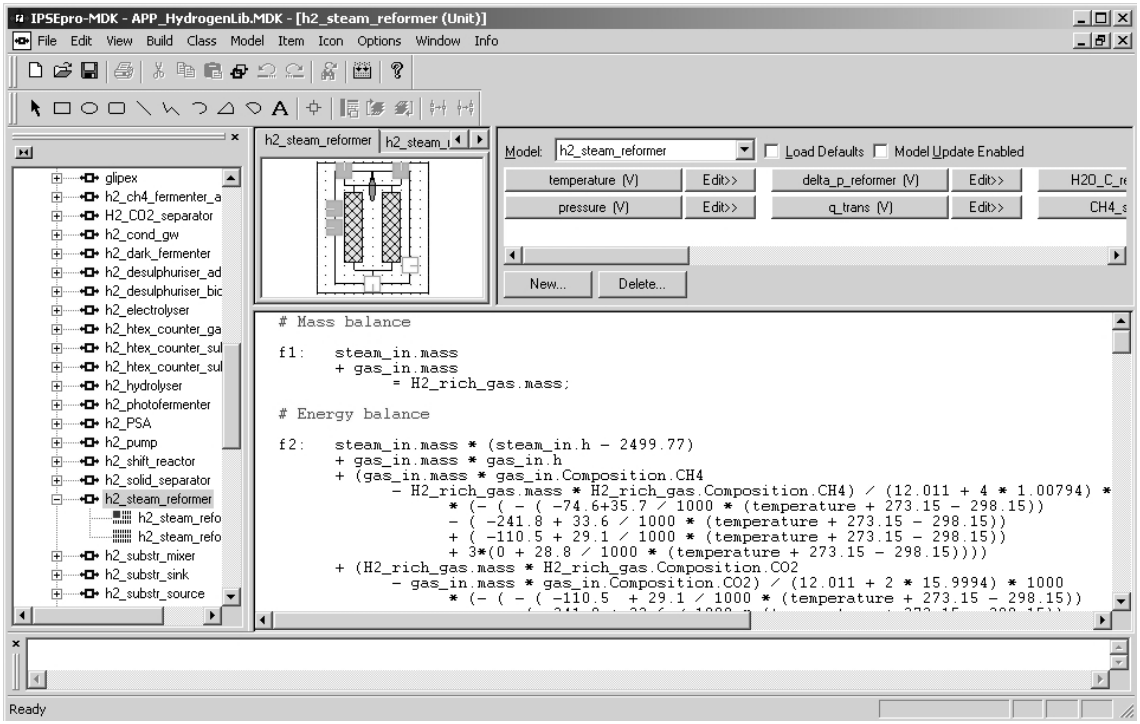


Abbildung 3.2: Model Development Kit

Die *Connections* stellen die Verbindung zwischen den *Units* dar und repräsentieren die Information, die zwischen den *Units* ausgetauscht wird, wie etwa Informationen über Druck, Temperatur, Massenstrom, Energiemenge und Ähnliches. Bei den *Connections* kann es sich sowohl um Stoffströme als auch um Energieströme handeln. Im Fall von Stoffströmen ist es meist erforderlich, den *Connections* ein oder mehrere *Globals* zuzuordnen, um die Art und Zusammensetzung des Stoffstroms zu definieren.

Die *Globals* definieren Informationen, die sowohl in *Units* als auch in *Connections* benötigt werden. Meist handelt es sich dabei um chemische Zusammensetzungen. Ein *Global* kann mit beliebig vielen *Connections* und *Units* verknüpft werden. Innerhalb eines *Flowsheets* kann etwa eine Vielzahl an Strömen dieselbe Zusammensetzung und damit dasselbe *Global* aufweisen, wenn in den beteiligten *Units* nur ihr Zustand aber nicht die Stromzusammensetzung geändert wird. Wird in einer *Unit* die Stromzusammensetzung

geändert, so müssen den ein- und austretenden Strömen auch unterschiedliche *Globals* zugeordnet werden.

Die Verknüpfung der chemischen Komponenten einer Bibliothek mit den benötigten Stoffdaten erfolgt durch den Aufruf externer Funktionen über DLLs (dynamic link libraries). In diesen Funktionen sind beispielsweise die Zusammenhänge für die Berechnung der Dichte, der Enthalpie oder der Entropie aus der Stromzusammensetzung und den Zustandsbedingungen beschrieben. DLLs können nicht nur für die Berechnung der Stoffdaten sondern auch für die Berechnung beliebiger anderer Daten herangezogen werden. Die Einbindung der DLLs kann in jeder der drei Modell-Typen (*Unit*, *Connection* oder *Global*) erfolgen. Weitere Details zum *Model Development Kit* können dem Handbuch entnommen werden (SimTech, 2003b).

Aufbauend auf den drei beschriebenen Modelltypen können eigene Bibliotheken erstellt, beziehungsweise vorhandene Modellbibliotheken erweitert oder modifiziert werden. In der vorliegenden Arbeit wurde die Standardbibliothek *APP_Lib* als Ausgangsbasis gewählt, die bereits alle benötigten Stoffdaten und Standard-*Units* wie Wärmetauscher, Gebläse und dergleichen beinhaltet. Diese Bibliothek wurde um neue Modelle für die Dampfreformierung von Methan, die Elektrolyse, die Biogasfermentation sowie die Dunkel- und Photofermentation erweitert. Darüber hinaus wurden Modelle für die benötigten Aufbereitungsschritte erstellt. Die neu entwickelten Modelle sowie die Modelle der Standardbibliothek *APP_Lib* wurden in einer neuen Wasserstoffbibliothek *APP_HydrogenLib* zusammengefasst. Alle erstellten Modelle werden in den nachfolgenden Kapiteln dargestellt.

Um detaillierte Daten für die Biomassevergasung nach dem FICFB-Prinzip zu erhalten, wurden zusätzlich Modelle verwendet, die bereits in IPSEpro® entwickelt wurden (Pröll et al., 2005a; Pröll et al., 2007a; Pröll et al., 2007b). Diese Modelle beruhen jedoch nicht auf der Standardbibliothek *APP_Lib*, sondern auf der eigens entwickelten Bibliothek *BG_Lib*. Diese Bibliothek wurde gegenüber der *APP_Lib* um die Gaskomponenten C_2H_4, HCl, HCN, N_2O, NH_3 und NO erweitert. Darüber hinaus wurden neue *Globals* für Feststoffe und organische Substanzen eingeführt. Um diese erweiterte Information der Stoffströme im Zuge der durchgeführten Simulationen nicht zu verlieren, wurden die Modelle für die Umsetzung des Vergasergases zu Wasserstoff innerhalb dieser *BG_Lib* entwickelt. Zu einem Großteil mussten hierfür nur die in der *APP_Lib* entwickelten Modelle auf die geänderte Stromstruktur angepasst werden (z.B. Dampfreformer, CO-Shift-Reaktor, PSA). Teilweise wurden aber auch eigene Modelle entwickelt, wie beispielsweise für die MEA-Wäsche, die nur im Zusammenhang mit dem Vergasergas eingesetzt wird.

3.2 Entwickelte *Connection*-Modelle

Im Zuge der Modellierung wurden zwei neue *Connection*-Modelle erstellt. Beide *Connections* repräsentieren verdünnte Biomasseströme, die in Fermentationsanlagen zum Einsatz kommen. Die Aufteilung in zwei verschiedene Typen von Strömen rührt daher, dass die Modelle für die reine Biogasfermentation nicht nur in der entwickelten Wasserstoff-bibliothek enthalten sind, sondern darüber hinaus auch in einer speziellen Biogasbibliothek implementiert wurden. Die Stromstruktur für die gekoppelte Dunkel- und Photofermentation sowie die gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation ist im Vergleich zur Stromstruktur der reinen Biogasfermentation komplexer aufgebaut, wie nachfolgend gezeigt wird. Würde innerhalb der Wasserstoffbibliothek in beiden Fällen das Modell des komplexeren Stromes gewählt, so wäre es nicht mehr möglich, Biogasanlagen, die mit der Biogasbibliothek entwickelt wurden, einfach in *Flowsheets* der Wasserstoffbibliothek zu übernehmen. Da diese Möglichkeit jedoch gewährleistet werden sollte, wurden für die beiden Technologien unterschiedliche *Connection*-Modelle entwickelt.

Nachfolgend werden nur die beiden neu entwickelten *Connection*-Modelle beschrieben. Die Standard-*Connections* der *APP_Lib* (*stream* für Gas- und Wasserströme und *shaft* für Energieströme) können dem Handbuch (SimTech, 2003a) entnommen werden. Die darüber hinaus verwendeten *Connections* für die entwickelten Modelle innerhalb der *BG_Lib* sind im Anhang (siehe Kapitel 11.1) erläutert.

3.2.1 *Connection*-Modell für die Biogasfermentation (*bio_stream*)

Das *Connection*-Modell, das für die Beschreibung des Substratstroms innerhalb der Biogasfermentationsanlage verwendet wurde, ist aus den in Tabelle 3.1 angegebenen Variablen und dem angegebenen *Global* aufgebaut und wurde *bio_stream* genannt.

Die in Tabelle 3.1 angegebenen Variablen *p*, *t*, *h* und *v* hängen ebenso voneinander ab wie die Variablen *w_water* und *w_biomass*. Von den vier Variablen *p*, *t*, *h* und *v* müssen daher nur zwei bekannt sein, die beiden anderen errechnen sich über externe Funktionen aus den Stoffdatenzusammenhängen. Zwischen den Variablen *w_water* und *w_biomass* besteht der Zusammenhang dagegen über die Massenbilanz F 3.1:

$$w_water + w_biomass = 1 \qquad \text{F 3.1}$$

Tabelle 3.1: Aufbau der *Connection bio_stream*

Bezeichnung	Beschreibung	Typ	Einheit
p	Druck	Variable	bar
t	Temperatur	Variable	°C
h	Enthalpie	Variable	kJ/kg
v	Spezifisches Volumen	Variable	m^3/kg
mass	Massenstrom	Variable	kg/s
w_water	Anteil Wasser am Gesamtstrom	Variable	kg/kg
w_biomass	Anteil Biomasse am Gesamtstrom	Variable	kg/kg
biomass	Zugeordnetes *Global*-Modell (optional)	*Global*	-

Das *Global biomass* wird in Kapitel 3.3.1 beschrieben und legt sowohl die chemische Zusammensetzung als auch das spezifische Volumen sowie die spezifische Wärmekapazität des Feststoffanteils des *bio_streams* fest. Wird in der *Connection bio_stream* kein *Global* ausgewählt, so besteht der Strom nur aus Wasser und der Wasseranteil des Stroms muss auf *w_water* = 1 gesetzt werden.

3.2.2 *Connection*-Modell für die Dunkel- und Photofermentation bzw. die Dunkel- und Biogasfermentation (*substrate*)

Das *Connection*-Modell für die Substratströme in Verbindung mit der Dunkelfermentation wurde *substrate* genannt. Der Aufbau dieses *Connection*-Modells ist in Tabelle 3.2 dargestellt.

Tabelle 3.2: Aufbau der *Connection substrate*

Bezeichnung	Beschreibung	Typ	Einheit
p	Druck	Variable	bar
t	Temperatur	Variable	°C
h	Enthalpie	Variable	kJ/kg
v	Spezifisches Volumen	Variable	m^3/kg
mass	Massenstrom	Variable	kg/s
substr_composition	Zugeordnetes *Global*-Modell	*Global*	-
substr_acid	Zugeordnetes *Global*-Modell (optional)	*Global*	-

Auch hier hängen wieder die Variablen *p*, *t*, *h* und *v* voneinander ab. Daher müssen wieder nur zwei der vier Variablen bekannt sein, die beiden anderen errechnen sich über die Stoffdatenzusammenhänge.

Das *Global substr_composition* definiert die Stromzusammensetzung (siehe Kapitel 3.3.2) und muss dem Strom zugewiesen werden. Das *Global substr_acid* ist hingegen optional und beschreibt die genaue Zusammensetzung der Säuren innerhalb der *Connection substrate* (siehe ebenfalls Kapitel 3.3.2).

3.3 Entwickelte *Global*-Modelle

Auch bei den *Globals* ist die Unterscheidung zwischen den Zusammensetzungen der Ströme der reinen Biogasfermentation und den Zusammensetzungen der Ströme der Dunkel- und Photofermentation bzw. der Dunkel- und Biogasfermentation erforderlich, um die Kompatibilität mit der Biogasbibliothek zu gewährleisten (vgl. Kapitel 3.2). Die Modelle der *Globals* für die beiden Fälle werden nachfolgend erläutert. Darüber hinaus wurde aus der Standardbibliothek *APP_Lib* das *Global composition* zur Beschreibung von Gasströmen verwendet, das im Handbuch (SimTech, 2003a) beschrieben ist. Die *Globals*, die für die entwickelten Modelle innerhalb der *BG_Lib* verwendet wurden, sind im Anhang (siehe Kapitel 11.1.2) beschrieben.

3.3.1 *Global*-Modell für die Biogasfermentation (*biomass*)

Für die Biogasfermentation wurde ein *Global biomass* erstellt, das den Feststoffanteil eines Biogassubstrats beschreibt. Das *Global* umfasst die chemische Zusammensetzung der trockenen Biomasse sowie die spezifische Wärmekapazität und das spezifische Volumen dieser trockenen Biomasse, wie in Tabelle 3.3 aufgelistet ist.

Tabelle 3.3: Aufbau des *Globals biomass*

Bezeichnung	Beschreibung	Typ	Einheit
myC	Massenanteil von C	Variable	kg/kg
myH	Massenanteil von H	Variable	kg/kg
myN	Massenanteil von N	Variable	kg/kg
myO	Massenanteil von O	Variable	kg/kg
myS	Massenanteil von S	Variable	kg/kg
myCl	Massenanteil von Cl	Variable	kg/kg
myAsh	Massenanteil der Asche	Variable	kg/kg
cp	Spezifische Wärmekapazität	Variable	kg/(kg*K)
v	Spezifisches Volumen	Variable	m^3/kg

Die Massenbilanz für das *biomass-Global* ergibt sich nach Formel F 3.2.

$$myC + myH + myN + myO + myS + myCl + myAsch = 1 \qquad \text{F 3.2}$$

3.3.2 *Global*-Modelle für die Dunkel- und Photofermentation (*substr_composition und substr_acid*)

Im Gegensatz zur Biogasfermentation gibt es im Fall der Dunkel- und Photofermentation sowie der Dunkel- und Biogasfermentation die Möglichkeit, dem Substratstrom zwei *Globals* zuzuordnen. Das verpflichtend festzulegende *Global substr_composition* legt die generelle Zusammensetzung des Substratsstroms fest, wobei neben den bekannten Komponenten C, H, N, O, S, Wasser und Asche auch festgelegt wird, welche Anteile an C, H und O in Form von Säuren beziehungsweise in Form von Glukose vorliegen. Darüber hinaus wird für den trockenen Feststoffanteil sowohl die spezifische Wärmekapazität als auch das spezifische Volumen definiert, wie Tabelle 3.4 zu entnehmen ist.

Tabelle 3.4: Aufbau des *Globals substr_composition*

Bezeichnung	Beschreibung	Typ	Einheit
myC	Massenanteil von C	Variable	kg/kg
myH	Massenanteil von H	Variable	kg/kg
myN	Massenanteil von N	Variable	kg/kg
myO	Massenanteil von O	Variable	kg/kg
myS	Massenanteil von S	Variable	kg/kg
myWater	Massenanteil des Wassers	Variable	kg/kg
myAsh	Massenanteil der Asche	Variable	kg/kg
cp_solid	Spezifische Wärmekapazität des Feststoffanteils	Variable	kg/(kg*K)
v_solid	Spezifisches Volumen des Feststoffanteils	Variable	m^3/kg
acid_C	Massenanteil C in Säuren an gesamtem C	Variable	kg/kg
acid_H	Massenanteil H in Säuren an gesamtem H	Variable	kg/kg
acid_O	Massenanteil O in Säuren an gesamtem O	Variable	kg/kg
glucose_C	Massenanteil C in Glukose an gesamtem C	Variable	kg/kg
glucose_H	Massenanteil H in Glukose an gesamtem H	Variable	kg/kg
glucose_O	Massenanteil O in Glukose an gesamtem O	Variable	kg/kg

Auch für dieses *Global* gibt es wieder eine Massenbilanz, die in Gleichung F 3.3 angegeben ist. Die Anteile an C, H und O, die in Form von Säuren und Glukose vorliegen, müssen in Summe kleiner oder gleich 1 sein, wie in den Gleichungen F 3.4 bis F 3.6 angeführt ist. Die über die Säuren und Glukose hinausgehenden Restmengen an C, H und O werden nicht genauer spezifiziert.

$$myC + myH + myN + myO + myS + myCl + myAsch = 1 \qquad \text{F 3.3}$$

$$acid_C + glucose_C \leq 1 \qquad \text{F 3.4}$$

$$acid_H + glucose_H \leq 1 \qquad \text{F 3.5}$$

$$acid_O + glucose_O \leq 1 \qquad \text{F 3.6}$$

Das zweite *Global substr_acid* kann optional ausgewählt werden und beschreibt die Zusammensetzung der Säuren. Dabei wird hier nur zwischen den bei der Dunkelfermentation am häufigsten auftretenden Säuren Essigsäure und Buttersäure unterschieden. Alle anderen Säuren wie etwa die Milchsäure, die meist nur in geringen Mengen auftreten, werden hier vernachlässigt. Der Aufbau des *substr_acid Globals* ist in Tabelle 3.5 dargestellt.

Tabelle 3.5: Aufbau des *Globals substr_acid*

Bezeichnung	Beschreibung	Typ	Einheit
acetic_C	Massenanteil C in Essigsäure an gesamtem C in Säuren	Variable	kg/kg
acetic_H	Massenanteil H in Essigsäure an gesamtem H in Säuren	Variable	kg/kg
acetic_O	Massenanteil O in Essigsäure an gesamtem O in Säuren	Variable	kg/kg
butyric_C	Massenanteil C in Buttersäure an gesamtem C in Säuren	Variable	kg/kg
butyric_H	Massenanteil H in Buttersäure an gesamtem H in Säuren	Variable	kg/kg
butyric_O	Massenanteil O in Buttersäure an gesamtem O in Säuren	Variable	kg/kg

Für die Anteile an C, H und O in den beiden Säuren gelten die in den Gleichungen F 3.7 bis F 3.9 angegebenen Massenbilanzen.

$$acetic_C + butyric_C = 1 \qquad \text{F 3.7}$$

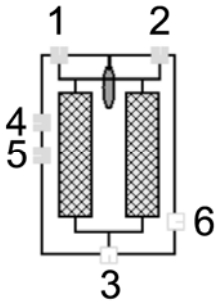
$$acetic_H + butyric_H = 1 \qquad \text{F 3.8}$$

$$acetic_O + butyric_O = 1 \qquad \text{F 3.9}$$

3.4 Entwickelte *Unit*-Modelle

3.4.1 Dampfreformer

Die symbolische Darstellung des Dampfreformers in IPSEpro sowie die Erläuterung der zugehörigen Anschlüsse sind in Abbildung 3.3 angegeben. Das Modell umfasst sowohl die chemische Umsetzung des Einsatzgases zu Wasserstoff als auch die Verbrennung des Brenngases zur Erzeugung der benötigten Reaktionswärme.



Anschluss		Connection
1	Eintritt Dampf	*stream* bzw. *c_st_g_*
2	Eintritt Gas	*stream* bzw. *c_st_g_*
3	Austritt H_2-reiches Gas	*stream* bzw. *c_st_g_*
4	Eintritt Verbrennungsluft	*stream* bzw. *c_st_g_*
5	Eintritt Brenngas	*stream* bzw. *c_st_g_*
6	Austritt Abgas	*stream* bzw. *c_st_g_*

Abbildung 3.3: Modell des allothermen Dampfreformers

Die Variablen, die innerhalb des Modells für die Dampfreformierung zur Beschreibung der Prozessbedingungen verwendet wurden, sind in Tabelle 3.6 aufgelistet. Die Variablen zur Beschreibung der chemischen Umsetzung im Reformer sind in Tabelle 3.7 angegeben.

Wie in Kapitel 2.1.1.1 ausgeführt wurde, handelt es sich bei den Reaktionen, die im Dampfreformer ablaufen, um Gleichgewichtsreaktionen. Allerdings muss es nicht zwangsläufig dazu kommen, dass jede Reaktion ihren Gleichgewichtszustand erreicht. In der Modellierung des Dampfreformers muss jedoch sichergestellt werden, dass das Reaktionsgleichgewicht einer Gleichung bei festgelegten Reaktionsbedingungen nicht überschritten wird. Aus diesem Grund wurden die Massenwirkungsgesetze der Reaktionen im Modell implementiert. In den implementierten Gleichungen werden die Gleichgewichts-konstanten mit einem Faktor multiliziert (siehe Gleichung F 3.10) der angibt, wie weit die

Reaktion vom Gleichgewicht entfernt ist. Dieser Faktor errechnet sich entweder aus der Gaszusammensetzung oder kann gesetzt werden.

$$K_{p,Reaktion} * Faktor = \frac{\prod (p_{Produkte})^{\upsilon_{Produkt}}}{\prod (p_{Edukte})^{\upsilon_{Edukt}}} \qquad \text{F 3.10}$$

Aufgrund der im Reaktor vorhandenen Gaszusammensetzung können einzelne Reaktionen, meist handelt es sich dabei um die Reaktionen von CH_4 mit CO_2, entgegen der in Kapitel 2.1.1.1 angegebenen Richtung ablaufen. In diesem Fall sind also die Konzentrationen der Produkte größer als im Fall des Gleichgewichtes, daher müssen die Faktoren der Gleichgewichtskonstanten der entsprechenden Gleichungen auch größer oder gleich 1 sein. Die zugehörigen Anteile der Substanzen, die an diesen Reaktionen teilnehmen, nehmen dementsprechend rein mathematisch negative Werte an. Laufen die Reaktionen in der angegebenen Richtung ab, so müssen die Gleichgewichtsfaktoren kleiner oder gleich 1 und die Anteile der teilnehmenden Substanzen positiv sein.

Tabelle 3.6: Variablen für Prozessbedingungen im Modell des Dampfreformers

Bezeichnung	Beschreibung	Einheit
temperature	Reaktionstemperatur (= T_3)	°C
pressure	Druck am Reformereintritt (=Min(p_1,p_2))	bar
delta_p_reformer	Druckverlust zwischen pressure und p_3	bar
q_trans	zwischen Reaktions- und Verbrennungsteil übertragene Wärme	kW
H_2O_C_relation	Verhältnis zwischen H_2O (Summe Gas 1 und 2) und C (in CH4, C2H4, C2H6, C3H8 und CO in Gas 1)	mol/mol
H_2_exit_dry	Volumsanteil H_2 im H_2-reichen Gas bezogen auf den trockenen Gasstrom	vol%
H_2_exit_wet	Volumsanteil H_2 im H_2-reichen Gas bezogen auf den feuchten Gasstrom	vol%
delta_p_air_comb	Druckverlust zwischen p_4 und p_6	bar
delta_p_comb	Druckverlust zwischen p_5 und p_6	bar
lambda_comb	Luftverhältniszahl im Verbrennungsteil	kg/kg
heating_value_comb	unterer, trockener Heizwert des Brenngases	kJ/kg
dt_out_htex	Temperaturdifferenz zwischen T_6 und T_3	°C

Die Faktoren für die implementierten Reaktionen sind in Tabelle 3.7 angegeben. In der Tabelle sind weiters die Variablen angegeben, die beschreiben, welcher Anteil an CH_4, C_2H_4, C_2H_6, C_3H_8 und CO nach den in Kapitel 2.1.1.1 angegebenen Reaktionsgleichungen

umgesetzt wird. Die wichtigsten Speziesbilanzen sind in den Gleichunge F 3.11-3.16 angegeben. Die Komponente *WATER* wird am Austritt 3 auf Null gesetzt, die Massenströme der Komponenten *AR*, *H2S*, *N2*, *O2* sowie *SO2* sind am Austritt 3 gleich dem Eintritt 2 gesetzt. In der Gesamtmassenbilanz für die Reaktionsseite des Modells ist festgelegt, dass der Massenstrom des austretenden H_2-reichen Gasstroms 3 gleich der Summe der Massenströme des eintretenden Dampfstromes 1 und des eintretenden Gasstromes 2 sein muss. Damit ergibts sich der Massenstrom für die Spezies *H2*, die nicht über eine eigene Speziesbilanz festgelegt wird.

$$\dot{m}_{C2H6,3} = \dot{m}_{C2H6,2} * \left(1 - \frac{C2H6_to_CO}{100}\right) \qquad \text{F 3.11}$$

$$\dot{m}_{C3H8,3} = \dot{m}_{C3H8,2} * \left(1 - \frac{C3H8_to_CO}{100}\right) \qquad \text{F 3.12}$$

$$\dot{m}_{CH4,3} = \dot{m}_{CH4,2} * \left(1 - \frac{CH4_to_CO}{100} - \frac{CH4_to_CO2}{100} - \frac{CH4_CO2_to_CO}{100} - \frac{CH4_3CO2_to_CO}{100}\right) \qquad \text{F 3.13}$$

$$\dot{m}_{CO,3} = \left(\dot{m}_{CO,2} + \dot{m}_{C2H6,2} * \frac{C2H6_to_CO}{100} * \frac{M_{CO}}{M_{C2H6}} * 2 + \dot{m}_{C3H8,2} * \frac{C3H8_to_CO}{100} * \frac{M_{CO}}{M_{C3H8}} * 3 + \dot{m}_{CH4,2} * \left(\frac{CH4_to_CO}{100} + \frac{CH4_CO2_to_CO}{100} * 2 + \frac{CH4_3CO2_to_CO}{100} * 4\right) * \frac{M_{CO}}{M_{CH4}}\right) * \left(1 - \frac{CO_to_CO2}{100}\right) \qquad \text{F 3.14}$$

$$\dot{m}_{CO2,3} = \dot{m}_{CO2,2} + \left(\dot{m}_{CO,2} + \dot{m}_{C2H6,2} * \frac{C2H6_to_CO}{100} * \frac{M_{CO}}{M_{C2H6}} * 2 \right.$$
$$+ \dot{m}_{C3H8,2} * \frac{C3H8_to_CO}{100} * \frac{M_{CO}}{M_{C3H8}} * 3$$
$$+ \dot{m}_{CH4,2} * \left(\frac{CH4_to_CO}{100} + \frac{CH4_CO2_to_CO}{100} * 2 \right.$$
$$\left. \left. + \frac{CH4_3CO2_to_CO}{100} * 4 \right) * \frac{M_{CO}}{M_{CH4}} \right) \qquad \text{F 3.15}$$
$$* \frac{CO_to_CO2}{100} * \frac{M_{CO2}}{M_{CO}}$$
$$+ \dot{m}_{CH4,2} * \left(\frac{CH4_to_CO2}{100} - \frac{CH4_CO2_to_CO}{100} \right.$$
$$\left. - \frac{CH4_3CO2_to_CO}{100} * 3 \right) * \frac{M_{CO2}}{M_{CH4}}$$

$$\dot{m}_{H2O,3} = \dot{m}_{H2O,2} + \dot{m}_1 - \dot{m}_{C2H6,2} * \frac{C2H6_to_CO}{100} * \frac{M_{H2O}}{M_{C2H6}} * 2$$
$$- \dot{m}_{C3H8,2} * \frac{C3H8_to_CO}{100} * \frac{M_{H2O}}{M_{C3H8}} * 3$$
$$- \dot{m}_{CH4,2} * \left(\frac{CH4_to_CO}{100} * 1 + \frac{CH4_CO2_to_CO}{100} * 2 \right.$$
$$\left. - \frac{CH4_3CO2_to_CO}{100} * 2 \right) * \frac{M_{H2O}}{M_{CH4}} \Bigg)$$
$$+ \left(\dot{m}_{CO,2} + \dot{m}_{C2H6,2} * \frac{C2H6_to_CO}{100} * \frac{M_{CO}}{M_{C2H6}} * 2 \right. \qquad \text{F 3.16}$$
$$+ \dot{m}_{C3H8,2} * \frac{C3H8_to_CO}{100} * \frac{M_{CO}}{M_{C3H8}} * 3$$
$$+ \dot{m}_{CH4,2} * \left(\frac{CH4_to_CO}{100} + \frac{CH4_CO2_to_CO}{100} * 2 \right.$$
$$\left. \left. + \frac{CH4_3CO2_to_CO}{100} * 4 \right) * \frac{M_{CO}}{M_{CH4}} \right)$$
$$* \frac{CO_to_CO2}{100} * \frac{M_{H2O}}{M_{CO}}$$

Tabelle 3.7: Variablen für die chemische Umsetzung im Modell des Dampfreformers

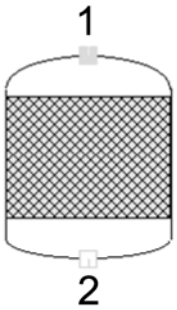
Bezeichnung	Beschreibung	Einheit
CH_4_to_CO	Anteil CH_4 der nach Reaktion F 2.1 reagiert	%
C_2H_4_to_CO (nur in BG_Lib)	Anteil C_2H_4 der nach Reaktion F 2.1 reagiert	%
C_2H_6_to_CO	Anteil C_2H_6 der nach Reaktion F 2.1 reagiert	%
C_3H_8_to_CO	Anteil C_3H_8 der nach Reaktion F 2.1 reagiert	%
CH_4_to_CO_2	Anteil CH_4 der nach Reaktion F 2.2 reagiert	%
CH_4_CO_2_to_CO	Anteil CH_4 der nach Reaktion F 2.3 reagiert	%
CH_4_3CO_2_to_CO	Anteil CH_4 der nach Reaktion F 2.4 reagiert	%
CO_to_CO_2	Anteil CO der nach Reaktion F 2.5 reagiert	%
CH_4_toCOEqu	Faktor für Entfernung vom Gleichgewicht in F 2.7	-
C_2H_4Equ (nur in BG_Lib)	Faktor für Entfernung vom Gleichgewicht in F 2.8	-
C_2H_6Equ	Faktor für Entfernung vom Gleichgewicht in F 2.9	-
C_3H_8Equ	Faktor für Entfernung vom Gleichgewicht in F 2.10	-
CH_4_toCO_2Equ	Faktor für Entfernung vom Gleichgewicht in F 2.11	-
CH_4_CO_2Equ	Faktor für Entfernung vom Gleichgewicht in F 2.12	-
CH_4_3CO_2Equ	Faktor für Entfernung vom Gleichgewicht in F 2.13	-
CO_Equ	Faktor für Entfernung vom Gleichgewicht in F 2.14	-

Die referenzierten Formeln sind Kapitel 2.1.1.1 zu entnehmen.

Bei der energetischen Bilanzierung der Reaktionsseite wurden sowohl die Reaktionsenthalpien der Reformierungsreaktionen als auch der Shift-Reaktion mitbilanziert. Die Reaktionsenthalpien wurden aus den temperaturabhängigen Standardbildungsenthalpien der an der Reaktion beteiligten Komponenten berechnet. Dazu wurden aus der Literatur entnommene Daten der Standardbildungsenthalpien (Lide, 2005/2006) durch Polynome 4. Ordnung modelliert und diese Polynome im Modell implementiert. Die Verknüpfung der energetischen Bilanzierung der Reaktionsseite mit der Verbrennungsseite erfolgte über die Berechnung der zwischen den beiden Seiten ausgetauschte Wärmemenge *q_trans*. Für die Modellierung der Verbrennungsseite wurde der Gleichungssatz der Gasbrennkammer *combustor_c* der *APP_Lib* verwendet.

3.4.2 Wassergas-Shift-Reaktor

Die symbolische Darstellung des Wassergas-Shift-Reaktors ist in Abbildung 3.4 gezeigt. Der Reaktor besitzt nur einen Anschluss für den Gaseintritt und einen Anschluss für den Gasaustritt.



Anschluss		Connection
1	Eintritt Gas	*stream*
2	Austritt Gas	*stream*

Abbildung 3.4: Modell des Wassergas-Shift-Reaktors

In Tabelle 3.8 sind die Variablen des Modells angegeben. Neben dem Druckverlust über den Reaktor und den Werten für den Wasserstoffanteil im austretenden Gasstrom gibt es auch in diesem Modell wieder zwei Variablen, die die chemische Umsetzung im Reaktor beschreiben. Im Reaktor findet nur die Wassergas-Shift-Reaktion statt, womit sich auch nur die Mengen der daran beteiligten Gase CO, H_2O, CO_2 und H_2 im Modell ändern (vgl. Reaktionsgleichung F 2.5 in Kapitel 2.1.1.1). Die Speziesbilanzen für die Komponenten CO, CO_2 sowie H_2O sind in den Gleichungen F 3.17-3.19 angeführt. Für alle anderen Gaskomponenten entspricht der eintretende Komponentenmassenstrom auch dem austretenden Komponentenmassenstrom. Nur die Komponente *WATER* wird im austretenden Gasstrom 2 auf Null gesetzt. Der gesamte austretende Massenstrom 2 muss dabei dem gesamten eintretenden Massenstrom 1 entsprechen, womit sich der Massenstrom für H_2 ergibt, der nicht über eine Speziesbilanz definiert ist.

$$\dot{m}_{CO,2} = \dot{m}_{CO,1} * \left(1 - \frac{CO_conversion}{100}\right) \qquad \text{F 3.17}$$

$$\dot{m}_{CO2,2} = \dot{m}_{CO2,1} + \left(\dot{m}_{H2,2} - \dot{m}_{H2,1}\right) * \frac{M_{CO2}}{M_{H2}} \qquad \text{F 3.18}$$

$$\dot{m}_{H2O,2} = \dot{m}_{H2O,1} - \left(\dot{m}_{H2,2} - \dot{m}_{H2,1}\right) * \frac{M_{H2O}}{M_{H2}} \qquad \text{F 3.19}$$

Die Variable *CO_conversion* gibt an, welcher Anteil der in den Reaktor eintretenden Menge an CO nach der entsprechenden Reaktionsgleichung umgesetzt wird. Um zu verhindern, dass im Reaktor das Reaktionsgleichgewicht bei den eingestellten Reaktionsbedingungen überschritten wird, ist auch in diesem Modell ein Faktor (Variable *FracEqu*) im Massenwirkungsgesetz entsprechend Gleichung F 3.10 (siehe Kapitel 3.4) vorgesehen, der nicht größer als 1 werden darf.

Tabelle 3.8: Variablen für das Modell des Wassergas-Shift-Reaktors

Bezeichnung	Beschreibung	Einheit
pressure_drop	Druckverlust zwischen p_1 und p_2	bar
H_2_exit_dry	Volumsanteil H_2 im H_2-reichen Gas bezogen auf den trockenen Gasstrom	vol%
H_2_exit_wet	Volumsanteil H_2 im H_2-reichen Gas bezogen auf den feuchten Gasstrom	vol%
CO_conversion	Anteil CO der nach Reaktion F 2.5 (siehe Kapitel 2.1.1.1) reagiert	%
FracEqu	Faktor für Entfernung vom Gleichgewicht für Reaktion F 2.5 (siehe Kapitel 2.1.1.1)	-

In der Energiebilanz des Modells des Wassergas-Shift-Reaktors wurde die Reaktionswärme der Shift-Reaktion berücksichtigt. Wie bereits bei der Modellierung des Dampfreformers wurde die Reaktionswärme auch hier aus den temperaturabhängigen Standardbildungsenthalpien der beteiligten Komponenten berechnet. Dazu wurden die Literaturdaten der Standardbildungsenthalpien (Lide, 2005/2006) wieder durch Polynome 4. Ordnung abgebildet und im Modell implementiert.

3.4.3 Alkalische Elektrolyse

Das Modell der alkalischen Elektrolyse betrachtet nur das Gesamtmodul und berücksichtigt nicht, dass im realen Fall eine Serienschaltung einzelner Zellblöcke vorliegt. Bei der Modellierung der Elektrolyse wurde davon ausgegangen, dass alle austretenden Ströme die Temperatur und den Druck des Elektrolyseurs aufweisen. Darüber hinaus sind die beiden entstehenden Gasströme entsprechend der vorliegenden Temperatur mit Wasserdampf gesättigt. Eine mögliche Verdampfung des alkalischen Elektrolyten wurde ausgeschlossen. Das Symbol des Modells der alkalischen Elektrolyse ist in Abbildung 3.5 dargestellt.

In einer realen Anlage wird nur ein Teil des eingebrachten Wassers zu Wasserstoff und Sauerstoff umgesetzt. Daher steht in diesem Modell die Variable *water_convers* zur

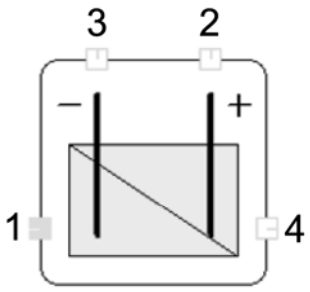
Verfügung (siehe Tabelle 3.9), mit deren Hilfe der Anteil an Wasser festgelegt werden kann, der zu H_2 und ½ O_2 umgesetzt wird. Die Gesamtwasserbilanz ist in Gleichung F 3.20 dargestellt. Sie berücksichtigt auch die wasserdampfsättigung der austretenden Gasströme.

$$\dot{m}_4 = \dot{m}_1 * \left(1 - \frac{water_convers}{100}\right) - \dot{m}_{H2O,2} - \dot{m}_{H2O,3} \qquad \text{F 3.20}$$

In den austretenden Gasströmen werden alle Komponenten bis auf H_2, O_2 und H_2O auf Null gesetzt. Die Speziesbilanz für H_2 im wasserstoffreichen Gasstrom 3 ist in Gleichung F 3.21 angeführt. Die Wasserdampfanteile in den beiden austretenden Gasströmen sind über die druck- und temperaturabhängige Wasserdampfsättigung bestimmt und werden mittels externer Funktionen berechnet.

$$\dot{m}_{H2,3} = \dot{m}_1 * \frac{water_convers}{100} * \frac{M_{H2O}}{M_{H2}} - \dot{m}_2 * \frac{H2_purity}{100} * \frac{\frac{\dot{m}_{H2,2}}{M_{H2}} + \frac{\dot{m}_{O2,2}}{M_{O2}} + \frac{\dot{m}_{H2O,2}}{M_{H2O}}}{\frac{\dot{m}_2}{M_{H2}}} \qquad \text{F 3.21}$$

In der Gesamtmassenbilanz ist festgelegt, dass die Summe der Massenströme der austretenden Ströme 2, 3 und 4 dem eintretenden Massenstrom 1 entsprechen muss. Die Massenströme für O_2 in den beiden austretenden Gasströmen 2 und 3 sowie für H_2 im austretenden Gasstrom 2 sind nicht über Speziesbilanzen definiert und ergeben sich über die Gesamtmassenbilanz sowie die Gesamtwasserbilanz im Modell.



Anschluss		Connection
1	Eintritt Wasser	*stream*
2	Austritt H_2-reiches Gas	*stream*
3	Austritt O_2-reiches Gas	*stream*
4	Austritt Wasser	*stream*

Abbildung 3.5: Modell der alkalischen Elektrolyse

Weiters muss die Menge an elektrischer Energie vorgegeben werden, die für den Betrieb der Anlage benötigt wird. Dieser Wert beinhaltet dabei nicht nur den Strombedarf für

die reine elektrolytische Umsetzung, sondern die gesamte Menge an elektrischer Energie, die innerhalb der Elektrolyseanlage benötigt wird. Dazu gehört auch die Energie, die für die Aufbereitung des Wassers, die Aufbereitung des Elektrolyten, eine eventuelle Kompression der Gase und dergleichen benötigt wird. Innerhalb des Modells kann die benötigte Menge an elekrischer Energie entweder durch Angabe des absoluten oder eines spezifischen Energiebedarfs, bezogen auf ein Kilogramm bzw. auf einen Normkubikmeter an erzeugtem Wasserstoff, erfolgen.

Tabelle 3.9: Variablen für das Modell der alkalischen Elektrolyse

Bezeichnung	Beschreibung	Einheit
pressure	Betriebsruck der Elektrolyse ($=p_1=p_2=p_3=p_4$)	bar
temperature	Betriebstemperatur der Elektrolyse	°C
water_convers	Anteil des umgesetzten Wassers	%
spec_energy_kg	el. Energieverbrauch pro kg H_2 in Gas 2	kWh/kg
spec_energy_m³	el. Energieverbrauch pro Nm^3 H_2 in Gas 2	kWh/Nm^3
el_energy	el. Energieverbrauch absolut	kW
H_2_purity	Volumsanteil H_2 im H_2-reichen Gas bezogen auf den trockenen Gasstrom 2	vol%
O_2_purity	Volumsanteil O_2 im O_2-reichen Gas bezogen auf den trockenen Gasstrom 3	vol%

In realen Elektrolyse-Modulen ist es nicht möglich, reine Wasserstoff- und Sauerstoffströme zu erzeugen. Beide Ströme sind nicht nur mit Wasserdampf gesättigt, sondern weisen auch Verunreinigungen durch den jeweils anderen Stoff auf. Um diese Tatsache zu berücksichtigen, gibt es in dem entwickelten Modell die beiden Variablen *H_2-purity* und *O_2-purity*, die die Reinheit der beiden Ströme und damit indirekt die Verunreinigungen mit O_2 bzw. H_2 angeben. Die formelmäßigen Zusammenhänge für diese beiden Variablen sind in den Gleichungen 3.22 und 3.23 dargestellt.

$$H2_purity = \frac{\frac{\dot{m}_{H2,2}}{M_{H2}}}{\frac{\dot{m}_{H2,2}}{M_{H2}} + \frac{\dot{m}_{O2,2}}{M_{O2}}} * 100 \qquad \text{F 3.22}$$

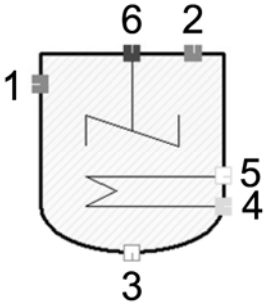
$$O2_purity = \frac{\frac{\dot{m}_{O2,3}}{M_{O2}}}{\frac{\dot{m}_{H2,3}}{M_{H2}} + \frac{\dot{m}_{O2,3}}{M_{O2}}} * 100 \qquad \text{F 3.23}$$

Die Energiebilanz des Modells berücksichtigt die Energieinhalte aller ein- und austretenden Ströme sowie die benötigte Energie zur wasserdampfsättigung der beiden austretenden Gasströme.

3.4.4 Maische-Behälter

Im vorliegenden Modell des Maische-Behälters (Symbolische Darstellung siehe Abbildung 3.6) finden keine Reaktionen statt, es kommt lediglich zu einer Mischung von Biomassesubstrat und Wasser.

Der Massenstrom am Austritt 3 stellt die Summe der Massenströme der Eintritte 1 und 2 dar. Bei der energetischen Bilanzierung wird davon ausgegangen, dass der Austritt 3 die Betriebstemperatur des Maischebehälters aufweist. Die Variable *q_demand* im Modell des Maische-Behälters (siehe Tabelle 3.10) ermöglicht die Angabe eines zusätzlichen Wärmebedarfs, der etwa durch Wärmeverluste über die Behälteroberfläche entstehen kann. Damit ergibt sich die über den Wärmetauscher bereitzustellende Wärmemenge *q_trans* als Summe der Energie, die für die Aufwärmung der Eintrittsströme 1 und 2 auf Betriebstemperatur erforderlich ist, und des zusätzlichen Wärmebedarfs *q_demand*.



Anschluss		Connection
1	Eintritt Substrat	*biomass*
2	Eintritt Wasser	*biomass*
3	Austritt angemaischtes Substrat	*biomass*
4	Eintritt Wasser WT (optional)	*stream*
5	Austritt Wasser WT (optional)	*stream*
6	Anschluss Rührermotor (optional)	*shaft*

Abbildung 3.6: Modell des Maische-Behälters

In dem entwickelten Modell ist es möglich, optional die Ströme der Heizseite (Anschlüsse 4 und 5) anzuschließen. Wird diese Option genutzt, so werden die Variablen *dt_in_htex* und *dt_out_htex* sowie die Massen- und Energiebilanz für diese Anschlussseite berechnet. Der eintretende Heizstrom 4 weist dabei den gleichen Massenstrom wie der austretende Strom 5 auf. Der Energieinhalt des Heizstromes 4 liegt hingegen um die ausgetauschte Wärmemenge *q_trans* höher als der des austretenden, abgekühlten Stromes 5.

Tabelle 3.10: Variablen für das Modell des Maische-Behälters

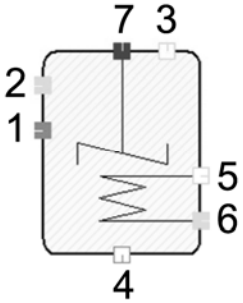
Bezeichnung	Beschreibung	Einheit
operating_p	Betriebsruck der Anmaischung (=p_3)	bar
operating_t	Betriebstemperatur der Anmaischung (=T_3)	°C
delta_p_htex	Druckverlust zwischen p_4 und p_5	bar
dt_in_htex	Temperaturdifferenz zwischen T_5 und T_1	°C
dt_out_htex	Temperaturdifferenz zwischen T_4 und T_3	°C
q_trans	mit Wärmetauscher übertragene Wärme	kW
q_demand	zusätzlicher Wärmebedarf (z.B. für Ausgleich von Wärmeverlusten)	kW
spec_power	pro m³ Maischevolumen benötigte Rührerleistung	kW/m³
volume	Volumen der Maische im Behälter	m³

Die beiden Temperaturdifferenzen *dt_in_htex* und *dt_out_htex* (siehe Tabelle 3.10) dienen zur Überprüfung der Realisierbarkeit des Wärmeaustausches zwischen dem Maischebehälter und dem angeschlossenen Heizstrom. Werden die beiden Anschlüsse der Heizseite nicht verwendet, so müssen die beiden Variablen *dt_in_htex* und *dt_out_htex* aus rechentechnischen Gründen gesetzt werden. Dabei ist der eingegebene Zahlenwert irrelevant, da er nicht weiter verwendet wird. Gleiches gilt für die Variable *delta_p_htex*, die nur bei angeschlossenen Strömen 4 und 5 zur Berechnung des Druckverlustes zwischen diesen beiden Strömen herangezogen wird.

Es besteht weiters die Möglichkeit, das Modell des Maische-Behälters am Anschluss 6 mit einem Rührermotor zu verbinden. In diesem Fall berechnet sich die benötigte Rührermotorleistung aus dem Produkt der beiden Werte spezifische Rührermotorleistung *spec_power* und zu rührendes Volumen der Maische *volume*. Wird kein Rührermotor angeschlossen, so sind die beiden Werte wieder aus rechentechnischen Gründen auf beliebige Werte zu setzen.

3.4.5 Biogasfermentation

Die Biogasfermentation besteht in der vorliegenden Arbeit aus zwei Stufen: einem Fermenter und einem Nachgärbehälter. Für die Modellierung wurde davon ausgegangen, dass in den beiden Stufen die gleichen Vorgänge ablaufen. Der Unterschied besteht lediglich darin, dass in die zweite Stufe neben dem Biomassestrom auch ein Biogasstrom eintritt und die Umsatzfaktoren in den beiden Stufen unterschiedlich sind. Aus diesem Grund wurde nur ein Modell erstellt, das einen optionalen Anschluss für einen Biogasstrom aufweist. Die symbolische Darstellung des Modells ist Abbildung 3.7 zu entnehmen.



Anschluss		Connection
1	Eintritt Substrat	*biomass*
2	Eintritt Gas	*stream*
3	Austritt Biogas	*stream*
4	Austritt Schlempe	*biomass*
5	Eintritt Wasser WT (optional)	*stream*
6	Austritt Wasser WT (optional)	*stream*
7	Anschluss Rührermotor (optional)	*shaft*

Abbildung 3.7: Modell des Biogasfermenters

Das entwickelte Modell der Biogasfermentation beruht auf der Formel von Buswell (F 2.17, siehe Kapitel 2.1.3). Diese Formel geht von einem vollständigen Umsatz der Biomasse aus. Wie bereits in Kapitel 2.1.3 erläutert, stimmt die Zusammensetzung des produzierten Biogases oft nicht mit der nach der Buswell-Gleichung ermittelten Zusammensetzung überein. Darüber hinaus kommt es meist auch nicht zu einer vollständigen Umsetzung des gesamten vorhandenen Substrates. Um diese Tatsache berücksichtigen zu können, wurden im vorliegenden Modell Produktionsfaktoren für CO_2 und CH_4 implementiert, die die nach Buswell errechneten maximal möglichen Mengen abmindern und daher in jedem Fall kleiner als 1 sein müssen. Damit ergibt sich eine modifizierte Buswell-Gleichung, die über die Gleichungen F 3.24 bis F 3.27 definiert ist.

$$xC_nH_aO_b + yH_2 + zO \rightarrow prod_CO2\left(\frac{n}{2} - \frac{a}{8} + \frac{b}{4}\right)CO_2 + prod_CH4\left(\frac{n}{2} + \frac{a}{8} - \frac{b}{4}\right)CH_4 \qquad \text{F 3.24}$$

$$x = \frac{prod_CO2}{n} * \left(\frac{n}{2} - \frac{a}{8} + \frac{b}{4}\right) + \frac{prod_CH4}{n} * \left(\frac{n}{2} + \frac{a}{8} - \frac{b}{4}\right) \qquad \text{F 3.25}$$

$$y = \frac{prod_CH4 * \left(\frac{n}{2} + \frac{a}{8} - \frac{b}{4}\right) * 4 - x * a}{2} \qquad \text{F 3.26}$$

$$z = prod_CO2 * \left(\frac{n}{2} - \frac{a}{8} + \frac{b}{4}\right) * 2 - x * b \qquad \text{F 3.27}$$

Es wird vorausgesetzt, dass der für den Umsatz des in der Biomasse enthaltenen Schwefels zu H_2S benötigte Wasserstoff aus der Biomasse stammt und dass die Reaktion nach der simplen und fiktiven Reaktionsgleichung F 3.28 abläuft.

$$2H + S \rightarrow H_2S \qquad \text{F 3.28}$$

Da im Fermenter nicht der gesamte im Substrat enthaltene Schwefel zu Schwefelwasserstoff umgesetzt wird, ist im Modell der Parameter *residual_S* vorgesehen (siehe Tabelle 3.11), mit dem der Anteil des eintretenden Schwefels festgelegt werden kann, der bei der Fermentation nicht zu Schwefelwasserstoff umgesetzt wird.

Tabelle 3.11: Variablen für das Modell des Biogasfermenters

Bezeichnung	Beschreibung	Einheit
operating_p	Betriebsruck des Fermenters ($=p_3=p_4$)	bar
operating_t	Betriebstemperatur des Fermenters ($=T_3=T_4$)	°C
delta_p_htex	Druckverlust zwischen p_5 und p_6	bar
dt_in_htex	Temperaturdifferenz zwischen T_5 und T_1	°C
dt_out_htex	Temperaturdifferenz zwischen T_6 und T_4	°C
n	Molzahl für C in Gleichung F 3.24	kmol/s
a	Molzahl für H in Gleichung F 3.24	kmol/s
b	Molzahl für O in Gleichung F 3.24	kmol/s
prod_CH4	Produktionsfaktor für CH_4 nach F 3.24	-
prod_CO2	Produktionsfaktor für CO_2 nach F 3.24	-
residual_S	Anteil an S im Substrat, der nicht zu H_2S umgesetzt wird	-
q_trans	mit Wärmetauscher übertragene Wärme	kW
q_demand	zusätzlicher Wärmebedarf (z.B. für Ausgleich von Wärmeverlusten)	kW
residence_time	Verweilzeit des Substrates im Fermenter	d
mash_volume	Volumen der Maische im Behälter	m^3
spec_power	pro m^3 Maischevolumen benötigte Rührerleistung	kW/m^3
gas_per_day	Biogasertrag pro Tag	Nm^3/d
gas_efficiency	Biogasertrag pro kg trockenem Substrat	Nm^3/kg

Die Gesamtmassenbilanz des Fermenters stellt sicher, dass die Summe der eintretenden Ströme (1 und optional 2) gleich der Summe der austretenden Ströme (3 und 4) ist. Die Bilanzierung der einzelnen Biomasse- und Gassubstanzen erfolgt über die oben ausgeführten Reaktionsgleichungen und die zugehörigen Variablen sowie die Bedingung, dass der austretende Biogasstrom 3 mit Wasserdampf gesättigt ist. Für den Fall, dass der optionale Biogasanschluss 2 verwendet wird, stellen die austretenden Massenströme der

Gaskomponenten die Summe der eintretenden sowie der im Fermenter gebildeten Massenströme dar.

Bei der energetischen Bilanzierung des Fermenters wurden die Reaktionswärmen vernachlässigt. Die Energiebilanz beinhaltet daher nur die Energieinhalte der ein- und austretenden Ströme, die benötigte Energie zur wasserdampfsättigung der austretenden Gasströme sowie den vorzugebenden zusätzlichen Wärmebedarf *q_demand*. Der zusätzliche Wärmebedarf ist vorgesehen, um beispielsweise Energieverluste über die Fermenteroberfläche berücksichtigen zu können. Aus dieser Energiebilanz ergibt sich die benötigte Heizwärme *q_trans*, die über den Wärmetauscher zugeführt werden muss. Für den Fall, dass die optionalen Ströme des Wärmetauschers angeschlossen sind, wird für diesen die Energiebilanz ebenfalls mit dieser übertragenen Wärmemenge *q_trans* berechnet. In diesem Fall werden auch die beiden Temperaturdifferenzen *dt_in_htex* und *dt_out_htex* zur Überprüfung der Realisierbarkeit des Wärmetausches berechnet. Darüber hinaus gibt die Variable *delta_p_htex* den Druckverlust zwischen dem ein- und austretenden Heizstrom an und kann entweder gesetzt oder aus den Drücken der ein- und austretenden Ströme berechnet werden. Werden die beiden optionalen Heizströme nicht verwendet, so müssen die Variablen *dt_in_htex*, *dt_out_htex* und *delta_p_htex* aus rechentechnischen Gründen gesetzt werden, wobei der eingegebene Zahlenwert irrelevant ist.

Im Fermentermodell steht eine Variable für die Fermenterverweilzeit (*residence_time*) und das Volumen der Maische im Fermenter (*mash_volume*) zur Verfügung, die über den eintretenden Substratvolumenstrom nach Formel F 3.29 zusammenhängen. Dabei hat der Substratvolumenstrom die Einheit m^3/s, womit sich die angegebene Einheitenumrechnung ergibt.

$$\text{mash_volume} = \dot{V}_1 * \frac{3600}{24} * \text{residence_time} \qquad \text{F 3.29}$$

Am Anschluss 7 des Fermentermodells kann optional ein Rührermotor angeschlossen werden. Ist dies der Fall, so wird die benötigte Rührermotorleistung aus dem Produkt von *spec_power* und *mash_volume* berechnet. Wird kein Rührermotor angeschlossen, so ist die Variable *spec_power* wieder aus rechentechnischen Gründen auf einen beliebigen Wert zu setzten.

Im entwickelten Modell stehen darüber hinaus ein Wert für die pro Tag produzierte Menge an Biogas (*gas_per_day*) und eine Variable zur Beurteilung der Gasproduktionseffizienz (*gas_efficiency*) zur Verfügung. Die pro Tag produzierte Biogasmenge wird dabei durch reine Einheitenumrechnung des austretenden Gasvolumenstroms 3 ermittelt. Für die

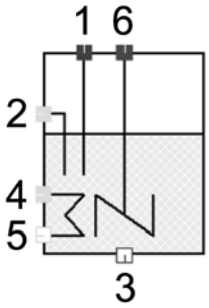
Gasproduktionseffizienz wird dieser Gasvolumenstrom 3 hingegen auf den über Anschluss 1 eintretenden Massenstrom an trockenem Substrat bezogen.

3.4.6 Biomassevergasung

Für die Simulation der FICFB-Vergasung wurden bereits vorhandene und publizierte Modelle der TU Wien verwendet (Pröll et al., 2005a; Pröll et al., 2007a; Pröll et al., 2007b; Pröll et al., 2008). Aus diesem Grund werden die Modelle der Biomassevergasung hier nicht näher beschrieben.

3.4.7 Hydrolyse

Im entwickelten Modell der Hydrolyse erfolgen keine Reaktionen, es kommt nur zur Vermischung des Biomasse- und des Wasserstroms. Die real bei der Hydrolyse stattfindende Zerlegung der komplexen Biomasse in einfache organische Verbindungen wird nicht mitberücksichtigt. Grund dafür ist, dass die Charakterisierung der Biomasse nur auf einer Elementaranalyse beruht und keine Angabe über die vorliegende Substanzzusammensetzung vorgenommen wird. Daher wird auch die Umwandlung der komplexen in einfachere Verbindungen bilanztechnisch in dem vorliegenden Modell nicht berücksichtigt. Die Darstellung der Hydrolyse-Unit kann Abbildung 3.8 entnommen werden.



Anschluss		Connection
1	Eintritt Substrat	*substrate*
2	Eintritt Wasser	*stream*
3	Austritt Hydrolysat	*stream*
4	Eintritt Wasser WT (optional)	*stream*
5	Austritt Wasser WT (optional)	*stream*
6	Anschluss Rührermotor (optional)	*shaft*

Abbildung 3.8: Modell der Hydrolyse

Im entwickelten Modell können der Druck (*pressure*) und die Temperatur (*temperature*) im Behälter vorgegeben werden, die gleichzeitig die Werte für den austretenden Substratstrom 3 darstellen. Darüber hinaus gibt es eine Variable die den Wassergehalt des austretenden Biomassestroms beschreibt (*w_H2O_exit*). Alle Variablen des Modells sind in Tabelle 3.12 aufgelistet. Die Massenbilanz des Modells gibt vor, dass die

Summe der beiden eintretenden Massenströme des Substrats 1 und des Wassers 2 gleich dem austretenden Massenstrom des verdünnten Substrats 3 ist.

In der Energiebilanz ist neben den ein- und austretenden Strömen auch ein zusätzlicher Wärmebedarf *q_demand* vorgesehen. Mit diesem Wert kann beispielsweise ein zusätzlicher Wärmebedarf durch zwischenzeitlich höhere Erwärmung während der Hydrolyse berücksichtigt werden. Aus der Energiebilanz ergibt sich damit der Heizbedarf der Hydrolyse, der durch die Variable *q_trans* repräsentiert wird.

Tabelle 3.12: Variablen für das Modell der Hydrolyse

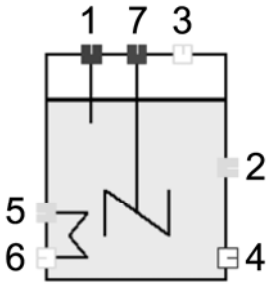
Bezeichnung	Beschreibung	Einheit
pressure	Betriebsruck des Fermenters (=p_3)	bar
temperature	Betriebstemperatur des Fermenters (=T_3)	°C
delta_p_heatex	Druckverlust zwischen p_4 und p_5	bar
dt_in_htex	Temperaturdifferenz zwischen T_5 und dem größeren der beiden Werte T_1 und T_2	°C
dt_out_htex	Temperaturdifferenz zwischen T_4 und T_3	°C
w_H2O_exit	Massenanteil H_2O im austretenden Strom 3	%
q_trans	mit Wärmetauscher übertragene Wärme	kW
q_demand	zusätzlicher Wärmebedarf	kW
volume_solution	Volumen des Substrats im Behälter	m^3
specific_power	pro m^3 Substratvolumen benötigte Rührerleistung	kW/m^3

Im Modell ist optional ein Wärmetauscher vorgesehen, der den benötigten Heizbedarf *q_trans* zur Verfügung stellt. Der Druckverlust zwischen Ein- und Austritt des Heizmediums wird über die Variable *delta_p_heatex* festgelegt. Die Variablen *dt_in_htex* und *dt_out_htex* stellen Temperaturdifferenzen dar, die die Wärmeübertragung beschreiben und zur Kontrolle der Realisierbarkeit des Wärmetauschers herangezogen werden können. Werden die beiden Wärmetauscheranschlüsse 4 und 5 nicht angeschlossen, so müssen die drei oben genannten Variablen aus rechentechnischen Gründen auf beliebige Werte gesetzt werden.

Im Hydrolysemodell ist weiters optional der Anschluss eines Rührermotors an Anschluss 7 vorgesehen. Ist ein Rührermotor angeschlossen, so ergibt das Produkt aus spezifischem Leistungsbedarf des Motors pro m^3 Lösung *specific_power* und Volumen der Lösung im Fermenter *volume_solution* die benötigte Rührermotorleistung. Falls kein Rührermotor angeschlossen ist, müssen diese beiden Variablen ebenfalls aus rechentechnischen Gründen auf beliebige Werte gesetzt werden.

3.4.8 Dunkelfermenter

Das entwickelte Modell des Dunkelfermenters geht davon aus, dass bei der Fermentation nur CO_2 und H_2 produziert werden. Der produzierte Gasstrom 3 ist mit Wasserdampf gesättigt und hat, genauso wie der austretende Säurestrom 4, den Druck und die Temperatur des Fermenters. Die symbolische Darstellung des Dunkelfermenters ist in Abbildung 3.9 gezeigt. Der optionale Anschluss für Wasser ist dafür vorgesehen, dass der Wasserdampf des Gasstroms 3 kondensiert und in den Fermenter zurückgeleitet wird.



Anschluss		Connection
1	Eintritt Substrat	*substrate*
2	Eintritt Wasser (optional)	*stream*
3	Austritt H_2-reiches Gas	*stream*
4	Austritt Säuren	*substrate*
5	Eintritt Wasser WT (optional)	*stream*
6	Austritt Wasser WT (optional)	*stream*
7	Anschluss Rührermotor (optional)	*shaft*

Abbildung 3.9: Modell des Dunkelfermenters

Die Umsetzung der Glukose im Substrat zu Essigsäure beziehungsweise Buttersäure ist im Modell nach den Reaktionsgleichungen F 2.18 und F 2.19 (siehe Kapitel 2.1.5.1) implementiert. Dabei geben die Variablen *glucose_to_acet* und *glucose_to_butyr* an, welcher Anteil der eingebrachten Glukose zu Essigsäure (acetic acid) und Buttersäure (butyric acid) umgesetzt wird (siehe Tabelle 3.13). Damit ergibt sich für die Komponente H_2 im austretenden Gasstrom die Speziesbilanz nach Gleichung F 3.30. Die Komponente H_2O wird im austretenden Gasstrom über eine externe Funktion zur Bestimmung des temperatur- und druckabhängigen Wasserdampfsättigungszustandes berechnet. Der CO_2-Gasmassenstrom ergibt sich über die Gesamtmassenbilanz, alle anderen Gaskomponenten werden auf Null gesetzt.

$$\dot{m}_{H2,3} = \dot{m}_{C_in_Glukose,3} * \frac{glucose_to_acet}{100} * \frac{M_{H2}}{M_C} * \frac{4}{6} + \dot{m}_{C_in_Glukose,3} * \frac{glucose_to_butyr}{100} * \frac{M_{H2}}{M_C} * \frac{2}{6} \qquad \text{F 3.30}$$

Ein Teil der Glukose wird zur Bildung von Mikroorganismen herangezogen, die hier als Biomasse bezeichnet werden. Dabei wird davon ausgegangen, dass für dieses Wachstum

der Mikroorganismen nur die Glukose und kein Wasser oder Ähnliches verbraucht wird. Real werden für das Wachstum jedoch sowohl Wasser als auch andere Substanzen, wie Stickstoff, benötigt. Da Wasser in den betrachteten Systemen jedoch in großem Überschuss vorliegt und die, für das Wachstum der Mikroorganismen benötigten, Substanzen die gewünschte Umsetzung zu Wasserstoff nicht direkt beeinflussen, wird damit nur ein vernachlässigbarer Fehler begangen. Der Anteil an Glukose, der für das Bakterienwachstum herangezogen wird, wird über die Variable *glucose_to_biomass* festgelegt. Da die gebildete Biomasse im weiteren Verlauf des Prozesses nicht mehr genutzt werden kann und meist am Austritt des Dunkelfermenters abgetrennt wird, wird die entsprechende Masse an Glukose im Modell in Asche im Säureaustrittsstrom 4 umgewandelt.

Tabelle 3.13: Variablen für das Modell des Dunkelfermenters

Bezeichnung	Beschreibung	Einheit
pressure	Betriebsruck des Fermenters ($=p_3=p_4$)	bar
temperature	Betriebstemperatur des Fermenters ($=T_3=T_4$)	°C
glucose_to_acet	Anteil Glukose im Substrat, der nach F 2.18 reagiert (siehe Kapitel 2.1.5.1)	%
glucose_to_butyr	Anteil Glukose im Substrat, der nach F 2.19 reagiert (siehe Kapitel 2.1.5.1)	%
glucose_to_biomass	Anteil Glukose im Substrat, der zu Biomasse umgesetzt wird	%
p_H2_gas	H_2-Partialdruck im austretenden Gasstrom 3	bar
q_trans	mit Wärmetauscher übertragene Wärme	kW
q_demand	zusätzlicher Wärmebedarf (z.B. für Ausgleich von Wärmeverlusten)	kW
volume_solution	Volumen des Substrats im Behälter	m^3
specific_power	pro m^3 Substratvolumen benötigte Rührerleistung	kW/m^3
delta_p_htex	Druckverlust zwischen p_5 und p_6	bar
dt_in_htex	Temperaturdifferenz zwischen T_6 und T_1	°C
dt_out_htex	Temperaturdifferenz zwischen T_5 und T_4	°C

Die Speziesbilanzen der Substratkomponenten ergeben sich über die oben angebenen Reaktionsgleichungen sowie den zugehörigen Umsatzvariablen *glucose_to_acet*, *glucose_to_butyr* sowie *glucose_to_biomass*. Sind für den eintretenden und/oder den austretenden Substratstrom auch Säure-*Globals* definiert, so wird aus den ermittelten Mengen der Essig- und Buttersäurebildung sowie optional den eintretenden Mengen der Säurekomponenten die Zusammensetzung des austretenden Säure-*Globals* ermittelt.

Wie im Grundlagenkapitel ausgeführt wurde (vgl. Kapitel 2.1.5.1), ist der Wasserstoffpartialdruck im Fermenter maßgeblich für die Wasserstoffausbeute der Dunkelfermentation. Aus diesem Grund ist im entwickelten Modell die Variable *p_H2_gas* vorgesehen, die den Wasserstoffpartialdruck (berechnet über $p_{H2}=y_{H2}*p_{ges}$) in der Gasphase angibt.

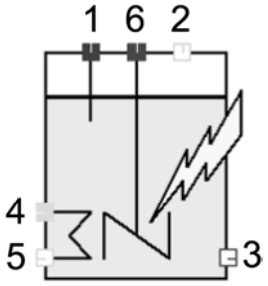
Die Massenbilanz im Modell legt fest, dass die Summe der Massenströme des austretenden Gas- und Säurestromes gleich dem eintretenden Substratmassenstrom und, falls angeschlossen, dem eintretenden Wassermassenstrom 2 ist. Die Energiebilanz des Modells umfasst die Energieinhalte aller ein- und austretenden Ströme, die Verdampfungswärme, die zur Wasserdampfsättigung des austretenden Gasstromes benötigt wird, sowie die Wärmemenge, die benötigt wird, um den Fermenterinhalt auf die gewünschte Temperatur zu bringen und auf dieser Temperatur zu halten (*q_trans*). Diese Wärmemenge wird im Fermenter über einen Wärmetauscher bereitstellt. Zusätzlich sind in der Energiebilanz mögliche Wärmeverluste über die Fermenteroberfläche oder Ähnliches durch die Variable *q_demand* berücksichtigt. Die Reaktionswärmen der im Fermenter ablaufenden Reaktionen wurden hingegen vernachlässigt. Im Fermentermodell besteht auch die Möglichkeit, die beiden Anschlüsse der Heizseite (5 und 6) des Wärmetauschers anzuschließen, und damit die Betriebszustände dieser Ströme festzulegen. Für diesen Fall sind der Druckverlust über den Wärmetauscher auf der Heizseite (*delta_p_htex*) und die beiden Temperaturdifferenzen *dt_in_htex* und *dt_out_htex* vorgesehen. Die beiden Temperaturdifferenzen sind als Kontrollwerte für das treibende Temperaturgefälle im Wärmetauscher implementiert. Sind die beiden Ströme 5 und 6 nicht angeschlossen, so müssen die drei oben genannten Werte zur Beschreibung des Wärmetauschers aus rechentechnischen Gründen auf beliebige Werte gesetzt werden.

Im entwickelten Modell besteht darüber hinaus die Option, einen Motor mit dem Fermenterrührer am Anschluss 7 zu verbinden. Die benötigte Leistung des Motors zum Rühren des Fermenterinhalts errechnet sind aus dem Produkt aus spezifischem Leistungsbedarf pro m^3 Lösung *specific_power* und Volumen der Lösung im Fermenter *volume_solution*. Auch hier müssen diese beiden Variablen aus rechentechnischen Gründen auf beliebige Werte gesetzt werden, falls der Rührermotor nicht angeschlossen ist.

3.4.9 Photofermenter

Das entwickelte Modell des Photofermenters setzt voraus, dass aus dem eintretenden Substrat 1 nur die Säuren zu Gas umgesetzt und für das Wachstum der Bakterien genutzt werden. Bei der Umsetzung der Säuren zu Wasserstoff wird angenommen, dass nur Wasserstoff und Kohlendioxid entstehen. Der austretende Gasstrom 2 ist dabei mit

Wasserdampf gesättigt und hat denselben Druck und dieselbe Temperatur wie der Fermenter. Der modellierte Photofermenter ist symbolisch in Abbildung 3.10 dargestellt.



Anschluss		Connection
1	Eintritt Substrat	*substrate*
2	Austritt H_2-reiches Gas	*stream*
3	Austritt Fermentationsrückstand	*substrate*
4	Eintritt Wasser WT (optional)	*stream*
5	Austritt Wasser WT (optional)	*stream*
6	Anschluss Rührermotor (optional)	*shaft*

Abbildung 3.10: Modell des Photofermenters

Die Umsetzung der eintretenden Essigsäure und Buttersäure zu wasserstoffreichem Gas erfolgt nach den Reaktionsgleichungen F 2.20 und F 2.21 (siehe Kapitel 2.1.5.2). Die Variablen *acet_to_H2* und *butyr_to_H2* des entwickelten Modells geben an, welcher Anteil der jeweiligen Säure nach der entsprechenden Reaktionsgleichung umgesetzt wird. Damit ergibt sich für den Wasserstoff im austretenden Gasstrom die Speziesbilanz nach Gleichung F 3.31. Der Wasserdampfanteil im Gasstrom wird über die Wasserdampfsättigung mittels externer Funktion ermittelt. Für den CO_2-Anteil des Gasstroms wird keine Speziesbilanz benötigt, er ergibt sich über die Gesamtmassenbilanz des Modells. Alle anderen Gaskomponenten im austretenden Strom 2 werden auf Null gesetzt.

$$\dot{m}_{H2,2} = \dot{m}_{C_in_Essigsäure,2} * \frac{acet_to_H2}{100} * \frac{M_{H2}}{M_C} * \frac{4}{2} + \dot{m}_{C_in_Buttersäure,2} * \frac{butyr_to_H2}{100} * \frac{M_{H2}}{M_C} * \frac{10}{4} \qquad \text{F 3.31}$$

Ähnlich wie beim Modell des Dunkelfermenters kann auch hier berücksichtigt werden, dass ein Teil der eintretenden Säuren für das Wachstum der Mikroorganismen verbraucht wird. Die Anteile der Säuren, die zu Mikroorganismen (im Modell als Biomasse bezeichnet) umgesetzt werden, werden im Modell durch die Variablen *acet_to_biomass* und *butyr_to_biomass* festgelegt. Auch hier gilt wieder, dass für das Wachstum der Mikroorganismen nur Säuren aber kein Wasser oder andere Substanzen berücksichtigt werden. Die Massenanteile der Säuren, die für das Wachstum herangezogen werden, werden direkt in den Ascheanteil des austretenden Fermentationsrückstandes 3 übergeführt, da sie im weiteren Prozessverlauf keine Verwendung mehr finden. Die Massenströme der

Substratkomponenten werden über die oben genannten Reaktionsgleichungen sowie die Umsetzung der Säuren zu Biomasse und die zugehörigen Umsatzvariablen *acet_to_H2*, *acet_to_biomass*, *butyr_to_H2* sowie *butyr_to_biomass* ermittelt. Die Gesamtmassenbilanz des Modells sagt aus, dass der eintretende Substratmassenstrom gleich der Summe der Massenströme des austretenden Gas- und Fermentationsrückstandes ist. Der austretende Fermentationsrückstand 3 weist, wie der austretende Gasstrom 2, die Temperatur und den Druck des Fermenters auf. Wird für den austretenden Fermentationsrückstand ein Säure-*Global* definiert, so können die Anteile der austretenden Säuren für dieses *Global* über die eintretenden Säureanteile sowie deren Umsetzung zu Wasserstoff bilanziert werden. Eine Liste aller im Modell enthaltenen Variablen ist in Tabelle 3.14 angegeben.

Tabelle 3.14: Variablen für das Modell des Photofermenters

Bezeichnung	Beschreibung	Einheit
pressure	Betriebsruck des Fermenters ($=p_2=p_3$)	bar
temperature	Betriebstemperatur des Fermenters ($=T_2=T_3$)	°C
acet_to_H2	Anteil Essigsäure im Substrat, der nach F 2.20 reagiert (siehe Kapitel 2.1.5.2)	%
butyr_to_H2	Anteil Buttersäure im Substrat, der nach F 2.21 reagiert (siehe Kapitel 2.1.5.2)	%
acet_to_biomass	Anteil Essigsäure im Substrat, der zu Biomasse umgesetzt wird	%
butyr_to_biomass	Anteil Buttersäure im Substrat, der zu Biomasse umgesetzt wird	%
q_trans	mit Wärmetauscher übertragene Wärme	kW
q_demand	zusätzlicher Wärmebedarf (z.B. für Ausgleich von Wärmeverlusten)	kW
volume_solution	Volumen des Substrats im Behälter	m^3
specific_power	pro m^3 Substratvolumen benötigte Rührerleistung	kW/m^3
delta_p_htex	Druckverlust zwischen p_4 und p_5	bar
dt_in_htex	Temperaturdifferenz zwischen T_5 und T_1	°C
dt_out_htex	Temperaturdifferenz zwischen T_4 und T_3	°C

Die Menge an Lichtenergie, die für die Umsetzung der Säuren zu Wasserstoff und CO_2 benötigt wird, wird im Modell des Photofermenters derzeit nicht berücksichtigt, da hierfür noch zu wenige Daten vorliegen. Weiters wurden auch die Reaktionswärmen der ablaufenden Reaktionen vernachlässigt. Es ist jedoch ein Wärmetauscher vorgesehen, der die benötigte Energie für die Schließung der Energiebilanz bereitstellt. Die über den Wärmetauscher zugeführte Wärmemenge *q_trans* deckt dabei neben der Energiedifferenz zwischen den ein- und austretenden Strömen auch die benötigte Verdampfungsenthalpie für

die Wasserdampfsättigung des austretenden Gasstromes sowie einen möglichen zusätzlichen Wärmebedarf des Fermenters (*q_demand*) ab, der beispielsweise Wärmeverluste des Fermenters repräsentieren kann.

Wie bei einigen vorangegangenen Modellen besteht auch im Photofermenter die Möglichkeit, die nach außen führenden Anschlüsse des Wärmetauschers (Anschlüsse 4 und 5) anzuschließen. Ist das der Fall, so werden wieder der Druckverlust über die externen Anschlüsse, delta*_p_htex* sowie die beiden Temperaturdifferenzen *dt_in_htex* und *dt_out_htex* in die Berechnung mit einbezogen. Andernfalls müssen die drei genannten Variablen aus rechentechnischen Gründen wieder auf beliebige Werte gesetzt werden.

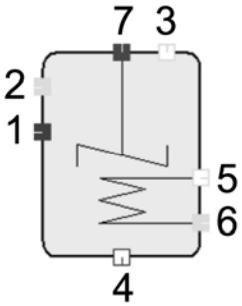
Darüber hinaus ist im Modell des Photofermenters auch ein optionaler Anschluss für einen Fermenterrührermotor (Anschluss 6) vorgesehen. Die erforderliche Motorleistung ergibt sich aus dem Produkt des spezifischen Leistungsbedarfs des Motors pro m^3 Lösung (*specific_power*) und dem Volumen der Lösung im Fermenter (*volume_solution*). Wird kein Rührermotor angeschlossen, so müssen auch hier die beiden genannten Variablen aus rechentechnischen Gründen wieder auf beliebige Werte gesetzt werden.

3.4.10 Biogasfermentation von Säuren

Dieses Modell wurde entwickelt, um die Kopplung von Dunkelfermentation und Biogasfermentation detailliert abbilden zu können. Im Gegensatz zum bereits beschriebenen Modell der Biogasfermentation (siehe Kapitel 3.4.5) können an diesen Biogasfermenter Substratströme vom Typ *substrate* angeschlossen werden, um die Anbindung an das Modell des Dunkelfermenters zu ermöglichen. Da der austretende Biomassestrom aus dem Dunkelfermenter hauptsächlich aus Säuren besteht, ermöglicht das entwickelte Modell der Biogasfermentation von Säuren die genaue Spezifikation der Umsetzung der verschiedenen berücksichtigten Säuren zu Biogas. Die symbolische Darstellung des Modells im Simulationsprogramm ist in Abbildung 3.11 gezeigt.

Im entwickelten Modell des Biogasfermenters für Säuren können der Druck und die Temperatur des Fermenters festgelegt werden (*operating_p* bzw. *operating_t*, siehe Tabelle 3.15), die gleichzeitig auch den Druck und die Temperatur des austretenden Gasstromes 3 und des austretenden Fermentationsrückstands 4 darstellen. Die Umsetzung des eintretenden Substrats zu Biogas wurde, wie bei der konventionellen Biogasfermentation, nach der modifizierten Buswell-Gleichung implementiert (siehe Gleichungen F 3.24 bis F 3.27, Kapitel 3.4.5). Die erforderlichen Variablen *n*, *a*, *b*, *prod_CH4* und *prod_CO2* sind auch im vorliegenden Modell vorhanden. Im Gegensatz zum konventionellen

Biogasfermentationsmodell kann der Anteil des Substrats, der zu Biogas umgesetzt wird, jedoch noch genauer spezifiziert werden.



Anschluss		Connection
1	Eintritt Substrat	*substrate*
2	Eintritt Gasstrom	*stream*
3	Austritt CH_4-reiches Gas	*stream*
4	Austritt Fermentationsrückstand	*substrate*
5	Eintritt Wasser WT (optional)	*stream*
6	Austritt Wasser WT (optional)	*stream*
7	Anschluss Rührermotor (optional)	*shaft*

Abbildung 3.11: Modell des Biogastermenters tür Säuren

Über die Variablen *glucose_to_CH4*, *acet_ to_CH4* und *butyr_ to_CH4* werden die Anteile an eintretender Glukose, Essigsäure und Buttersäure festgelegt, die an der Umsetzung zu Biogas teilnehmen. Die Variable *other_ to_CH4* gibt an, welcher Anteil an C, H und O, die nicht in Form von Säuren oder Glukose vorliegen, zu Biogas umgesetzt wird. Mit diesen Variablen für die Umsätze im Fermenter ergeben sich die Variablen *n*, *a* und *b* des Fermentermodells nach den Gleichungen F 3.32-3.34.

$$n*\left(\left(\frac{n}{2}-\frac{a}{8}+\frac{b}{4}\right)*\frac{prod_CO2}{n}+\left(\frac{n}{2}+\frac{a}{8}-\frac{b}{4}\right)*\frac{prod_CH4}{n}\right)= \left(\dot{m}_{C_in_Essigsäure}*\frac{acet_to_CH4}{100}+\dot{m}_{C_in_Buttersäure}*\frac{butyr_to_CH4}{100} + \dot{m}_{C_in_Glukose}*\frac{glucose_to_CH4}{100}+\dot{m}_{C_other}*\frac{other_to_CH4}{100}\right)*\frac{1}{M_C} \quad \text{F 3.32}$$

$$a*\left(\left(\frac{n}{2}-\frac{a}{8}+\frac{b}{4}\right)*\frac{prod_CO2}{n}+\left(\frac{n}{2}+\frac{a}{8}-\frac{b}{4}\right)*\frac{prod_CH4}{n}\right)= \dot{m}_{C_in_Essigsäure}*\frac{acet_to_CH4}{100}*\frac{1}{M_C}*\frac{4}{2} + \dot{m}_{C_in_Buttersäure}*\frac{butyr_to_CH4}{100}*\frac{1}{M_C}*\frac{4}{8} \quad \text{F 3.33}$$
$$+\dot{m}_{C_in_Glukose}*\frac{glucose_to_CH4}{100}*\frac{1}{M_C}*\frac{6}{12} + \dot{m}_{H_other}*\frac{other_to_CH4}{100}*\frac{1}{M_H}$$

$$
\begin{aligned}
b * \left(\left(\frac{n}{2} - \frac{a}{8} + \frac{b}{4} \right) * \frac{prod_CO2}{n} + \left(\frac{n}{2} + \frac{a}{8} - \frac{b}{4} \right) * \frac{prod_CH4}{n} \right) = \\
\dot{m}_{C_in_Essigsäure} * \frac{acet_to_CH4}{100} * \frac{1}{M_C} * \frac{2}{2} \\
+ \dot{m}_{C_in_Buttersäure} * \frac{butyr_to_CH4}{100} * \frac{1}{M_C} * \frac{4}{2} \\
+ \dot{m}_{C_in_Glukose} * \frac{glucose_to_CH4}{100} * \frac{1}{M_C} * \frac{6}{6} \\
+ \dot{m}_{O_other} * \frac{other_to_CH4}{100} * \frac{1}{M_O}
\end{aligned}
\qquad \text{F 3.34}
$$

Weiters besteht im Modell die Möglichkeit, die Anteile an Glukose, Essigsäure und Buttersäure anzugeben, die im Fermenter für das Wachstum der Mikroorganismen verbraucht werden (*glucose_to_biomass*, *acet_to_biomass*, *butyr_to_biomass*). Diese Anteile werden im Modell in die Substanz *myAsh* des austretenden Fermentationsrückstandes umgewandelt. Darüber hinaus gibt es wieder die Variable *residual_S*, die den Anteil an Schwefel darstellt, der im Fermenter nicht zu H_2S umgesetzt wird.

Die Massenbilanz des Modells stellt auch hier sicher, dass die Summe der Massenströme des austretenden Gases 3 und des austretenden Fermentationsrückstands 4 gleich dem eintretenden Substratsstrom 1 bzw. optional gleich der Summe aus eintretendem Substratsstrom 1 und eintretendem Gasstrom 2 ist. Die Energiebilanz umfasst neben den Energieinhalten der ein- und austretenden Ströme sowie der Verdampfungsenthalpie des Wassers, das zur Wasserdampfsättigung des austretenden Gasstroms 3 verdampft werden muss, auch einen eventuellen zusätzlichen Wärmebedarf im Fermenter (*q_demand*). Damit wird die für die Schließung der Energiebilanz benötigte Menge an Energie *q_trans* bestimmt.

Für den Fall, dass die optionalen Ströme 5 und 6 des Wärmetauschers angeschlossen sind, beinhaltet die Energiebilanz des Wärmetauschers sowohl die Energieinhalte der angeschlossenen Ströme als auch die übertragenen Wärmemenge *q_trans*. In diesem Fall werden auch die beiden Temperaturdifferenzen *dt_in_htex* und *dt_out_htex* zur Überprüfung der Realisierbarkeit des Wärmetausches berechnet. Die Variable *delta_p_htex* gibt den Druckverlust zwischen dem ein- und austretenden Heizstrom an. Werden die beiden optionalen Heizströme nicht verwendet, so müssen die Variablen *dt_in_htex*, *dt_out_htex* und *delta_p_htex* aus rechentechnischen Gründen auf beliebige Werte gesetzt werden.

Tabelle 3.15: Variablen für das Modell der Biogasfermentation von Säure

Bezeichnung	Beschreibung	Einheit
operating_p	Betriebsruck des Fermenters (=p_3=p_4)	bar
operating_t	Betriebstemperatur des Fermenters (=T_3=T_4)	°C
delta_p_htex	Druckverlust zwischen p_4 und p_5	bar
dt_in_htex	Temperaturdifferenz zwischen T_5 und T_1	°C
dt_out_htex	Temperaturdifferenz zwischen T_6 und T_4	°C
n	Molzahl für C in Gleichung F 3.24	kmol/s
a	Molzahl für H in Gleichung F 3.24	kmol/s
b	Molzahl für O in Gleichung F 3.24	kmol/s
prod_CH4	Produktionsfaktor für CH_4 nach F 3.24	-
prod_CO2	Produktionsfaktor für CO_2 nach F 3.24	-
residual_S	Anteil an S im Substrat, der nicht zu H_2S umgesetzt wird	-
glucose_to_CH4	Anteil an Glukose, der zu Biogas umgesetzt wird	%
glucose_to_biomass	Anteil an Glukose, der zu Biomasse umgesetzt wird	%
acet_ to_CH4	Anteil an Essigsäure, der zu Biogas umgesetzt wird	%
acet_ to_ biomass	Anteil an Essigsäure, der zu Biomasse umgesetzt wird	%
butyr_ to_CH4	Anteil an Buttersäure, der zu Biogas umgesetzt wird	%
butyr_ to_ biomass	Anteil an Buttersäure, der zu Biomasse umgesetzt wird	%
other_ to_CH4	Anteil an anderen Substratbestandteilen, der zu Biogas umgesetzt wird	%
q_trans	mit Wärmetauscher übertragene Wärme	kW
q_demand	zusätzlicher Wärmebedarf (z.B. für Ausgleich von Wärmeverlusten)	kW
residence_time	Verweilzeit des Substrates im Fermenter	d
mash_volume	Volumen der Maische im Behälter	m^3
spec_power	pro m^3 Maischevolumen benötigte Rührerleistung	kW/m^3
gas_per_day	Biogasertrag pro Tag	Nm^3/d
gas_efficiency	Biogasertrag pro kg trockenem Substrat	Nm^3/kg

Die Gleichung F 3.24 ist Kapitel 3.4.5 zu entnehmen.

Weitere Variablen des Modells sind die Verweilzeit des Substrats im Fermenter (*residence_time*) und das Volumen des Substrats im Fermenter (*mash_volume*), die über den eintretenden Substratvolumenstrom nach Formel F 3.29 (siehe Kapitel 3.4.5) zusammenhängen. Die Variable für die spezifische Rührermotorleistung *spec_power* ergibt bei Multiplikation mit dem Substratvolumen im Fermenter die benötigte Motorleistung eines

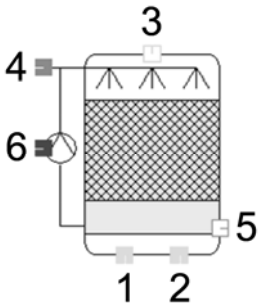
optional an Anschluss 7 anzuschließenden Rührermotors. Wird kein Motor angeschlossen, so muss die Variable *spec_power* auf einen beliebigen Wert gesetzt werden.

Die pro Tag produzierte Biogasmenge *gas_per_day* wird durch reine Einheitenumrechnung aus dem Normvolumenstrom des austretenden Gasstroms 3 ermittelt. Die Gasproduktionseffizienz *gas_efficiency* wird hingegen durch Division des Normvolumenstroms des Gasstroms 3 durch den über Anschluss 1 eintretenden Massenstrom an trockenem Substrat berechnet.

3.4.11 Gasaufbereitungstechnologien

3.4.11.1 Biologische Entschwefelung

Im Modell der biologischen Entschwefelung wurde die Schwefelabscheidung so implementiert, dass das absorbierte H_2S nach Reaktionsgleichung F 2.24 (siehe Kapitel 2.1.7.1) mit Sauerstoff in Schwefelsäure umgewandelt wird. Der Anteil an eintretendem H_2S, der absorbiert wird, wird dabei im Modell über die Variable *H2S_removal_eff* (siehe Tabelle 3.16) festgelegt. Über die Variable *excess_O2* kann angegeben werden, wie groß der molare Überschuss an eingebrachtem Sauerstoff bezogen auf die stöchiometrisch notwendige Menge ist. Weiters wurde angenommen, dass die gebildete Schwefelsäure mit dem austretenden Wasserstrom ausgetragen wird. Da im *Global* des austretenden Wasserstroms jedoch keine Schwefelsäure vorgesehen ist, ist im Modell die Variable *H2SO4_out* implementiert, die in der Massenbilanz der Unit die Menge an gebildeter Schwefelsäure repräsentiert.



Anschluss		Connection
1	Eintritt Gas	*stream*
2	Eintritt O_2	*stream*
3	Austritt H_2S-armes Gas	*stream*
4	Eintritt Waschflüssigkeit	*stream*
5	Austritt Waschflüssigkeit	*stream*
6	Anschluss Pumpenmotor (optional)	*stream*

Abbildung 3.12: Modell der biologischen Entschwefelung

Neben dieser austretenden Schwefelsäuremenge umfasst die Massenbilanz die Eintrittsströme für das Biogas (1), für den Sauerstoff (2) und für das Waschwasser (4), sowie

den austretenden H_2S-armen Biogasstrom (3) und die austretende Menge an Waschwasser (5). Die symbolische Darstellung der biologischen Entschwefelung ist Abbildung 3.12 zu entnehmen. Im Modell wird angenommen, dass sich die Temperatur und der Druck des Waschwassers zwischen Ein- und Austritt nicht ändern. Im Gegensatz dazu kann für den Gasstrom sowohl eine Temperaturänderung über die Variable *temperature_diff* als auch eine Druckänderung über die Variable *pressure_drop* vorgegeben werden. Die Einheiten dieser und aller anderen im Modell verwendeten Variablen sind in Tabelle 3.16 angegeben.

Tabelle 3.16: Variablen für das Modell der biologischen Entschwefelung

Bezeichnung	Beschreibung	Einheit
temperature_diff	Temperaturdifferenz zwischen T_1und T_3	°C
pressure_drop	Druckdifferenz zwischen T_1und T_3	%
H2S_removal_eff	H_2S Abscheidegrad	%
excess_O2	O_2-Überschuss im Reaktor	mol/mol
H2SO4_out	entstehender H_2SO_4-Massenstrom	kg/s
trickling_density	Berieselungsdichte	$m^3/(m^2*h)$
area	Querschnittsfläche des Reaktors	%
lift_height	Pumpenförderhöhe	m
eta_h	hydraulischer Wirkungsgrad der Pumpe	-
eta_m	mechanischer Wirkungsgrad der Pumpe	-

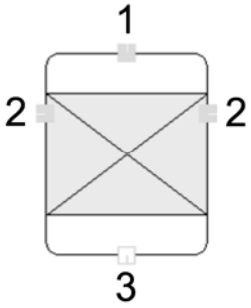
Für die Reaktion des H_2S mit Sauerstoff zu Schwefelsäure wird keine Reaktionswärme berücksichtigt, die Energiebilanz beinhaltet jedoch neben der Bilanzierung aller ein- und austretenden Ströme auch die Energie, die benötigt wird, um den austretenden Gasstrom mit Wasserdampf zu sättigen. Für den Fall, dass die biologische Entschwefelung mit Kreislaufwasser betrieben wird, kann auch ein Pumpenmotor an die Umwälzpumpe angeschlossen werden (Anschluss 6). Die erforderliche Pumpenmotorleistung wird in diesem Fall nach Formel F 3.35 berechnet, worin ρ_5 die Dichte der austretenden Waschflüssigkeit in Strom 5 darstellt.

$$P_{Motor} = \frac{\frac{trickling_density * area * \rho_5}{3600} * 9{,}81 * lift_height * 10^{-3}}{eta_h * eta_m} \qquad \text{F 3.35}$$

Wird kein Motor angeschlossen, so müssen die Variablen *trickling_density*, *area*, *lift_height*, *eta_h* und *eta_m* aus rechentechnischen Gründen auf beliebige Werte gesetzt werden.

3.4.11.2 Adsorptive Entfernung von Chlor- und Schwefelsubstanzen

Das Modell der adsorptiven Entschwefelung ist ein gekoppeltes Modell, das die katalytische Hydrierung von organischen Schwefelbestandteilen im Rohgas zu H_2S sowie die adsorptive Entfernung von H_2S und HCl umfasst. Die Entfernung von HCl ist nur im Modell der *BG_Lib* vorgesehen, da nur im Gasstrom dieser Bibliothek HCl enthalten ist. In dem Modell der *BG_Lib* wird über die Variable *HCl_removal* der Anteil an eintretendem HCl festgelegt, der im Adsorber abgetrennt wird. Die symbolische Darstellung des Modells ist in Abbildung 3.13 gezeigt.



Anschluss		Connection
1	Eintritt Gas	*stream* bzw. c_st_g_
2	Eintritt H2-reiches Gas (optional)	*stream* bzw. c_st_g_
3	Austritt S-armes Gas	*stream* bzw. c_st_g_

Abbildung 3.13: Modell der adsorptiven Entfernung von Chlor- und Schwefelsubstanzen

Die katalytische Hydrierung der organischen Schwefelanteile wurde nach Reaktionsgleichung F 2.25 (siehe Kapitel 2.1.7.2) implementiert. Es wird dabei angenommen, dass die eintretenden organischen Schwefelsubstanzen vollständig zu H_2S umgesetzt werden. Der für die Hydrierung der Schwefelbestandteile erforderliche Wasserstoff kann entweder aus dem eintretenden Gas selbst oder aus einem wasserstoffreichen Gas stammen, das optional an den Eintritt 2 angeschlossen werden kann. Die beiden Anschlüsse 2 sind dabei gleichwertig, es kann jedoch nur einer der beiden Anschlüsse verbunden werden. Wird ein wasserstoffreiches Gas an Anschluss 2 angeschlossen, so wird über die Variable *H2_to_S* das molare Verhältnis der insgesamt mit Strom 1 und 2 eingebrachten Wasserstoffmenge zur über Strom 1 eingebrachten Menge an organischem Schwefel festgelegt. Wird an Anschluss 2 kein Strom angeschlossen, so muss die Variable *H2_to_S* aus rechentechnischen Gründen auf einen beliebigen Wert gesetzt werden. Üblicherweise wird die katalytische Hydrierung mit erheblichem Überschuss an H_2 betrieben. Die Liste aller im Modell vorhandenen Variablen ist in Tabelle 3.17 angeführt.

Da in den verwendeten *Globals* der ein- und austretenden Gasströme die Angabe von organischen Schwefelsubstanzen nicht vorgesehen ist, wurde im Modell eine Variable vorgesehen (*total_S_feed*), die die Eingabe der Konzentration des gesamten Schwefels im

Gasstrom ermöglicht. Dabei wird davon ausgegangen, dass die gesamte Menge an Schwefel im Gas nur aus H_2S und organischen Schwefelbestandteilen besteht. Um die angegebene Konzentration an gesamtem Schwefel in einen für die Berechnungen benötigten Massenanteil umrechnen zu können, ist die Eingabe der Dichte des eintretenden Gases bei Normzustand (*feedgas_density*) erforderlich. Die Menge an eintretendem H_2S kann ebenfalls über die Eingabe der Konzentration erfolgen (*H2S_feed*) oder sie wird aus der Zusammensetzung und der Normdichte des eintretenden Gases ermittelt.

Tabelle 3.17: Variablen für das Modell der adsorptiven Entfernung von Chlor- und Schwefelsubstanzen

Bezeichnung	Beschreibung	Einheit
H2S_feed	H_2S-Konzentration in Strom 1	mg/m³
total_S_feed	Konzentration des gesamten S in Strom 1	mg/m³
feedgas_density	Dichte des eintretenden Gasstroms 1	kg/Nm³
delta_p	Druckverlust zwischen p_1 und p_3	bar
H2S_removal	Anteil an H_2S, der im Adsorber abgeschieden wird	%
S_adsorbed	Massenstrom an S der im Bett adsorbiert wird	kg/s
H2_to_S	Verhältnis von H_2 in Strom 1 und 2 zu organischem S in Strom 1	mol/mol
HCl_removal (nur in BG_Lib)	Anteil des eintretenden HCl, der im Adsorber abgeschieden wird	%

Die Abscheideleistung des Adsorbers bezüglich H_2S wird über die Variable *H2S_removal* festgelegt, die den Anteil an der Summe aus eintretendem und durch die Hydrierung entstandenen H_2S angibt, der abgeschieden wird. Die Abscheidung erfolgt durch Adsorption an ZnO (bzw. alternativ an FeO) nach Reaktionsgleichung F 2.26 (siehe Kapitel 2.1.7.2), bei der als Nebenprodukt Wasser entsteht. Dabei kommt es im Modell durch den Übertritt des Sauerstoffs aus dem ZnO in den Wasserdampf des Gases zu einem Massenzuwachs an Sauerstoff, der in der Massenbilanz des Adsorbers ebenso berücksichtigt wird, wie die Menge an adsorbiertem Schwefel (*S_adsorbed*), die zwar mit dem Gasstrom 1 in den Adsorber eintritt, diesen aber nicht mehr über den Gasstrom 3 verlässt. Die Speziesbilanzen der an der Reaktion beteiligten Komponenten H_2, H_2O und H_2S sind in den Gleichungen F 3.36-3.38 angegeben. Alle anderen Komponenten weisen am Austritt 3 entweder denselben Massenstrom wie am Eintritt 1 auf, beziehungsweise bei Anschluss eines Gasstromes am Eintritt 2 die Summe der Komponentenmassenströme aus Strom 1 und Strom 2.

$$\dot{m}_{H2,3} = \dot{m}_{H2,1} + \dot{m}_{H2,2} - \dot{m}_{H2_Hydrierung_organischer_Schwefel} \qquad \text{F 3.36}$$

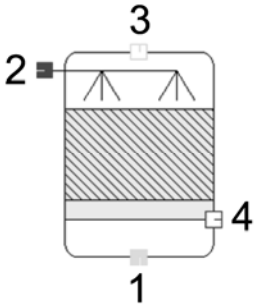
$$\dot{m}_{H2O,3} = \dot{m}_{H2O,1} + \dot{m}_{H2O,2} + \left(\dot{m}_1 * \frac{total_S_feed}{1000 * 1000 * feedgas_desnity} * \frac{1}{M_S} + \dot{m}_{H2S,2} * \frac{1}{M_{H2S}} \right) * \frac{H2S_removal}{100} * M_{H2O} \quad \text{F 3.37}$$

$$\dot{m}_{H2S,3} = \left(\dot{m}_1 * \frac{total_S_feed}{1000 * 1000 * feedgas_desnity} * \frac{1}{M_S} + \dot{m}_{H2S,2} * \frac{1}{M_{H2S}} \right) * \left(1 - \frac{H2S_removal}{100} \right) * M_{H2S} \quad \text{F 3.38}$$

Bei der Modellierung des Adsorbers wurde keine Reaktionswärme für die Hydrierung oder die Adsorption von H_2S und HCl berücksichtigt. Die Energiebilanz umfasst daher nur die Energieinhalte der ein- und austretenden Gasströme. Als weitere Variable ist im Modell ein Druckverlust *delta_p* über den Adsorber, also zwischen Eintritt des zu reinigenden Gases 1 und Austritt des gereinigten Gases 3, vorgesehen.

3.4.11.3 Absorptive Entfernung von CO_2 (nur *BG_Lib*)

Das Modell der absorptiven Entfernung von CO_2 bildet einen MEA-Wäscher ab, wobei das Modell nur den reinen Absorptionsschritt umfasst. Die Regenerierung der MEA-Waschflüssigkeit ist im Modell nicht mitberücksichtigt. Die Berechnung des erforderlichen Dampfbedarfs für die Regenerierung kann jedoch extern anhand von Literaturangaben durchgeführt werden (siehe beispielsweise Tobiesen et al., 2007). Diese Vorgehensweise wurde auch in der vorliegenden Arbeit gewählt. Das Symbol der MEA-Wäsche ist in Abbildung 3.14 dargestellt.



Anschluss		Connection
1	Eintritt Gas	*c_st_g_*
2	Eintritt MEA-Lösung	*c_st_w_*
3	Austritt CO_2-armes Gas	*c_st_g_*
4	Austritt MEA-Lösung	*c_st_w_*

Abbildung 3.14: Modell des MEA-Wäschers zur Entfernung von CO_2

Das vorliegende Modell wurde hauptsächlich dazu entwickelt, um den Bedarf an MEA-Lösung für eine festgelegte CO_2-Abscheidung zu ermitteln. Aus diesem Grund wurden einige Betriebsparameter, wie etwa das Verhältnis zwischen Gas- und Flüssigstrom im Absorber, die Menge an Flüssigkeitsumwälzung oder die Berieselungsdichte, vernachlässigt. Diese Parameter sind zwar für den Betrieb der Anlage von großer Bedeutung und müssten bei einer konkreten Anlagenauslegung im Detail ermittelt werden. Sie beeinflussen jedoch nicht direkt den Bedarf an frischer MEA-Lösung und wurden daher im Modell nicht implementiert.

Im entwickelten Modell können für den Gasstrom sowohl ein Druckverlust *delta_p* als auch eine Temperaturänderung *temperature_diff* über den Absorber angegeben werden. Für die Waschflüssigkeit wurde angenommen, dass der Austrittsdruck gleich dem Gaseintrittsdruck ist. Die Temperaturdifferenz zwischen Ein- und Austritt der MEA-Lösung ergibt sich über die Energiebilanz des Absorbers, in der neben den Energieinhalten der ein- und austretenden Gas- und Flüssigkeitsströme auch die Reaktionsenthalpie der CO_2-Absorption (nach Gabrielsen et al., 2005) berücksichtigt wird. Der Anteil an eintretendem CO_2, der im Absorber abgeschieden wird, wird über die Variable *rem_eff_CO2* festgelegt. Neben dem Kohlendioxid werden im MEA-Wäscher auch andere saure Gasbestandteile abgeschieden. Im entwickelten Modell wird diese Tatsache durch die Angabe der Anteile an eintretendem SO_2 und HCl berücksichtigt, die im Absorber abgeschieden werden (Variablen *rem_eff_SO2* und *rem_eff_HCl*, siehe Tabelle 3.18).

Tabelle 3.18: Variablen für das Modell der absorptiven CO_2-Entfernung

Bezeichnung	Beschreibung	Einheit
delta_p	Druckverlust zwischen p_1 und p_3	bar
temperature_diff	Temperaturdifferenz zwischen T_1 und T_3	°C
rem_eff_CO2	CO_2-Abscheidegrad	-
rem_eff_SO2	SO_2-Abscheidegrad	-
rem_eff_HCl	HCl-Abscheidegrad	-
w_MEA	Massenanteil MEA in Waschflüssigkeit	kg/kg
CO2_loading_in	CO_2-Beladung der eintretenden Waschflüssigkeit 2	mol/mol
CO2_loading_exit	CO_2-Beladung der austretenden Waschflüssigkeit 4	mol/mol
fresh_MEA_CO2	kg neues MEA pro absorbiertem kg CO_2	kg/kg
fresh_MEA_tot	gesamte Menge MEA, die erneuert wird	kg/h

Im Modell wird weiters festgelegt, welche MEA-Konzentration die eingesetzte Waschflüssigkeit hat (*w_MEA*). Da MEA-Wäscher üblicherweise nicht mit reiner sondern mit regenerierter MEA-Lösung betrieben werden, kann die CO_2-Beladung der eintretenden

Waschflüssigkeit über die Variable *CO2_loading_in* festgelegt werden. Wie aus den Reaktionsgleichungen F 2.29 bis F 2.30 (siehe Kapitel 2.1.7.4) ersichtlich ist, wird für die Absorption von einem mol CO_2 ein mol an MEA benötigt. Darüber hinaus werden pro mol SO_2 und pro mol HCl jeweils 2 mol an MEA gebunden (Rao et al., 2002). Aus diesen Angaben und der Angabe der CO_2-Beladung der austretenden Waschflüssigkeit kann somit der Massenstrom der austretenden, beladenen MEA-Lösung ermittelt werden, wie in Gleichung F 3.39 angegeben ist.

$$\dot{m}_{MEA,4} = \left(\frac{\dot{m}_{CO2,1} - \dot{m}_{CO2,3}}{M_{CO2}} * \frac{1}{CO2_loading_exit - CO2_loading_in} + \frac{\dot{m}_{SO2,1} - \dot{m}_{SO2,3}}{M_{SO2}} * 2 + \frac{\dot{m}_{HCl,1} - \dot{m}_{HCl,3}}{M_{HCl}} * 2 \right) * \frac{M_{MEA}}{w_MEA} \qquad \text{F 3.39}$$

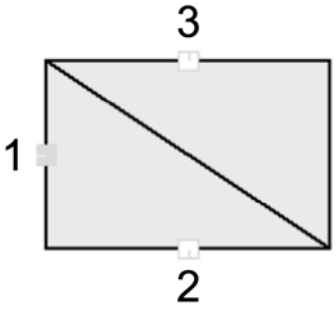
Um die Wirksamkeit der Absorptionskolonne auf Dauer gewährleisten zu können, muss kontinuierlich ein Teil der regenerierten MEA-Lösung durch frische Lösung ausgetauscht werden. Die Menge an MEA, die pro kg absorbiertem CO_2 erneuert werden muss, wird über die Variable *fresh_MEA_CO2* festgelegt. Bei der Regenerierung der MEA-Lösung kann nur das CO_2 jedoch nicht das absorbierte SO_2 und HCl entfernt werden, da diese mit MEA hitzebeständige Salze bilden (Rao et al., 2002). Diese Mengen an nicht mehr regenerierbarem MEA müssen ebenfalls erneuert werden und sind in der gesamten Menge an zu erneuerndem MEA (*fresh_MEA_tot*) berücksichtigt. Die Berechnungsformel für die Variable *fresh_MEA_tot* ist in Gleichung F 3.40 angeführt.

$$fresh_MEA_tot = \dot{m}_{CO2,1} - \dot{m}_{CO2,3} * fresh_MEA_CO2 + \left(\frac{\dot{m}_{SO2,1} - \dot{m}_{SO2,3}}{M_{SO2}} * 2 + \frac{\dot{m}_{HCl,1} - \dot{m}_{HCl,3}}{M_{HCl}} * 2 \right) * M_{MEA} \qquad \text{F 3.40}$$

3.4.11.4 Membrantechnik zur Entfernung von CO_2

Das entwickelte Modell der Membrananlage zur CO_2-Entfernung stellt ein sehr vereinfachtes Modell dar, das zur Anreicherung von Methan in einem Gasstrom herangezogen wird. Es berücksichtigt weder die für die Abtrennung erforderliche Membranfläche noch die transmembranen Flüsse oder Selektivitäten. Im Modell werden lediglich Angaben über die Trennwirkung für CO_2, CH_4, H_2O und O_2 vorgegeben. Es wurde angenommen, dass Wasserstoff vollständig durch die Membran permeiert und damit vollständig aus dem Gas abgetrennt wird. Für alle anderen Gasbestandteile im eintretenden

Gas wird angenommen, dass sie nicht durch die Membran permeieren. Das Symbol der CO_2 Abtrennung mittels Membrantechnik ist in Abbildung 3.15 dargestellt.



Anschluss		Connection
1	Eintritt Gas	*stream* bzw. *c_st_g_*
2	Austritt CO_2-armes Gas	*stream* bzw. *c_st_g_*
3	Austritt CO_2-reiches Gas	*stream* bzw. *c_st_g_*

Abbildung 3.15: Modell des Membranmoduls zur Entfernung von CO_2

Der Druckverlust zwischen Gaseintritt und Austritt des CO_2-armen Gases sowie die Druckdifferenz zwischen Gaseintritt und Austritt des CO_2-reichen Gases können vorgegeben werden (siehe Tabelle 3.19). Es wurde angenommen, dass die Temperatur in der Membrananlage konstant bleibt. Die beiden austretenden Ströme weisen daher die gleiche Temperatur wie der eintretende Gasstrom auf. Die Summe der Massenströme der beiden austretenden Gase ist im entwickelten Modell gleich dem Massenstrom des eintretenden Gases.

Tabelle 3.19: Variablen für das Modell der CO_2 Abtrennung mittels Membrantechnik

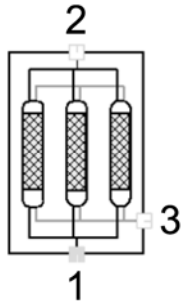
Bezeichnung	Beschreibung	Einheit
delta_p_gas	Druckverlust zwischen Gaseintritt (p_1) und Austritt des gereinigten Gases (p_2)	bar
delta_p_CO2	Druckdifferenz zwischen Gaseintritt (p_1) und Austritt des CO_2-reichen Gases (p_3)	°C
CO2_loss	Anteil an CO_2, der nicht über Membran abgetrennt wird	%
CH4_loss	Anteil an CH_4, der über Membran abgetrennt wird und damit verloren geht	%
H2O_separation	Anteil an H_2O, der über Membran abgetrennt wird	%
O2_sepatarion	Anteil an O_2, der über Membran abgetrennt wird	%

Die Variable *CO2_loss* gibt den Anteil der eintretenden CO_2-Menge an, der nicht über die Membran abgetrennt werden kann und damit den CO_2-Schlupf darstellt. Mit der Variable *CH4_loss* wird hingegen der Anteil des eintretenden CH_4 festgelegt, der über die Membran abgetrennt wird. Da das Methan das gewünschte Produkt dieser Gasaufreinigung

darstellt, gibt diese Variable den Methanverlust an. Über die Membran werden neben CO_2 und Methan auch Wasserdampf und Sauerstoff abgetrennt. Die Anteile der eintretenden Gasmengen an Wasserdampf und Sauerstoff, die in der Membrantrennanlage abgetrennt werden, können über die Variablen *H2O_separation* und *O2_separation* angegeben werden.

3.4.11.5 Druckwechseladsorption (PSA)

Das Modell der Druckwechseladsorption repräsentiert eine Anlage aus mehreren parallel geschalteten und aufeinander abgestimmten Adsorptionskolonnen. Im entwickelten Modell wird nicht auf die benötigte Anzahl an Adsorbern, die erforderliche Adsorptionsoberfläche oder die Verschaltung der einzelnen Adsorber eingegangen. Die symbolische Darstellung des PSA-Modells ist in Abbildung 3.16 gezeigt.



Anschluss		Connection
1	Eintritt Gas	*stream* bzw. *c_st_g_*
2	Austritt H_2-reiches Gas	*stream* bzw. *c_st_g_*
3	Austritt H_2-armes Gas	*stream* bzw. *c_st_g_*

Abbildung 3.16: Modell der Druckwechseladsorption

Im entwickelten Modell wird davon ausgegangen, dass alle eintretenden Verunreinigungen des Wasserstoffs gleich gut abgeschieden werden. Die Massenverhältnisse innerhalb der Verunreinigungen sind daher in den beiden austretenden Gasströmen 2 und 3 dieselben wie im eintretenden Gas 1. Neben den Verunreinigungen wird jedoch auch ein gewisser Teil des Wasserstoffs adsorbiert und gelangt somit nicht in das Produktgas 2 sondern in den Offgasstrom 3. Der Anteil an eintretendem Wasserstoff, der in der PSA Anlage adsorbiert wird, kann im Modell mit Hilfe der Variable *H2_adsorbed* festgelegt werden. Ein Teil des wasserstoffreichen Gases, das eine Adsorptionskolonne verlässt, wird dazu verwendet, um eine andere Kolonne beim Desorptionsvorgang zu spülen und anschließend den erforderlichen Adsorptionsdruck herzustellen. Dieser Gasanteil kann im Modell über die Variable *H2_flushing* definiert werden und ist ebenfalls Bestandteil des Offgasstromes 3. Die Variable *H2_recovery* repräsentiert den Anteil des eintretenden Wasserstoffs, der im wasserstoffreichen Austrittsgas 2 wiedergefunden wird. Der

Zusammenhang zwischen den drei Variablen *H2_adsorbed*, *H2_flushing* und *H2_recovery* ist in Gleichung F 3.41 gegeben.

$$H2_recovery = (1 - H2_adsorbed) - (1 - H2_adsorbed) * H2_flushing \quad \text{F 3.41}$$

Die Reinheit des Produktgases 2 kann durch Angabe des Volumenanteils des Wasserstoffs im Produktgas festgelegt werden. Diese Angabe kann entweder bezogen auf den trockenen Gasstrom (*H2_exit_dry*) oder bezogen auf den feuchten Gasstrom (*H2_exit_wet*) erfolgen. Die bisher beschriebenen und alle weiteren Variablen des Modells der Druckwechseladsorption sind in Tabelle 3.20 aufgelistet.

Tabelle 3.20: Variablen für das Modell der Druckwechseladsorption (PSA)

Bezeichnung	Beschreibung	Einheit
pressure_drop	Druckverlust zwischen eintretendem Gas 1 (p_1) und Austritt H_2-reiches Gas 2 (p_2)	bar
p_desorb	Desorptionsdruck ($=p_3$)	bar
H2_exit_dry	Volumsanteil von H_2 im H_2-reichen Gas 2 bezogen auf den trockenen Gasstrom 2	vol%
H2_exit_wet	Volumsanteil von H_2 im H_2-reichen Gas 2 bezogen auf den feuchten Gasstrom 2	vol%
H2_recovery	Anteil des eintretenden H_2, der nach der Desorption rückgewonnen wird	%
H2_adsorbed	Anteil des eintretenden H_2, der adsorbiert wird	%
H2_flushing	Anteil an desorbiertem H_2, der zum Spülen einer anderen Kolonne verwendet wird	%

Weitere Variablen des Modells sind der Druckverlust über den Adsorber zwischen dem Rohgas 1 und dem wasserstoffreichen Gas 2 (*pressure_drop*) sowie der Druck, bei dem die Desorption der Kolonne durchgeführt wird (*p_desorb*). Die Massenbilanz des Modells stellt sicher, dass die Summe der Massenströme der beiden austretenden Gasströme 2 und 3 gleich dem eintretenden Massenstrom des Gases 1 ist. Im Modell wurden keine Adsorptionswärmen berücksichtigt und es wurde angenommen, dass zwischen Gaseintritt 1 und austretendem Produktgasstrom 2 keine Temperaturänderung erfolgt. Die Temperatur des Offgasstromes 3 ergibt sich über die Energiebilanz der Unit, die die Energieinhalte der ein- und austretenden Ströme beinhaltet.

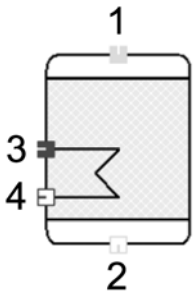
3.4.11.6 Methanierung (nur *BG_Lib*)

Das Modell der Methanierung beschreibt die Umsetzung von Gasbestandteilen zu Methan sowie die parallel dazu ablaufenden Reformierungsreaktionen der höheren Kohlenwasserstoffe. Das Symbol des Modells der Methanierung sowie die Beschreibung der Anschlüsse des Modells sind in Abbildung 3.17 angeführt. Wie bereits bei der Beschreibung des Modells der Dampfreformierung erläutert wurde (siehe Kapitel 3.4.1), erfolgt auch im Modell für die Methanierung die Implementierung der Gleichgewichtsreaktionen durch Verwendung von Faktoren, die die Entfernung der Reaktion vom Gleichgewichtszustand beschreiben (vgl. Gleichung F 3.10, siehe Kapitel 3.4.1) und die Angabe der Anteile der Gasbestandteile, die an den verschiedenen Reaktionen teilnehmen (siehe Tabelle 3.21).

Tabelle 3.21: Variablen für das Modell der Methanierung

Bezeichnung	Beschreibung	Einheit
temperature	Betriebstemperatur des Reaktors (=T_2)	°C
pressure_drop	Druckverlust des Gases zwischen Ein- und Austritt (=p_1-p_2)	bar
tar_conversion	Anteil der Teere, der nach Reaktion F 2.1 reagiert	%
C2H4_to_CO	Anteil C_2H_4, der nach Reaktion F 2.1 reagiert	%
C2H6_to_CO	Anteil C_2H_6, der nach Reaktion F 2.1 reagiert	%
C3H8_to_CO	Anteil C_3H_8, der nach Reaktion F 2.1 reagiert	%
CO_to_CH4_H2O	Anteil CO, der nach Reaktion F 2.32 reagiert	%
CO_to_CH4_CO2	Anteil CO, der nach Reaktion F 2.34 reagiert	%
CO_to_CH4_3CO2	Anteil CO, der nach Reaktion F 2.35 reagiert	%
CO_to_H2_CO2	Anteil CO, der nach Reaktion F 2.5 reagiert	%
CO2_to_CH4	Anteil CO_2, der nach Reaktion F 2.33 reagiert	%
C2H4Equ	Faktor für Entfernung vom Gleichgewicht F 2.8	-
C2H6Equ	Faktor für Entfernung vom Gleichgewicht F 2.9	-
C3H8Equ	Faktor für Entfernung vom Gleichgewicht F 2.10	-
CO_CH4uH2OEqu	Faktor für Entfernung vom Gleichgewicht F 2.36	-
CO_CH4uCO2Equ	Faktor für Entfernung vom Gleichgewicht F 2.38	-
CO_CH4u3CO2Equ	Faktor für Entfernung vom Gleichgewicht F 2.39	-
CO_H2uCO2Equ	Faktor für Entfernung vom Gleichgewicht F 2.14	-
CO2Equ	Faktor für Entfernung vom Gleichgewicht F 2.37	-
q_trans	mit Wärmetauscher übertragene Wärme	kW
dp_cool	Druckverlust zwischen p_3 und p_4	bar
dt_in_htex	Temperaturdifferenz zwischen T_3 und T_2	°C
dt_out_htex	Temperaturdifferenz zwischen T_4 und T_1	°C

Die angegebenen Reaktionsgleichungen sind Kapitel 2.1.1.1 bzw. Kapitel 2.1.7.8 zu entnehmen.



Anschluss		Connection
1	Eintritt Gas	*c_st_g_*
2	Austritt CH_4-reiches Gas	*c_st_g_*
3	Eintritt Wasser WT	*c_st_w_*
4	Austritt Wasser WT	*c_st_w_*

Abbildung 3.17: Modell des Methanierungsreaktors

$$\dot{m}_{C2H4,2} = 0 \qquad \text{F 3.42}$$

$$\dot{m}_{C2H6,2} = 0 \qquad \text{F 3.43}$$

$$\dot{m}_{C3H8,2} = 0 \qquad \text{F 3.44}$$

$$\dot{m}_{CO,2} = \left(\dot{m}_{CO,1} + \dot{m}_{C2H4,1} * \frac{M_{CO}}{M_{C2H4}} * 2 + \dot{m}_{C2H6,1} * \frac{M_{CO}}{M_{C2H6}} * 2 + \dot{m}_{C3H8,1} * \frac{M_{CO}}{M_{C3H8}} * 3 + \dot{m}_{Tar_C,1} * \frac{tar_conversion}{100} * \frac{M_{CO}}{M_C} \right) * \left(1 - \frac{CO_to_CH4}{100} - \frac{CO_to_H2}{100} \right) \qquad \text{F 3.45}$$

$$\dot{m}_{CO2,2} = \left(\dot{m}_{CO2,1} + \left(\dot{m}_{CO,1} + \dot{m}_{C2H4,1} * \frac{M_{CO}}{M_{C2H4}} * 2 + \dot{m}_{C2H6,1} * \frac{M_{CO}}{M_{C2H6}} * 2 + \dot{m}_{C3H8,1} * \frac{M_{CO}}{M_{C3H8}} * 3 \right) * \frac{CO_to_H2}{100} * \frac{M_{CO}}{M_{CO2}} \right) * \left(1 - \frac{CO2_to_CH4}{100} \right) \qquad \text{F 3.46}$$

$$\dot{m}_{H2,2} = \dot{m}_{H2,1} + \left(\dot{m}_{Tar_C,1} * \frac{M_{H2}}{M_C} + \dot{m}_{Tar_H,1} * \frac{M_{H2}}{2 * M_H} \right) * \frac{tar_conversion}{100}$$
$$+ \left(\dot{m}_{CO,1} + \dot{m}_{C2H4,1} * \frac{M_{CO}}{M_{C2H4}} * 2 \right.$$
$$\left. + \dot{m}_{C2H6,1} * \frac{M_{CO}}{M_{C2H6}} * 2 + \dot{m}_{C3H8,1} * \frac{M_{CO}}{M_{C3H8}} * 3 \right)$$
$$* \left(\frac{CO_to_H2}{100} * \frac{1}{M_{CO}} - \frac{CO_to_CH4}{100} * \frac{3}{M_{CO}} \right)$$
$$- \left(\dot{m}_{CO2,1} + \left(\dot{m}_{CO,1} + \dot{m}_{C2H4,1} * \frac{M_{CO}}{M_{C2H4}} * 2 + \dot{m}_{C2H6,1} * \frac{M_{CO}}{M_{C2H6}} * 2 \right.\right.$$
$$\left.\left. + \dot{m}_{C3H8,1} * \frac{M_{CO}}{M_{C3H8}} * 3 \right) * \frac{CO_to_H2}{100} * \frac{M_{CO}}{M_{CO2}} \right)$$
$$* \frac{CO2_to_CH4}{100} * \frac{M_{H2}}{M_{CO2}}$$

F 3.47

$$\dot{m}_{H2O,2} = \dot{m}_{H2O,1} - \dot{m}_{Tar_C,1} * \frac{M_{H2O}}{M_C} * \frac{tar_conversion}{100}$$
$$- \dot{m}_{C2H4,1} * \frac{M_{H2O}}{M_{C2H4}} * 2 - \dot{m}_{C2H6,1} * \frac{M_{H2O}}{M_{C2H6}} * 2 - \dot{m}_{C3H8,1} * \frac{M_{H2O}}{M_{C3H8}} * 3$$
$$- \left(\dot{m}_{CO,1} + \dot{m}_{C2H4,1} * \frac{M_{CO}}{M_{C2H4}} * 2 \right.$$
$$\left. + \dot{m}_{C2H6,1} * \frac{M_{CO}}{M_{C2H6}} * 2 + \dot{m}_{C3H8,1} * \frac{M_{CO}}{M_{C3H8}} * 3 \right)$$
$$* \left(\frac{CO_to_H2}{100} * \frac{M_{H2O}}{M_{CO}} - \frac{CO_to_CH4}{100} * \frac{M_{H2O}}{M_{CO}} \right)$$
$$+ \dot{m}_{CO2,1} * \frac{CO2_to_CH4}{100} * \frac{M_{H2O}}{M_{CO2}} * 2$$

F 3.48

Bei der Modellierung wurde davon ausgegangen, dass im Methanierungsreaktor auch die Teeranteile im Gas umgesetzt werden. Die Umsetzung erfolgt dabei nach Reaktion F 2.1 (siehe Kapitel 2.1.1.1). Die Speziesbilanzen der an den ablaufenden Reaktionen beteiligten Komponenen sind in den Gleichungen F 3.42-3.48 angeführt. Für alle anderen Komponenten wurden die austretenden Komponentenmassenströme den eintretenden Komponentenmassenströmen gleichgesetzt. Die Gesamtmassenbilanz des Modells besagt, dass der austretende Massenstrom 2 gleich dem eintretenden Massenstrom 1 sein muss.

Damit ergibt sich auch der nicht über eine eigene Speziesbilanz festgelegte Massenstrom für Methan.

Die Energiebilanz des Modells umfasst neben den Energieinhalten der ein- und austretenden Ströme auch die Reaktionsenthalpien aller Reaktionen mit Ausnahme der Umwandlung der Teere. Die Reaktionsenthalpie der Teerumwandlung wurde vernachlässigt, da die Menge an Teer, die in den Methanierungsreaktor eintritt, nur in einer Größenordnung von 10 mg/Nm^3 liegt und der energetische Beitrag dieser Reaktion damit vernachlässigbar ist. Alle anderen Reaktionsenthalpien wurden in gleicher Weise wie bei der Dampfreformierung aus den Standardbildungsenthalpien der beteiligten Komponenten ermittelt (vgl. Kapitel 3.4.1).

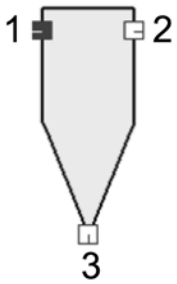
Weitere Variablen des Modells sind die Temperatur des Methanierungsreaktors (*temperature*), die gleichzeitig die Austrittstemperatur des Gases (T_2) darstellt, sowie der Druckverlust des Gases zwischen Ein- und Austritt des Gases (*pressure_drop*). Der Druckverlust des Kühlwassers im Wärmetauscher kann über die Variable *dp_cool* festgelegt werden. Darüber hinaus stehen zur genaueren Spezifizierung des Wärmetauschers Werte für die im Wärmetauscher übertragene Wärme (*q_trans*) sowie die Temperaturdifferenzen *dt_in_htex* und *dt_out_htex* zur Verfügung.

3.4.12 Weitere modellierte Komponenten

3.4.12.1 Feststoffabtrennung

Das Modell der Feststoffabtrennung wird im Zusammenhang mit der Dunkelfermentation benötigt. Bei dieser Technologie wird meist vor Eintritt des Substrats in den Fermenter der Feststoffanteil abgetrennt, um die Produktivität des Fermenters zu erhöhen. Die symbolische Darstellung des Modells ist in Abbildung 3.18 gezeigt.

Das Modell sieht vor, dass keine Temperaturänderung zwischen dem Eintritt des Substrats und den beiden Austrittsstellen erfolgt. Dagegen können Druckverluste sowohl zwischen dem Substrateintritt und dem Substrataustritt als auch zwischen Substrateintritt und Feststoffaustritt festgelegt werden (*delta_p_liqu* bzw. *delta_p_solid*, siehe Tabelle 3.22).



Anschluss		Connection
1	Eintritt Substrat	*substrate*
2	Austritt feststoffarmes Substrat	*substrate*
3	Austritt feststoffreicher Strom	*stream*

Abbildung 3.18: Modell der Feststoffabtrennung

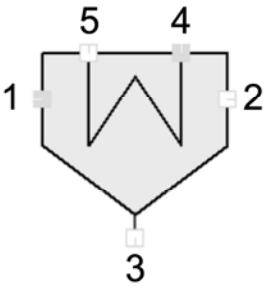
Die Massenbilanz des Modells stellt sicher, dass die Summe der Massenströme der beiden austretenden Ströme 2 und 3 gleich dem Massenstrom des eintretenden Substrats 1 ist. Der Massenstrom des austretenden Feststoffstroms 3 wird dabei über die beiden Variablen *separ_efficiency* und *drymatter_residue* festgelegt. Der Abscheidewirkungsgrad *separ_efficiency* gibt an, welcher Anteil des mit dem Substrat 1 eintretenden Feststoffs abgetrennt wird. Die Variable *drymatter_residue* bestimmt den Feststoffanteil im austretenden Strom 3. Vom verbleibenden Anteil des Feststoffstroms wird angenommen, dass er aus reinem Wasser besteht.

Tabelle 3.22: Variablen für das Modell der Feststoffabtrennung

Bezeichnung	Beschreibung	Einheit
delta_p_liqu	Druckverlust zwischen Ein- und Austritt des Substrats ($=p_1-p_2$)	bar
delta_p_solid	Druckverlust zwischen Eintritt des Substrats und Austritt des Feststoffs ($=p_1-p_3$)	bar
separ_efficiency	Abscheidewirkungsgrad Feststoffabtrennung	-
drymatter_residue	Feststoffgehalt im Feststoffstrom 3	kg/kg

3.4.12.2 Wasserkondensator

Das Modell des Wasserkondensators wird verwendet, um Wasserdampf aus einem gemischten Gasstrom teilweise oder vollständig zu kondensieren. Das Modell wurde an das Modell des Kondensators aus der *APP_Lib*, das zur Kondensation eines Wasserdampfstroms innerhalb eines Wasser-Dampf-Kreislaufs verwendet wird (siehe SimTech, 2003a), und an das Modell des Kondensators in der *BG_Lib* angelehnt. Das Kondensatormodell der *BG_Lib* ist bereits zur Kondensation von Wasserdampf innerhalb eines gemischten Gasstroms vorgesehen, allerdings sind darin keine Wärmetauscheranschlüsse vorgesehen. Daher wurde auch in der *BG_Lib* das eigene Modell implementiert. Das Symbol des Modells ist in Abbildung 3.19 dargestellt.



Anschluss		Connection
1	Eintritt Gas	*stream* bzw. *c_st_g_*
2	Austritt getrocknetes Gas	*stream* bzw. *c_st_g_*
3	Austritt Kondensat	*stream* bzw. *c_st_w_*
4	Eintritt Wasser WT	*stream* bzw. *c_st_w_*
5	Austritt Wasser WT	*stream* bzw. *c_st_w_*

Abbildung 3.19: Modell des Wasserkondensators

Im entwickelten Modell sind Variablen für den Druckverlust zwischen Gaseintritt 1 und Gasaustritt 2 (*dp_gas*), den Druckverlust zwischen Gaseintritt 1 und Kondensataustritt 3 (*dp_wat*) und den Druckverlust zwischen Eintritt 4 und Austritt 5 des Kühlmediums (*dp_cool*) vorgesehen (siehe Tabelle 3.23).

Es wird davon ausgegangen, dass der austretende Gasstrom wasserdampfgesättigt ist. Zwischen dem austretenden Gasstrom 2 und dem austretenden Kondensatstrom 3 kann eine Temperaturdifferenz *dt_drain* vorgegeben werden. Die Energiebilanz der Unit umfasst die Energieinhalte aller ein- und austretenden Ströme sowie die Kondensationswärme der kondensierten Wassermasse. Die Variable *Q_trans* des Modells stellt die Menge an Energie dar, die im Kondensator über das Kühlwasser abtransportiert werden muss, um die gewünschte Menge an Wasser zu kondensieren. Diese Wärmemenge führt daher auch zur Aufwärmung des Kühlwassers zwischen Ein- und Austritt.

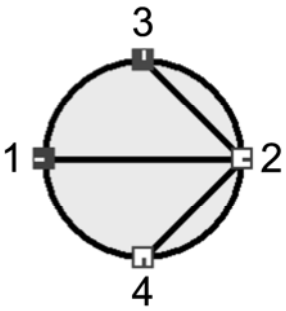
Tabelle 3.23: Variablen für das Modell des Wasserkondensators

Bezeichnung	Beschreibung	Einheit
dp_gas	Druckverlust zwischen Ein- und Austritt des Gasstroms ($=p_1-p_2$)	bar
dp_wat	Druckverlust zwischen Eintritt des Gasstroms und Austritt des Kondensats ($=p_1-p_3$)	bar
dp_cool	Druckverlust zwischen Ein- und Austritt des Kühlwassers ($=p_4-p_5$)	bar
dt_drain	Temperaturdifferenz zwischen Austritt Gasstrom und Austritt Kondensat ($=t_2-t_3$)	°C
dt_in_gas	Temperaturdifferenz zwischen Austritt Gasstrom und Eintritt Kühlwasser ($=t_2-t_4$)	°C
dt_out_gas	Temperaturdifferenz zwischen Eintritt Gasstrom und Austritt Kühlwasser ($=t_1-t_5$)	°C
Q_trans	mit Wärmetauscher übertragene Wärme	kW

Der austretende Kondensatstrom besteht vollständig aus flüssigem Wasser und beinhaltet keine Gaskomponenten. Die Massenbilanz des Modells stellt sicher, dass die Summe der Massenströme der beiden austretenden Ströme 2 und 3 gleich dem eintretenden Massenstrom 1 ist. Der Massenstrom des eintretenden Kühlwassers 4 muss natürlich gleich dem Massenstrom des austretenden Kühlwassers 5 sein. Zur Beurteilung der Realisierbarkeit des Wärmetauschs im Kondensator stehen die beiden Temperaturdifferenzen *dt_in_gas* und *dt_out_gas* zur Verfügung, die die Temperaturdifferenz zwischen dem austretenden Gas- und dem eintretenden Kühlwasserstrom bzw. zwischen dem eintretenden Gas- und dem austretenden Kühlwasserstrom darstellen.

3.4.12.3 Pumpe für den Substratstrom

Das Modell der Pumpe für den Substratstom ist erforderlich, um das Druckniveau des Stromes erhöhen und die benötigte Leistung für den Transport eines Substrats innerhalb einer Anlage ermitteln zu können. Ein äquivalentes Pumpenmodell ist auch für einen Strom vom Typ *bio_stream* vorhanden. Allerdings wird in diesem Modell die Angabe der Dichte nicht benötigt, da im *bio_stream* eine Variable für das spezifische Volumen des Stroms enthalten ist. Im *substrate*-Strom ist diese Variable jedoch nicht vorgesehen. Abbildung 3.20 zeigt das Symbol des Modells der Pumpe für den Substratstrom.



Anschluss		Connection
1	Eintritt Substrat	*substrate*
2	Austritt Substrat	*substrate*
3	Anschluss Motor ein(optional)	*shaft*
4	Anschluss Motor aus (optional)	*shaft*

Abbildung 3.20: Modell der Pumpe für den Substratstrom

Die Massenbilanz des Modells verlangt, dass der ein- und austretende Massenstrom 1 bzw. 2 gleich groß sind. Darüber hinaus wird festgelegt, dass die Temperatur am Ein- und Austritt des Substrats gleich ist. Es wird also keine Temperaturerhöhung in der Pumpe berücksichtigt. Die Variable *lift_height* des Modells, siehe Tabelle 3.24, gibt die Pumpenförderhöhe an und legt somit über Gleichung F 3.49 den Zusammenhang zwischen dem Druck des eintretenden Substrats 1 und dem Druck des austretenden Substrats 2 fest.

$$p_2 = p_1 + lift_height * \rho_1 * 9{,}81 * 10^{-5} \qquad \text{F 3.49}$$

Tabelle 3.24: Variablen für das Modell der Pumpe für den Substratstrom

Bezeichnung	Beschreibung	Einheit
eta_p	Pumpenwirkungsgrad	-
eta_m	mechanischer Wirkungsgrad	-
lift_height	Pumpenförderhöhe	m
density	*Switch* zur Auswahl zwischen Benutzereingabe oder Berechnung der Dichte des eintretende Substratstroms 1	-
density_feed	Dichte des eintretenden Substratstroms 1	kg/m³

In dieser Gleichung stellt ρ_1 die Dichte des eintretenden Substratstroms 1 dar. Weiters erfolgt die Umrechnung zwischen den Druckeinheiten Pa, die sich aus dem Term mit der Pumpenförderhöhe ergibt, und bar, die als Einheit für den Druck innerhalb des Substratstroms vorgesehen ist.

Da im Substratstrom *substrate* keine Information über die Dichte bzw. das spezifische Volumen vorgesehen ist, muss für die Berechnung des Austrittsdrucks diese Dichteinformation innerhalb des Pumpenmodells bereitgestellt werden. Dazu kann entweder vom Anwender ein Wert für die Dichte bereitgestellt werden (Auswahl von *user* im *Switch*(Auswahlfeld) *density* und Setzen der Variable *density_feed*) oder die Dichte des Stromes kann durch die Dichte von Wasser angenähert und im Modell berechnet werden (Auswahl von *water* im *Switch density* und Berechnung von *density_feed* als Dichte eines reinen Wasserstroms). Optional ist im entwickelten Modell auch vorgesehen, dass ein Motor an Anschluss 3 bzw. ein Generator an Anschluss 4 angeschlossen wird. Die Pumpenleistung teilt sich dabei auf die beiden Anschlüsse entsprechend Gleichung F 3.50 auf.

$$P_3 - P_4 = \frac{\dot{m}_1 * 9{,}81 * lift_height * 10^{-3}}{eta_p * eta_m} = P_{Pumpe} \qquad \text{F 3.50}$$

In dieser Gleichung stellt P_3 die Pumpenmotorleistung, P_4 die Leistung eines angeschlossenen Generators und P_{Pumpe} die Pumpenleistung dar. Die Pumpenleistung errechnet sich aus dem eintretenden Substratmassenstrom $\dot{m}_1$, der Erdbeschleunigung (9,81 m/s²), der Pumpenförderhöhe *lift_height* und dem Pumpenwirkungsgrad (*eta_p*) sowie dem mechanischen Wirkungsgrad (*eta_m*). Der Faktor 10^{-3} stellt eine Einheitenumrechnung zwischen W und kW dar.

3.4.12.4 Standardkomponenten für den Substratstrom

Für die Substratströme wurden neben den bereits angeführten Units auch die Standardkomponenten Wärmetauscher, Mixer und Splitter erstellt. Diese Komponenten wurden jedoch von der Standardbibliothek übernommen und nur an die geänderten Parameter des Substratstroms angepasst. Diese Komponenten werden aus diesem Grund hier nicht beschrieben, stattdessen wird auf die Standardbibliothek *APP_Lib* verwiesen (SimTech, 2003a).

4 Verifizierung der entwickelten Modelle mittels Simulation von Referenzanlagen

Um die entwickelten Modelle zu verifizieren, wurde für jede der betrachteten Technologien eine Referenzanlage ausgewählt, für die in der Literatur und/oder von Anlagenbetreibern Daten zur Verfügung standen. Diese Anlagen wurden mit Hilfe der entwickelten Modellbibliotheken modelliert und simuliert und durch den Vergleich der Simulationsergebnisse mit den vorhandenen Anlagendaten die Korrektheit der entwickelten Modelle überprüft. Nachfolgend sind die gewählten Referenzanlagen, deren Modellierung sowie die Simulationsergebnisse und der Vergleich mit den Anlagendaten angeführt.

4.1 Dampfreformierung von Erdgas

Für die Dampfreformierung von Erdgas wurde eine Referenzanlage gewählt, die im Aufbau und der Größenordnung der Dampfreformierungsanlage der Fa. OMV in der Raffinerie Schwechat (Österreich) entspricht. Sie besteht aus einem Reaktor, in dem kombiniert organische Schwefelkomponenten hydriert sowie H_2S und HCl adsorptiv aus dem Erdgas entfernt werden. Das gereinigte Erdgas gelangt gemeinsam mit Wasserdampf in einen Dampfreformer, der bei 870 °C und 30 bar betrieben wird. Nach der Abkühlung des Reformergases gelangt das Gas in einen Shift-Reaktor und eine Gasabkühlung inklusive Wasserdampfkondensation. Im letzten Schritt der Anlage wird der Wasserstoff in einer Druckwechsel-Adsorption von den ungewünschten Gasbestandteilen gereinigt. In der Anlage werden, wie in der Anlage in Schwechat, rund 289 Mio. Nm^3/a H_2 produziert (Pulletz et al., 2003).

Zur Beheizung des Dampfreformers wird ebenfalls Erdgas herangezogen. Das heiße Rauchgas am Austritt des Reformers wird zur Produktion von Prozessdampf genutzt. Darüber hinaus werden die abzuführenden Wärmemengen zwischen Dampfreformer und Shift-Reaktor sowie nach dem Shift-Reaktor für die Produktion des Prozessdampfes, zur

Vorwärmung des Erdgases und zur Luftvorwärmung herangezogen. Diese Wärmetauscherverschaltungen wurden selbst ausgewählt und stellen nur bedingt die reale Verschaltung in der Anlage in Schwechat dar. Das Flowsheet der modellierten Referenzanlage für die Dampfreformierung von Erdgas ist in Abbildung 4.1 dargestellt.

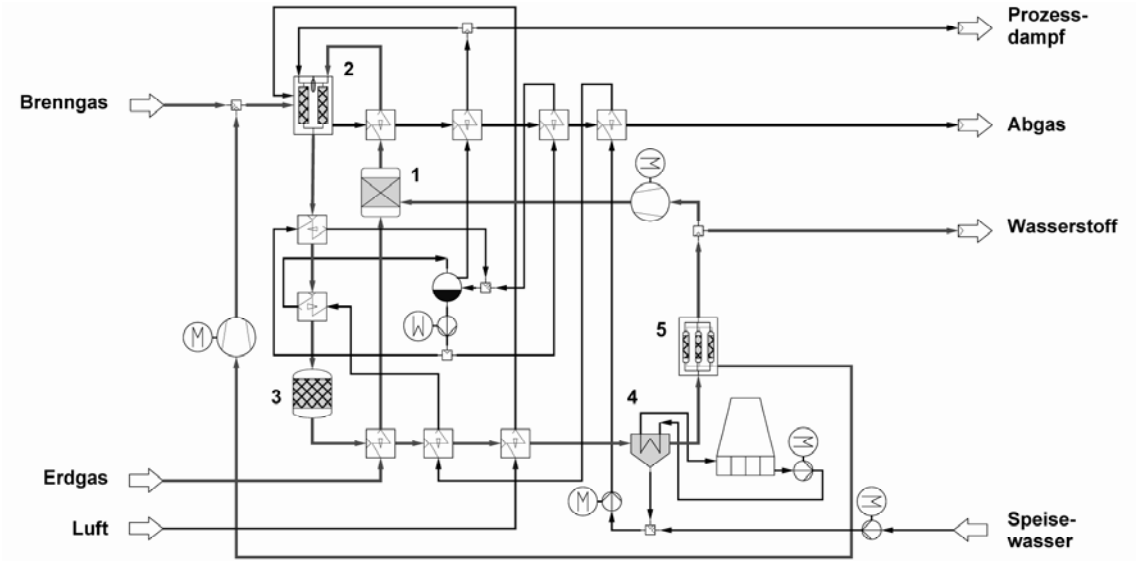


Abbildung 4.1: Flowsheet der Referenzanlage für die Dampfreformierung von Erdgas (1: Reaktor zur Hydrierung und adsorptiven Entfernung von Chlor- und Schwefelsubstanzen, 2: Dampfreformer, 3: Wassergas-Shift-Reaktor, 4: Kondensator, 5: PSA Anlage)

Aufgrund der Tatsache, dass nur wenige Anlagendaten aus der Anlage in Schwechat zur Verfügung standen, wurde ein Großteil der für die Simulation benötigten Anlagendaten in Anlehnung an Literaturdaten ausgewählt. Die wichtigsten Anlagendaten, die für die Simulation der Referenzanlage eingesetzt wurden, sind in Tabelle 4.1 aufgelistet. Die Gaszusammensetzung des Erdgases wurde der ÖVGW G 31 entnommen (ÖVGW, 2001), wobei hier die Beispielzusammensetzung des Gases in Niederösterreich verwendet wurde. Die Anteile der höheren Kohlenwasserstoffe (>C3) wurden für die Simulation in den Anteil von C_3H_8 eingerechnet, für den Gesamtschwefelgehalt im Gas wurde 1mg S/Nm^3 angenommen. Zusätzlich zu diesen Angaben aus der ÖVGW G31 wurde angenommen, dass ein Teil des Gesamtschwefels in Form von H_2S vorliegt. Die Zusammensetzung des eingesetzten Gases ist in Tabelle 4.2 angeführt.

Tabelle 4.1: Verwendete Anlagendaten für die Referenzanlage der Dampfreformierung von Erdgas

Anlagenparameter	Wert
Temperatur Eintritt Adsorber	370 °C
Temperatur Reformer	880 °C
Druck Reformer	30 bar
CH_4-Schlupf im Reformer	10%
Temperatur Eintritt Shift-Reaktor	330 °C
CO-Umsatz Shift-Reaktor	74,6%
Temperatur Eintritt PSA	40 °C
H_2-Gehalt Austritt PSA	99,999 vol%, roh
H_2-Recovery PSA	81%

Tabelle 4.2: Zusammensetzung des eingesetzten Erdgases für die Referenzanlage der Dampfreformierung von Erdgas

Komponente	Einheit	Wert
CH_4	vol%	96,21
C_2H_6	vol%	1,11
C_3H_8	vol%	0,55
CO_2	vol%	1,00
N_2	vol%	1,13
H_2S	mg H_2S/Nm^3	0,50
Schwefel gesamt	mg S/Nm^3	1,00

In Tabelle 4.3 sind die wichtigsten Ergebnisse der Simulation zusammengefasst und den Prozessdaten der Anlage in Schwechat beziehungsweise Literaturdaten zur Dampfreformierung von Erdgas gegenübergestellt. Die Übereinstimmung zwischen den Simulationsergebnissen und den Anlagendaten liegt dabei im Bereich der üblichen Genauigkeit von Prozesssimulationen.

Tabelle 4.3: Ergebnisse der Simulation und Literaturdaten der Referenzanlage zur Erdgas-Dampfreformierung (Neumann et al., 2003, Pulletz et al., 2003, Stoll et al., 2000)

Parameter	Einheit	Simulation	Literaturdaten
$CH_{4,in}/H_{2,out}$	Nm^3/ Nm^3	0,4518	0,4-0,46
H_2 nach Reformer	vol%, trocken	74,2	74
kW H_2/kW CH_4 auf LHV-Basis	%	83,8	<85
H_2-Produktgas	Nm^3/a	289 Mio.	289 Mio.

4.2 Alkalische Elektrolyse

Für die alkalische Elektrolyse wurden zwei Größenordnungen als Referenzanlagen ausgewählt. Einerseits wurde eine Anlage der Fa. Stuart mit 60 Nm^3/h H_2 (IMET 1000, 4 Zellen) und andererseits eine Anlage mit 485 Nm^3/h H_2 der Fa. Norsk Hydro (Typ 5040, 5150A) gewählt. Beide Anlagen wurden in einer Studie von Ivy (Ivy, 2004) untersucht. Die Anlagen bestehen jeweils aus einer Wasseraufbereitung, der Bereitstellung der Kalilauge und der bipolaren Elektrolyseeinheit. Diese Elektrolyseeinheit inkludiert bereits eine Wasserabscheidung aus dem Produktgas und eine Produktgaskühlung.

Da alle der Elektrolyse vor- und nachgeschalteten Anlagenteile nur hinsichtlich ihres Strombedarfs berücksichtigt werden, vereinfacht sich die Simulation der Referenzanlagen für die alkalische Elektrolyse auf die reine Simulation der Elektrolyse, wie in Abbildung 4.2 dargestellt ist.

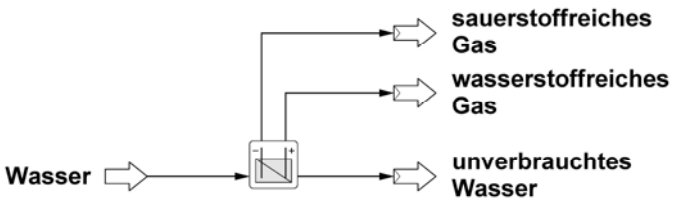


Abbildung 4.2: Flowsheet der Elektrolyse-Referenzanlagen

Die wichtigsten Anlagendaten, die für die Simulation der Referenzanlage eingesetzt wurden, sind in Tabelle 4.4 aufgelistet.

Tabelle 4.4: Verwendete Anlagendaten für die Referenzanlagen der alkalischen Elektrolyse

Anlagenparameter	Einheit	Stuart	Norsk Hydro
Temperatur	°C	80	80
Druck	bar	25	33
H_2-Produktgasstrom	Nm^3/h	60,0	485,0
spezif. Energiebedarf gesamt	kWh/Nm^3	4,8	4,8
H_2-Gehalt Wasserstoffstrom	vol%, trocken	99,997	99,9
O_2-Gehalt Sauerstoffstrom	vol%, trocken	99,9	99,9

Die Simulationsergebnisse sind in Tabelle 4.5 und Tabelle 4.6 angegebenen und zeigen gute Übereinstimmung mit den Daten der Referenzanlagen.

Tabelle 4.5: Ergebnisse der Simulation und Literaturdaten der Referenzanlage Stuart

Parameter	Simulation	Literatur (Ivy, 2004)
Effizienz der Wasserkonversion (*water_convers*)	81,9%	80%
Effizienz der Anlage (HHV H_2/el. Energie)	73,8%	73%

Tabelle 4.6: Ergebnisse der Simulation und Literaturdaten der Referenzanlage Norsk Hydro

Parameter	Simulation	Literatur (Ivy, 2004)
Effizienz der Wasserkonversion (*water_convers*)	81,6%	80%
Effizienz der Anlage (HHV H_2/el. Energie)	73,8%	73%

4.3 Dampfreformierung von Biogas

Die Reformierung von Biogas ist eine Technologie, die sich derzeit noch in Entwicklung befindet. Aus diesem Grund sind derzeit nur Anlagen in relativ kleinem Maßstab realisiert (max. 6 kW H_2). Angaben zu ausgeführten Anlagen für die Reformierung von Biogas sind in Tabelle 4.7 zusammengefasst.

Tabelle 4.7: Anlagenbeispiele zur Biogasreformierung (Nitzsche et al., 2007; Schmersahl et al., 2007; Friedl et al., 2008)

Anlage	CH_4 im Rohgas	H_2 - Leistung	H_2 im Produktgas	CO im Produktgas
Biogas-Dampfreformer TU-Freiberg, GER	50 vol%	1,4-2,5 kW	64,7 vol%	<5 ppm
ATB Biogasreformer Potsdam, GER	60 vol%	2,25 kW	64 vol%	<10 ppm
Biogasreformer Univ. Duisburg, GER	60 vol%	6 kW	-	-

Aufgrund des niedrigen Entwicklungsstandes wurde entschieden, dass für die Reformierung des Biogases, ebenso wie für die Reformierung des Vergasergases, eine

Dampfreformierungsanlage nach dem Layout der Anlage in Schwechat (siehe Kapitel 4.1) herangezogen wird. Im Unterschied zu der Anlage in Schwechat wird der produzierte Überschussdampf jedoch nicht als Prozessdampf in anderen Anlagen verwendet, sondern zur Erzeugung von Strom in eine Dampfturbine eingespeist. Die genaue Anlagenverschaltung wird in Kapitel 5.3 bei den gewählten Anlagenverschaltungen beschrieben.

Als Referenzanlage für die Biogasfermentation wurde die Anlage in Bruck an der Leitha ausgewählt. Diese Anlage besteht aus einer Hygienisierung, zwei parallel geschalteten Linien mit jeweils einem Maischebehälter, einem Fermenter und einem Nachgärbehälter, sowie einer gemeinsamen biologischen Entschwefelungskolonne. In der Anlage werden jährlich rund 30.000 t Substrat verwertet (Prechtl et al., 2004), die sich mittlerweile hauptsächlich aus Reststoffen aus der Lebens- und Futtermittelproduktion, Abfallprodukten der Biodieselherstellung sowie getrennt gesammelten kommunalen Bioabfällen zusammensetzen. Die ursprüngliche Trennung der beiden Linien in eine NAWARO-Linie und eine Linie mit organischen Reststoffen besteht nicht mehr. Die anschließende Nutzung des Biogases in Gasmotoren wurde nicht mitbetrachtet, da sie für die Anlagen zur Wasserstoffproduktion nicht relevant ist.

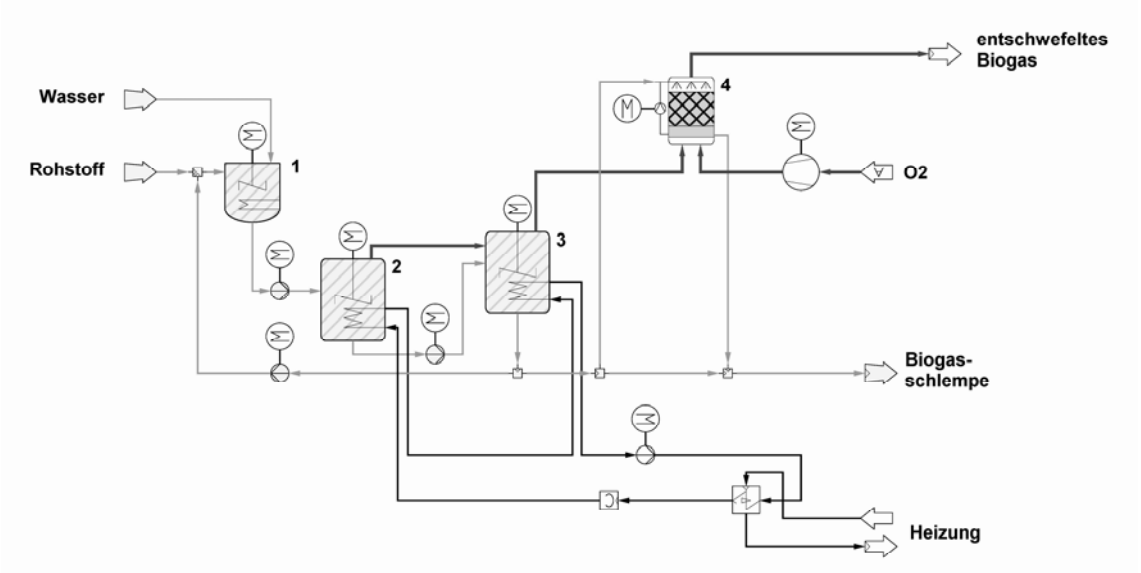


Abbildung 4.3: Flowsheet der Referenzanlage für die Biogasfermentation
(1: Maischebehälter, 2: Biogasfermenter, 3: Nachgärbehälter, 4: biologische Entschwefelungskolonne)

Bei der Simulation der Referenzanlage für die Biogasfermentation wurde davon ausgegangen, dass die beiden parallelen Fermentationslinien der Anlage in exakt gleicher Weise betrieben werden. Daher wurde in der Simulation jeweils nur eine Modell-Unit für die Anmaischungen, die Fermenter und die Nachgärbehälter modelliert, wie in Abbildung 4.3 dargestellt ist. Die Hygienisierung wurde nicht als eigene Unit berücksichtigt, da sie nur einen Energiebedarf darstellt, der auch im Modell des Maischebehälters vorgegeben werden kann.

Tabelle 4.8: Verwendete Anlagendaten für die Referenzanlagen der Biogasfermentation

Anlagenparameter	Einheit	Wert
Temperatur Maischbehälter	°C	32,2
Temperatur Fermenter	°C	35
Temperatur Nachgärbehälter	°C	35
prod_CH4 Fermenter	-	0,74
prod_CO2 Fermenter	-	0,74
residual_S Fermenter	-	0,86
prod_CH4 Nachgärbehälter	-	0,55
prod_CO2 Nachgärbehälter	-	0,55
residual_S Nachgärbehälter	-	0,86
H_2S-Abscheidegrad biologische Entschwefelung	%	97

Die wichtigsten Anlagendaten, die in der Simulation als Eingabewerte eingesetzt wurden, sind in Tabelle 4.8 zusammengefasst. Da für die Rohstoffzusammensetzung in der Anlage in Bruck an der Leitha keine Analyse vorlag, wurde die in Tabelle 4.9 angegebene Zusammensetzung angenommen. Dabei wurde eine Mischung von Fleischabfällen, Biotonne und Lebensmittelabfällen angenommen.

Tabelle 4.9: Verwendete Rohstoffzusammensetzung für die Referenzanlagen der Biogasfermentation

Element	Einheit	Wert
C	gew%, trocken	52,0
H	gew%, trocken	5,787
N	gew%, trocken	16,513
O	gew%, trocken	10,0
S	gew%, trocken	0,3
Cl	gew%, trocken	0,4
Asche	gew%, trocken	15,0
Wasser	gew%	75,0

Die Ergebnisse der Simulation sowie die Anlagendaten der Biogas-Referenzanlage sind Tabelle 4.10 zu entnehmen.

Tabelle 4.10: Ergebnisse der Simulation und Anlagendaten der Biogas-Referenzanlage (Prechtl et al., 2004; Institut für Energetik und Umwelt et al., 2006; Miltner, 2010)

Parameter	Einheit	Simulation	Anlagendaten
Rohstoffmenge	t/a	30.000	30.000
Methangehalt	vol%, tr.	60,6	58-65
Biogasmenge	Nm^3/h	849,6	800-900
Gasanteil Nachgärbehälter	%	14,9	bis zu 20
H_2S-Gehalt nach Entschwefelung	ppmv	33,9	<50

4.4 Dampfreformierung von Vergasergas

Die Dampfreformierung von Vergasergas wurde nach derzeitigem Wissensstand noch nicht durchgeführt bzw. veröffentlicht. Aus diesem Grund wurde wie bei der Reformierung von Biogas davon ausgegangen, dass das produzierte Vergasergas in einer Dampfreformierung nach dem Design der Anlage in Schwechat (siehe Kapitel 4.1) zu Wasserstoff umgesetzt wird. Im Unterschied zu der Anlage in Schwechat wird der produzierte Überschussdampf jedoch nicht als Prozessdampf in anderen Anlagen verwendet, sondern zur Erzeugung von Strom in eine Dampfturbine eingespeist. Die genaue Anlagenverschaltung wird in Kapitel 5.4 bei den gewählten Anlagenverschaltungen beschrieben.

Als Referenzanlage für die Vergasung wurde die FICFB-Vergasungsanlage in Güssing mit 8 MW_{th} Brennstoffwärmeleistung ausgewählt (Pröll et al., 2007a). In dieser Anlage werden ca. 2.300 kg/h Hackschnitzel als Brennstoff verwendet, die üblicherweise einen Wassergehalt von 25-40% aufweisen (Rauch et al., 2004). Die Hackschnitzel werden im Biomassevergaser bei 850-900 °C mit Dampf vergast, der verbleibende Koks wird im Verbrennungsteil mit Luft verbrannt. Als Bettmaterial wird Olivin eingesetzt. Anschließend wird das Vergasergas auf 150-180 °C abgekühlt und gelangt in einen Schlauchfilter zur Partikelabtrennung. Die Asche des Filters wird in den Verbrennungsteil der Anlage eingebracht. Anschließend wird der im Gas enthaltene Teer, sowie ein Teil des Wasserdampfes und damit auch wasserlösliche Bestandteile wie NH_3 und HCl, in einem RME-Wäscher ausgewaschen (Pröll et al., 2005b). In der Anlage in Güssing wird das produzierte Vergasergas in Gasmotoren zu Strom umgewandelt. Diese Nutzung wurde in der vorliegenden Arbeit nicht mitbetrachtet, da sie für die Wasserstoffproduktion nicht relevant ist.

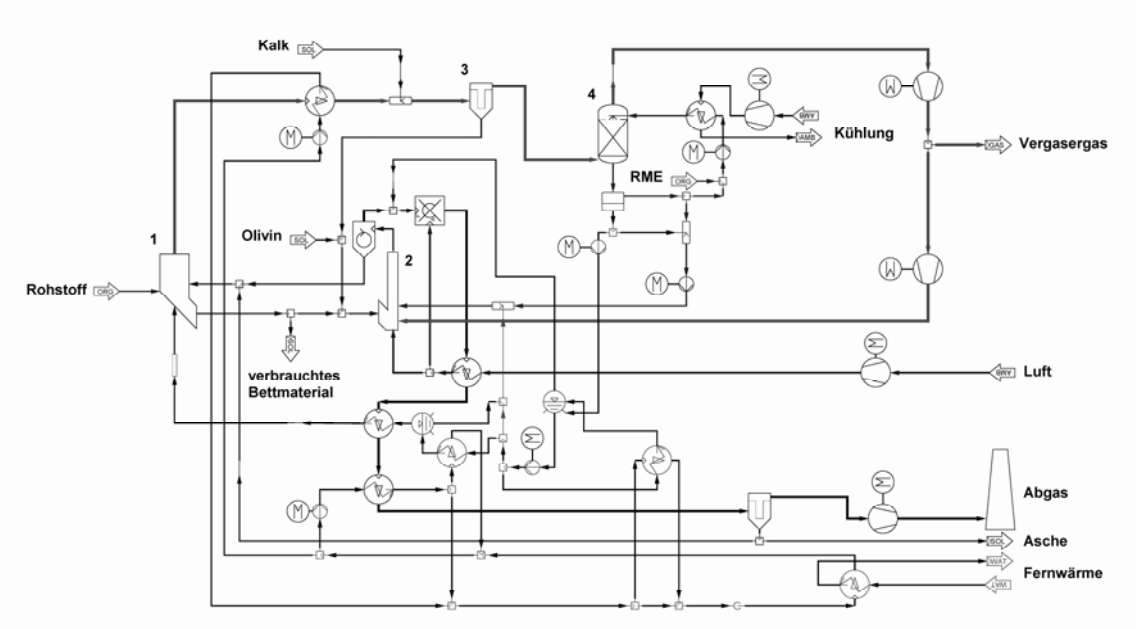


Abbildung 4.4: Flowsheet der Referenzanlage für die Biomassevergasung
(1: Biomassevergaser, 2: Verbrennungsreaktor, 3: Schlauchfilter, 4: Teerwäscher)

Bei der Simulation der Referenzanlage zur Biomassevergasung wurde auf bereits durchgeführte Arbeiten zurückgegriffen (Pröll et al., 2005a; Pröll et al., 2007a; Pröll et al., 2007b). Das Flowsheet der betrachteten Referenzanlage ist in Abbildung 4.4 dargestellt. Die Eigenschaften des gewählten Rohstoffes sind in Tabelle 4.11 zusammengestellt.

Tabelle 4.11: Eigenschaften des gewählten Rohstoffs (Holzhackschnitzel) für die Referenzanlage der Vergasung von Biomasse (Hofbauer et al., 2006)

Parameter	Einheit	Wert
C	gew%, trocken	48,0
H	gew%, trocken	6,0
N	gew%, trocken	0,2
O	gew%, trocken	44,797
S	gew%, trocken	0,003
Cl	gew%, trocken	0,0001
Asche	gew%, trocken	1,0
H_2O	gew%	20,0
unterer Heizwert	kJ/kg, trocken	17.528

Tabelle 4.12: Verwendete Anlagendaten für die Referenzanlagen der Biomassevergasung

Parameter	Einheit	Simulation
Brennstoffwärmeleistung	kW	7.771
Temperatur Gas Austritt Vergaser	°C	850
Energieinhalt Roh-Vergasergas	kW	5446
C_2H_4-Gehalt Roh-Vergasergas	vol%, trocken	2,0
C_2H_6-Gehalt Roh-Vergasergas	vol%, trocken	0,3
C_3H_8-Gehalt Roh-Vergasergas	vol%, trocken	0,6
CH_4-Gehalt Roh-Vergasergas	vol%, trocken	10,5
CO-Gehalt Roh-Vergasergas	vol%, trocken	25,0
N_2-Gehalt Roh-Vergasergas	vol%, trocken	1,6
Teergehalt Roh-Vergasergas	g/Nm³, trocken	3,5
NH_3-Gahalt Rein-Vergasergas	vol%, trocken	0,04
O_2-Gehalt Rein-Vergasergas	vol%, trocken	$1,0*10^{-6}$

Die Eingabedaten für die Simulation der Biomassevergasungsanlage wurden innerhalb der Bereiche der veröffentlichten Werte für die Referenzanlage (Hofbauer et al., 2002; Hofbauer, 2005b; Pröll et al., 2005b) gewählt und sind in Tabelle 4.12 aufgelistet. Die Ergebnisse der Simulation des zur Verfügung gestellten Flowsheets im Vergleich mit den zugehöriger Literaturdaten sind Tabelle 4.13 zu entnehmen.

Tabelle 4.13: Ergebnisse der Simulation und Literaturdaten der Referenzanlage zur Biomassevergasung (Hofbauer, 2005b; Pröll et al., 2005b; Pröll et al., 2007a; Pröll et al., 2007b)

Parameter	Einheit	Simulation	Literatur
Gasausbeute nach Vergaser	Nm³/kg BS_{daf}	1,63	1,6-1,9
Energieinhalt Roh-Vergasergas	kW	5446	5600
H_2-Gehalt Roh-Vergasergas	vol%, trocken	39,1	35-40
CO_2-Gehalt Roh-Vergasergas	vol%, trocken	20,8	20-25

4.5 Gekoppelte Dunkel- und Photofermentation

Die gekoppelte Dunkel- und Photofermentation stellt eine Technologie dar, die erst am Anfang der Entwicklung steht. Aus diesem Grund sind derzeit auch nur Anlagen im Labormaßstab zu dieser Technologie vorhanden. In der vorliegenden Arbeit wurde aus diesem Grund als fiktive Referenzanlage der Anlagenaufbau entsprechend den Veröffentlichungen von Claassen et al. verwendet (Claassen et al., 2004; Claassen et al., 2005), die Größenordnung der Anlage entspricht dabei mit 60 kg/h H_2 der Annahme von

Ljunggren et al. (Ljunggren et al., 2010). Das Flowsheet der gewählten Anlagenverschaltung ist in Abbildung 4.5 dargestellt. Das Substrat wird im Hydrolyseur mit Wasser gemischt und auf die gewünschte Hydrolysetemperatur von 20 °C gebracht. Anschließend werden die nicht verwertbaren Feststoffe aus dem Substrat abgetrennt. Das gereinigte Substrat wird vorgewärmt und in den Dunkelfermenter geleitet, der bei 70 °C und einem Druck von 0,5 bar (absolut) betrieben wird. Der Dunkelfermenter in den Veröffentlichungen von Claassen et al. wird, im Gegensatz zu der hier getroffenen Annahme, bei 1 bar betrieben. Er wird jedoch mit Stickstoff gespült, um den Wasserstoffpartialdruck im Dunkelfermenter niedrig zu halten, da zu hohe Wasserstoffpartialdrücke die Wasserstoffproduktivität der Mikroorganismen verringern (Willquist et al., 2009). Die Absenkung des Fermenterdrucks auf 0,5 bar (absolut) führt dazu, dass ein Teil des Wasseranteils im Substrat verdampft wird. Dieser entstehende Wasserdampf senkt den Wasserstoffpartialdruck ebenfalls ab und ersetzt daher in der simulierten Anlage den Stickstoff-Spülstrom. Das aus dem Fermenter austretende Gas wird in einen Kondensator geleitet, in dem der Großteil des Wasserdampfs kondensiert und wieder in den Dunkelfermenter zurückgeleitet wird. Der säurereiche Fermentationsrückstand wird auf die Temperatur des Photofermenters abgekühlt und in den Photofermenter geleitet. Dort findet die weitere Umsetzung zu Wasserstoff bei 35 °C und 1 bar statt. Die beiden Gasströme der Dunkel- und der Photofermentation werden schließlich gemeinsam in eine Druckwechseladsorptionsanlage geleitet, in der das CO_2 und der Wasserdampf abgetrennt werden.

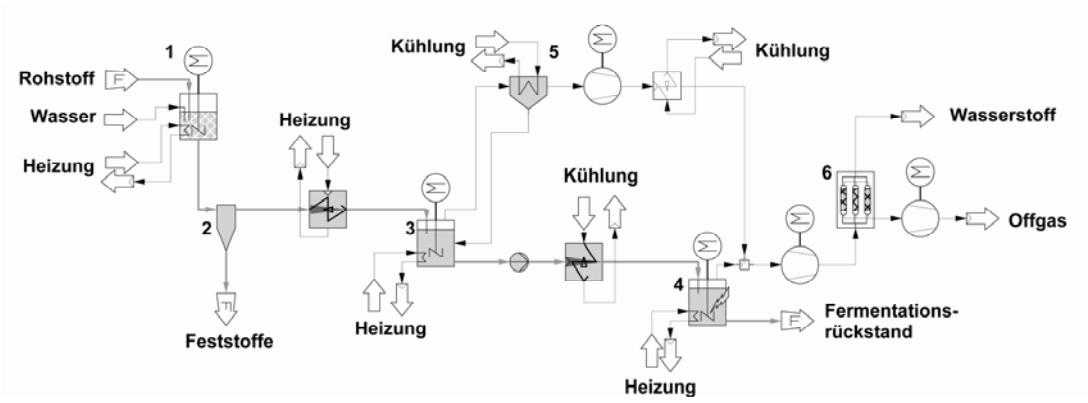


Abbildung 4.5: Flowsheet der Referenzanlage der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation
(1: Hydrolyseur, 2: Feststoffabscheidung, 3: Dunkelfermenter, 4: Photofermenter, 5: Kondensator, 6: PSA Anlage)

Tabelle 4.14: Zusammensetzung des Rohstoffs Kartoffelschalen für die Referenzanlagen der Dunkel- und Photofermentation (Antal et al., 2000; Claassen et al., 2004)

Parameter	Einheit	Wert
C	gew%, trocken	44,1
H	gew%, trocken	5,7
O	gew%, trocken	37,9
N	gew%, trocken	2,8
S	gew%, trocken	0,3
Asche	gew%, trocken	9,3
Glukose und Stärke	gew%, trocken	51,9

Die Zusammensetzung des eingesetzten Rohstoffs (Kartoffelschalen) und die wichtigsten Anlagenparameter der Referenzanlage sind in Tabelle 4.14 und Tabelle 4.15 aufgelistet. Die Simulationsergebnisse sowie die zugehörigen Literaturdaten sind in Tabelle 4.16 zusammengefasst.

Tabelle 4.15: Verwendete Anlagendaten für die Referenzanlagen der Dunkel- und Photofermentation

Anlagenparameter	Wert
Glukosegehalt Eintritt Dunkelfermenter	63,0 mmol/l Substrat
Essigsäuregehalt Eintritt Dunkelfermenter	23,0 mmol/l Substrat
Säuregehalt Austritt Dunkelfermenter	97 mmol/l Substrat
acet_to_H2 Photofermenter	72,2%

Die gegenüber den Literaturdaten leicht erhöhten Simulationsergebnisse der Wasserstoffproduktion im Dunkelfermenter und damit auch des Gesamtwirkungsgrades der Wasserstoffproduktion der gekoppelten Dunkel- und Photofermenter ergeben sich dadurch, dass in der Versuchsanlage der Literaturstelle eine Kombination aus Essig- und Milchsäure vorliegt. In der Simulation wurde jedoch angenommen, dass die Summe aller Säuren nur in Form von Essigsäure vorliegt. Wie der gewählten Literaturstelle (Claassen et al., 2005) zu entnehmen ist, liegen von den 23 mmol/l Substrat, die in den Dunkelfermenter eintreten, 16 mmol/l Substrat als Milchsäure vor. Am Austritt des Dunkelfermenters liegt der Milchsäureanteil bei 22 mmol/l Substrat. Im Dunkelfermenter werden also 6 mmol/l Substrat an Milchsäure gebildet. Bei der Bildung von Milchsäure im Dunkelfermenter entsteht kein Wasserstoff ($C_6H_{12}O_6 \rightarrow 2\ CH_3CHOHCOOH$, Antonopoulou et al., 2008), bei der Bildung von Essigsäure entstehen hingegen 2 mol H_2 pro mol Essigsäure (siehe F 2.18, Kapitel 2.1.5.1). Im konkreten Anlagenbeispiel entstehen im Dunkelfermenter also 12 mmol H_2/l Substrat zu viel, weil die Bildung von Milchsäure durch die Bildung von Essigsäure

angenähert wurde. Dieser Wert liegt sehr nahe bei dem erhaltenen Unterschied zwischen der Simulation und den Literaturdaten, der 16 mmol H_2/l Substrat beträgt.

Tabelle 4.16: Ergebnisse der Simulation und Literaturdaten der Referenzanlage für die Dunkel- und Photofermentation (Claassen et al., 2005)

Parameter	Einheit	Simulation	Literatur
Wasserstoffgehalt Austritt Dunkelfermenter	mmol/l Substrat	147	131
Wasserstoffgehalt Austritt Photofermenter	mmol/l Substrat	280	280
Gesamtwirkungsgrad Wasserstoff-produktion	%	50	47

In den Photofermenter gelangen laut Literaturangabe 22 mmol/l Substrat an Milchsäure sowie 75 mmol/l Substrat an Essigsäure. Bei der Umsetzung von Milchsäure zu Wasserstoff entstehen pro mol Milchsäure 6 mol H_2 (Barbosa et al., 2001) und pro mol Essigsäure 4 mol H_2 (siehe F 2.20, Kapitel 2.1.5.2). Laut Literaturangabe wird sowohl die Milchsäure als auch die Essigsäure im Fermenter vollständig umgesetzt. Würden die gesamten Mengen an Säure zu Wasserstoff umgesetzt, so müssten am Gasaustritt des Fermenters 432 mmol/l Substrat an Wasserstoff vorliegen. Real liegen jedoch nur 280 mmol/l Substrat an Wasserstoff vor. Der Grund dafür kann etwa die Nutzung der Säuren für das Wachstum der Mikroorganismen aber auch die Bildung von Polyhydroxybutyrat (PHB) sein (Özgür et al., 2010). In Claassen et al., 2005 wird angegeben, dass 87% der Essigsäure zu Wasserstoff umgesetzt wurden, was der Bildung von 261 mmol H_2/l Substrat entspricht. Demzufolge entstehen aus der Milchsäure 19 mmol H_2/l Substrat, was der Umsetzung von ca. 14,5% der Milchsäure entspricht. Wird die Milchsäure, wie im vorliegenden Modell, durch Essigsäure angenähert, so ergibt sich eine Umsetzungsrate von rund 72,2%. Im Photofermenter des erstellten Flowsheets wurde dieser Wert daher für den Anteil der Umsetzung der Essigsäure zu Wasserstoff eingesetzt, wie Tabelle 4.15 zu entnehmen ist. Damit ergibt sich für den im Photofermenter produzierten Wasserstoffstrom eine perfekte Übereinstimmung mit der Literaturangabe und somit eine Bestätigung der Korrektheit des entwickelten Modells.

4.6 Gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation

Die gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation steht, ebenso wie die gekoppelte Dunkel- und Photofermentation, noch am Anfang der Entwicklung. Aus diesem Grund sind auch für diese Technologie derzeit nur Anlagen im Labormaßstab verfügbar. Eine dieser

verfügbaren Laboranlagen wurde als Referenzanlage für die gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation gewählt.

Die in der Literatur angegebene Anlage (Zhu et al., 2008) besteht aus einem Wasserstoffreaktor und einem Biogasreaktor. Als Rohstoff werden Kartoffelabfälle eingesetzt, die homogenisiert, von Fremdkörpern befreit, erhitzt und auf eine Feststoffkonzentration von ca. 10 g/l verdünnt sind. Das Kartoffelsubstrat gelangt in den Dunkelfermenter, in dem die Umsetzung zu Wasserstoff und Kohlendioxid bei Umgebungsdruck und 35 °C erfolgt (siehe Abbildung 4.6). Im Gegensatz zur Referenzanlage für die gekoppelte Dunkel- und Photofermentation wird in dieser Anlage kein Verdünnungsgas (weder externes Gas noch interne Wasserdampferzeugung) im Dunkelfermenter eingesetzt, um den Wasserstoffpartialdruck im Reaktor zu senken. Der säurehaltige Rückstand aus dem Wasserstoffreaktor wird in den Biogasfermenter gepumpt, in dem die Umsetzung zum methanreichen Biogas ebenfalls bei Umgebungsdruck und 35 °C erfolgt.

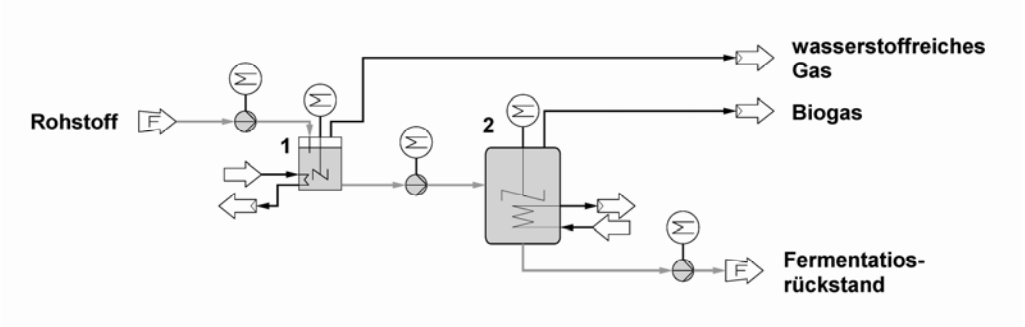


Abbildung 4.6: Flowsheet der Referenzanlage der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation
(1: Dunkelfermenter, 2: Biogasfermenter)

Der eingesetzte Rohstoff wurde in der Simulation durch die Zusammensetzung von Kartoffelschalen angenähert, die in Tabelle 4.17 angegeben ist. Die wichtigsten Parameter, die für die Simulation der Referenzanlage verwendet wurden, sind in Tabelle 4.18 aufgelistet. Die Ergebnisse der Simulation sowie die zugehörigen Literaturdaten sind in Tabelle 4.19 zusammengefasst. In der referenzierten Versuchsanlage entstehen im Dunkelfermenter neben Essigsäure und Buttersäure auch Propionsäure und Valeriansäure. Diese Säureanteile wurden bei der Simulation der Referenzanlage vernachlässigt. Unter der Annahme, dass sowohl die Propionsäure als auch die Valeriansäure dadurch entstehen, dass aufgrund des hohen Wasserstoffpartialdrucks im Dunkelfermenter Wasserstoffgas mit Zucker

beziehungsweise Essigsäure und Propionsäure reagiert, kommt es gegenüber der Simulation zu einer weiteren Verringerung der produzierten Wasserstoffmenge.

Tabelle 4.17: Zusammensetzung des Rohstoffs Kartoffelschalen für die Referenzanlagen der Dunkel- und Biogasfermentation (Antal et al., 2000; Claassen et al., 2004)

Parameter	Einheit	Wert
C	gew%, trocken, aschefrei	48,62
H	gew%, trocken, aschefrei	6,28
O	gew%, trocken, aschefrei	41,79
N	gew%, trocken, aschefrei	3,09
S	gew%, trocken, aschefrei	0,33
Glukose und Stärke	gew%, trocken	51,9

Pro mol gebildeter Propionsäure wird ein mol Wasserstoff gebunden ($C_6H_{12}O_6$ + $2H_2 \rightarrow 2CH_3CH_2COOH + 2H_2O$, Antonopoulou et al., 2008). Bei der Bildung von 1 mol Valeriansäure kommt es darüber hinaus zur Einbindung von 2 mol H_2 (CH_3CH_2COOH + $CH_3COOH + 2H_2 \rightarrow CH_3(CH_2)_3COOH + 2H_2O$, Marty et al., 1973). Laut Literatur entstehen in der Referenzanlage 232 mg/l Propionsäure und 149 kg/l Valeriansäure (Zhu et al., 2008). Damit werden in der Anlage insgesamt 10,4 mmol H_2/l Substrat für die Bildung der Säuren benötigt und verringern damit die Wasserstoffausbeute um diesen Wert gegenüber der Simulation.

Tabelle 4.18: Verwendete Anlagendaten für die Referenzanlagen der Dunkel- und Biogasfermentation

Anlagenparameter	Einheit	Wert
Feststoffkonzentration Substrat Eintritt Dunkelfermenter	g/l Substrat	10,80
glucose_to_acet Dunkelfermenter	%	44,99
glucose_to_butyr Dunkelfermenter	%	45,09
glucose_to_CH4 Biogasfermenter	%	69,00
acet_to_CH4 Biogasfermenter	%	76,45
butyr_to_CH4 Biogasfermenter	%	98,11
prod_CH4 Biogasfermenter	-	0,614
Methangehalt Biogas	vol%, trocken	76,00

Laut Angabe der Autoren der Veröffentlichung zur Referenzanlage ist die real gemessene Wasserstoffmenge darüber hinaus weitaus niedriger, als der Umsetzung des Substrates entspricht (Zhu et al., 2008). Diese Abweichung wird durch Bildung von Methan und Wasserstoffverluste über den austretenden säurereichen Fermentationsrückstand erklärt.

Aus diesem Grund ergibt sich auch die große Abweichung zwischen dem Simulationsergebnis und dem Messwert, da bei der Simulation keine Verluste oder Methanbildung berücksichtigt wurden.

Tabelle 4.19: Ergebnisse der Simulation und Literaturdaten der Referenzanlage für die Dunkel- und Biogasfermentation (Zhu et al., 2008)

Parameter	Einheit	Simulation	Literatur
Essigsäuregehalt Austritt Dunkelfermenter	mg/l Substrat	1866	1866
Buttersäuregehalt Austritt Dunkelfermenter	mg/l Substrat	1372	1372
Wasserstoffgehalt Austritt Dunkelfermenter	mmol/l Substrat	93	14,3
Essigsäuregehalt Austritt Biogasfermenter	mg/l Substrat	441	441
Buttersäuregehalt Austritt Biogasfermenter	mg/l Substrat	26	26
Methangehalt Austritt Biogasfermenter	mmol/l Substrat	110	110

5 Simulation der gewählten Anlagenvarianten

Ausgehend von den im vorigen Kapitel dargestellten Referenzanlagen wurden Anlagenvarianten entwickelt, die für die Produktion von Wasserstoff in der gewünschten Reinheit und in der angestrebten Anlagengröße realisierbar erscheinen. Für die Reinheit des Wasserstoffs wurde davon ausgegangen, dass an den Wasserstofftankstellen Wasserstoff in der in Kapitel 2.2.5 angegebenen erforderlichen Qualität verkauft wird. Für einige Technologien wurden mehrere Anlagenvarianten modelliert und simuliert, da in diesen Fällen mehrere Produktionspfade Erfolg versprechend erschienen. Einige Technologien wurden für mehrere Arten von Rohstoffen simuliert, um auch den Einfluss des gewählten Einsatzstoffes mitberücksichtigen zu können. In diesen Fällen wurde jeweils die Anlagengröße konstant gehalten und die Menge an eingesetztem Rohstoff an diese Anlagengröße angepasst. Die einzelnen Anlagenvarianten sind nachfolgend im Detail dargestellt.

5.1 Dampfreformierung von Erdgas

Das gewählte Anlagenlayout der Dampfreformierung von Erdgas weicht nur in geringem Maß von der in Kapitel 4.1 dargestellten Referenzanlage ab. Im Gegensatz zur Referenzanlage wird die überschüssige Menge an produziertem Dampf, die nicht für die Dampfreformierungsreaktion benötigt wird, nicht als Prozessdampf in externen Anlagenteilen genutzt, sondern zur Erzeugung von Strom in eine Dampfturbine geleitet. Zusätzlich zur Dampfturbine sind auch die weiteren erforderlichen Standardkomponenten eines Dampfkreislaufes (Dampfkondensator und Speisewassertank) in der Anlage implementiert. Das Layout der analysierten Anlage für die Dampfreformierung von Erdgas ist in Abbildung 5.1 dargestellt. Die Zusammensetzung des eingesetzten Erdgases entspricht den Angaben in Tabelle 4.2 (siehe Kapitel 4.1). Die Betriebsparameter der Anlage wurden gegenüber der Referenzanlage nicht verändert. Alle in der Simulation eingesetzten Parameter sind im Anhang (Kapitel 11.5.1) zusammengefasst.

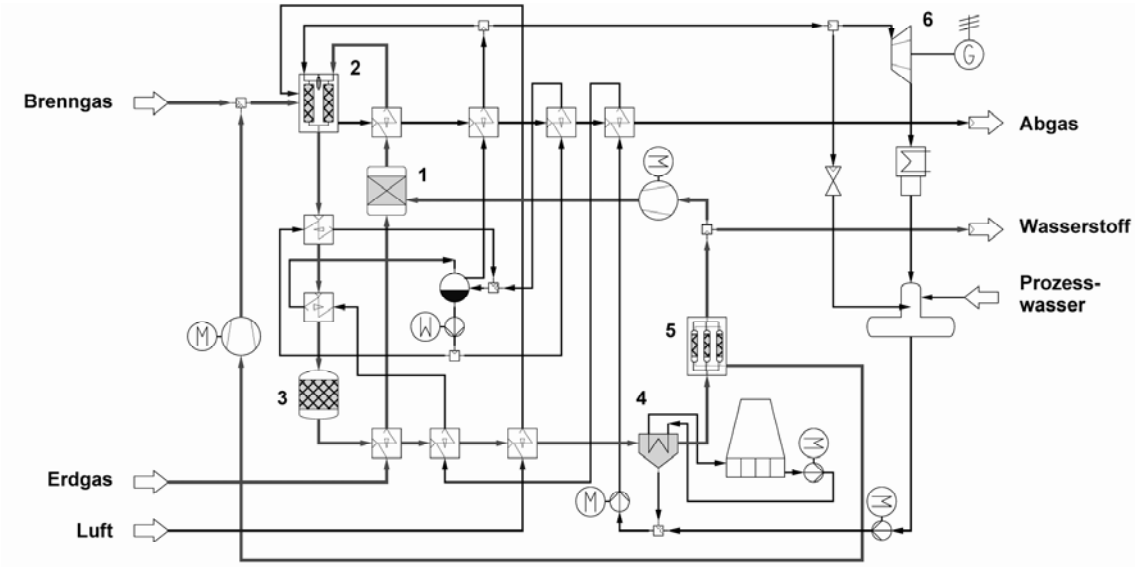


Abbildung 5.1: Flowsheet des gewählten Anlagenlayouts für die Dampfreformierung von Erdgas
(1: Reaktor zur Hydrierung und adsorptiven Entfernung von Chlor- und Schwefelsubstanzen, 2: Dampfreformer, 3: Wassergas-Shift-Reaktor, 4: Kondensator, 5: PSA Anlage, 6: Dampfturbine)

5.2 Alkalische Elektrolyse

Für die alkalische Elektrolyse wurden die beiden in Kapitel 4.2 beschriebenen Varianten der Referenzanlagen mit der Abänderung übernommen, dass die Wasserstoffreinheit an die in Kapitel 2.2.5 angegebenen Anforderungen angepasst wurde. Die Eingabewerte für die Simulation der Anlagen sind im Anhang (Kapitel 11.5.2) aufgelistet.

5.3 Dampfreformierung von Biogas

Für die Dampfreformierung von Biogas wird die in Kapitel 4.3 dargestellte Referenzanlage der Biogasfermentation mit einer Dampfreformierungsanlage nach dem Layout der in Kapitel 5.1 dargestellten Reformierungsanlage mit integrierter Stromerzeugung gekoppelt. Dabei werden drei verschiedene Anlagenvarianten untersucht. In zwei Varianten wird die Dampfreformierungsanlage im dezentralen Maßstab on-site mit der Biogasfermentationsanlage verbunden. Die einfachste Variante sieht die direkte Kopplung der beiden Anlagenteile vor, in der zweiten Variante wird das im Biogas enthaltene CO_2 vor der

Einleitung in die Reformierungsanlage abgetrennt. Die dritte Anlagenvariante geht davon aus, dass das Biogas der Fermentationsanlagen auf Erdgasqualität aufgereinigt und in das Erdgasnetz eingespeist wird. Das Gas wird über das Erdgasnetz in eine zentrale Reformierungsanlage geleitet und dort zu Wasserstoff reformiert. Die drei Anlagenvarianten sind nachfolgend detailliert beschrieben. Alle drei Anlagenvarianten wurden mit den Rohstoffen Maissilage, Kartoffelabfälle, Biotonnenabfälle und Grünschnitt simuliert. Die zugehörigen Zusammensetzungen sowie die Heizwerte der einzelnen Rohstoffe sind im Anhang (Kapitel 11.5.3) angeführt.

5.3.1 Direkte on-site Reformierung des Biogases

In dieser einfachsten Variante der Reformierung von Biogas wird das in der Biogasanlage erzeugte Gas direkt in die Dampfreformierungsanlage eingespeist. Diese Reformeranlage weist durch die kleine Anlagengröße niedrigere Wirkungsgrade auf, als die Reformeranlage der Größenordnung Schwechat (Hansen, 2005; OECD/IEA, 2005).

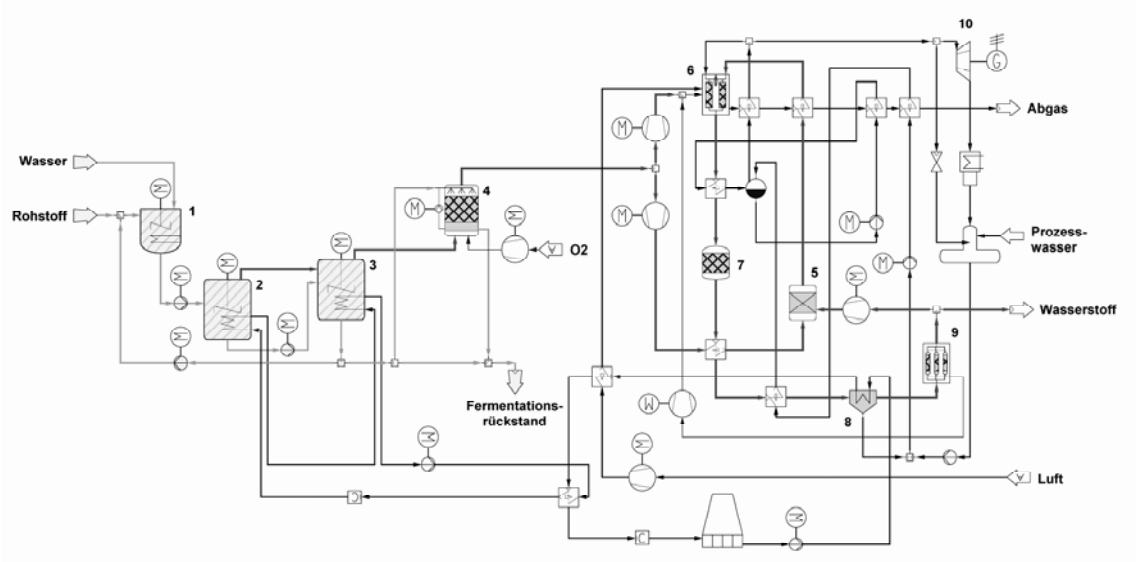


Abbildung 5.2: Flowsheet der Biogasanlage mit direkter on-site Dampfreformierung
(1: Maischebehälter, 2: Biogasfermenter, 3: Nachgärbehälter, 4: Biologische Entschwefelungskolonne, 5: Reaktor zur Hydrierung und adsorptiven Entfernung von Chlor- und Schwefelsubstanzen, 6: Dampfreformer, 7: Wassergas-Shift-Reaktor, 8: Kondensator, 9: PSA Anlage, 10: Dampfturbine)

Die für die Simulation der Anlagenteile verwendeten Eingabewerte sind im Anhang (Kapitel 11.5.3) zusammengefasst. Das Layout der Biogasanlage mit direkter on-site Dampfreformierung ist in Abbildung 5.2 dargestellt. Das erzeugte Biogas wird in der Reformeranlage sowohl als Einsatzgas für die Umwandlung zu Wasserstoff als auch als Brennstoff für den Dampfreformer, um die benötigte Reaktionswärme bereitzustellen, verwendet. Bei der Verknüpfung der beiden Anlagenteile wurde darüber hinaus die Abwärme des Kondensators vor der PSA-Anlage im Dampfreformierungsteil dazu genutzt, um den Biogasfermenter und den Nachgärbehälter der Biogasanlage aufzuheizen. Dadurch kann eine externe Wärmezufuhr für die Fermenterbeheizung entfallen.

5.3.2 On-site Reformierung nach CO_2-Abtrennung aus dem Biogas

In dieser Anlagenvariante wird die Biogasanlage wieder mit einer on-site Dampfreformierungsanlage gekoppelt. Aus dem erzeugten Biogas wird in diesem Fall jedoch das enthaltene CO_2 mittels Membrantechnik abgetrennt, bevor es in die lokale Reformeranlage eingespeist wird. Durch diesen Schritt wird der Gasstrom in der Reformeranlage verringert und insbesondere der aufzuheizende „Ballastanteil" des zu reformierenden Gases reduziert. Das führt dazu, dass sich der benötigte Gasanteil zur Beheizung des Dampfreformers verringert und damit die Wasserstoffausbeute im Prozess erhöht werden kann. Zusätzlich wird durch die verringerte Gasmenge weniger Energie für die Kompression des Gases auf den Druck des Dampfreformers benötigt. Das Flowsheet der betrachteten Anlage ist in Abbildung 5.3 dargestellt.

Die Membrananlage zur CO_2-Abtrennung wurde nach dem Vorbild der Anlage in Bruck an der Leitha in Niederösterreich gestaltet (Harasek et al., 2007; Miltner et al., 2008a). Sie besteht aus einer Gaskompression, einer Abtrennung von Wasserdampf durch Kondensation mit anschließender Wiederaufwärmung des Gases und den Membranen zur CO_2-Abtrennung. Abweichend von der Anlagenkonfiguration in der oben genannten Literatur wurde hier kein Adsorber vor den Membranen implementiert. Dieser Adsorber dient in der Anlage in Bruck an der Leitha zur H_2S-Abtrennung, um die Anforderungen an das Gas für die Netzeinspeisung erfüllen zu können. In der hier betrachteten Anlage wird das Biogas jedoch in eine Dampfreformierungsanlage eingeleitet, die ohnehin eine Adsorptionsstufe zur Entfernung von Schwefelkomponenten aus dem Gas enthält. Aus diesem Grund wird dieser Prozessschritt in der gewählten Anlagenverschaltung nicht benötigt. Das CO_2-reiche Permeat der Membrananlage enthält auch geringe Anteile an Methan. Daher wird es mit dem Brenngas für den on-site Dampfreformer gemischt und zur Beheizung dieses Reformers

herangezogen. Damit kann die Freisetzung des treibhauswirksamen Methans in die Atmosphäre verhindert werden.

Auch in dieser Anlagenvariante wird die abzuführende Energie der Wasserdampfkondensation vor der PSA-Anlage der on-site Dampfreformierungsanlage dazu genutzt, den Fermenter sowie den Nachgärbehälter zu beheizen. Die Dampfreformierungsanlage weist aufgrund der kleineren Größenordnung wieder niedrigere Wirkungsgrade auf, als die Anlage in der Größenordnung von Schwechat (Hansen, 2005; OECD/IEA, 2005). Alle Eingabewerte, die für die Simulation der Anlage verwendet wurden, sind im Anhang (Kapitel 11.5.3) aufgelistet.

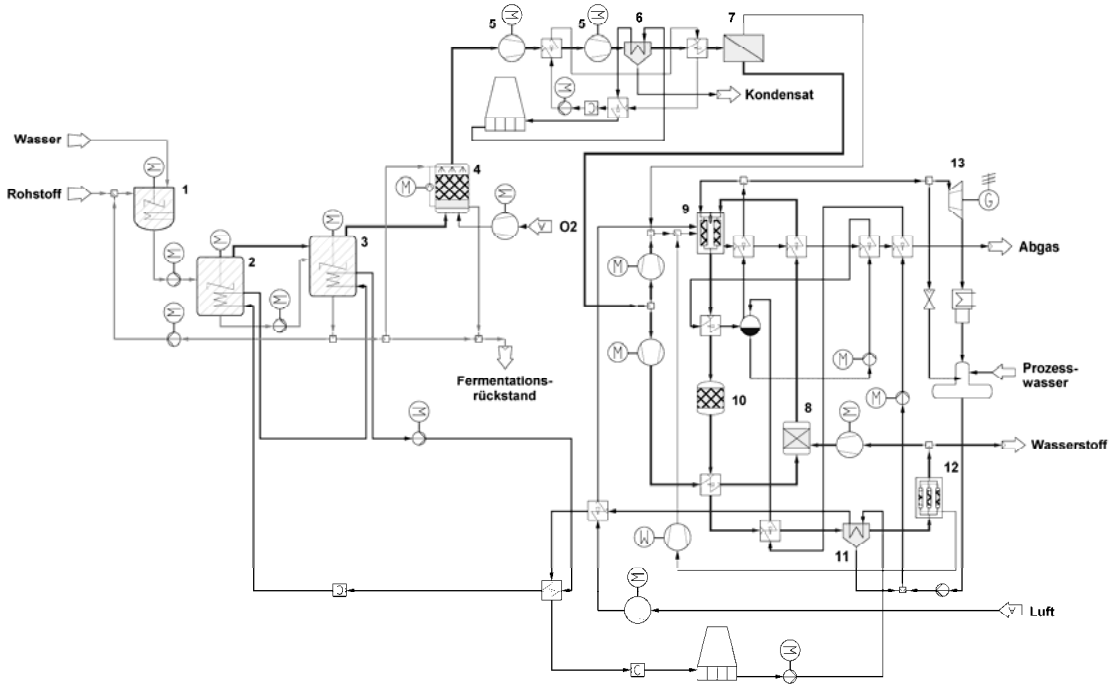


Abbildung 5.3: Flowsheet der Biogasanlage mit CO_2-Abtrennung und on-site Reformierung (1: Maischebehälter, 2: Biogasfermenter, 3: Nachgärbehälter, 4: Biologische Entschwefelungskolonne, 5: zweistufiger Kompressor, 6: Kondensator, 7: Membranmodule, 8: Reaktor zur Hydrierung und adsorptiven Entfernung von Chlor- und Schwefelsubstanzen, 9: Dampfreformer, 10: Wassergas-Shift-Reaktor, 11: Kondensator, 12: PSA Anlage, 13: Dampfturbine)

5.3.3 Zentrale Reformierung des Biogases nach Aufreinigung und Netzeinspeisung

Die Anlagenvariante der Biogasreformierung in einer zentralen Dampfreformierungsanlage geht davon aus, dass das erzeugte Biogas auf Erdgasqualität aufgereinigt und in das bestehende Erdgasnetz eingespeist wird. Über dieses Erdgasnetz wird das Biogas mehrerer Biogasanlagen zu einer zentralen Dampfreformierungsanlage geleitet, die die gleiche Größenordnung wie die Referenzanlage in Schwechat aufweist. Der Einsatz der zentralen Reformeranlage bewirkt, dass im Gegensatz zu den oben genannten Anlagenvarianten der Umsetzungswirkungsgrad in der Reformeranlage hoch ist. Gleichzeitig ermöglicht die Anspeisung der zentralen Reformeranlage über das Erdgasnetz den Einsatz von dezentralen Biogasanlagen, womit die Möglichkeit eines nachhaltigen Betriebs gegeben ist.

Um das Biogas in das Erdgasnetz einspeisen zu können, müssen die vorgegebenen Anforderungen der zuständigen Behörden an das Gas (ÖVGW, 2001; ÖVGW, 2006) eingehalten werden. In diesen Richtlinien werden die Anteile an unerwünschten Gasbestandteilen limitiert sowie Mindestanforderungen an die brenntechnischen Kenndaten, wie den Brennwert und den Wobbe-Index des Gases, gestellt. Um diese Anforderungen erfüllen zu können, müssen der Schwefelwasserstoff, der Wasserdampf sowie das Kohlendioxid aus dem Biogas entfernt werden. In der betrachteten Anlagenvariante wird für die Abtrennung des Schwefelwasserstoffs ein Adsorber eingesetzt. Die grobe Abtrennung des Wasserdampfes erfolgt in einem Kondensator, die weitergehende Trocknung des Gases sowie die CO_2-Abtrennung erfolgen mittels Membrantechnologie. Das Anlagenkonzept für die Biogasaufreinigung basiert dabei, wie bei der Biogasreformierung mit CO_2-Abtrennung, auf dem bereits erprobten Konzept der Biogasaufbereitung für die Netzeinspeisung, das in der Biogasanlage in Bruck an der Leitha in Niederösterreich eingesetzt wird (Harasek et al., 2007; Miltner et al., 2008a). Im Gegensatz zur reinen CO_2-Abtrennung, wie sie im vorigen Kapitel eingesetzt wurde, wird hier wie erwähnt auch der H_2S-Adsorber eingesetzt. Das Flowsheet des Anlagenkonzepts mit zentraler Dampfreformierung ist in Abbildung 5.4 dargestellt.

Bei dieser Anlagenvariante kann keine Wärmeintegration zwischen der Reformierungsanlage und der Biogasanlage erfolgen. Aus diesem Grund wird für die Beheizung des Fermenters und des Nachgärbehälters eine externe Beheizung benötigt. In dieser Variante ist es auch nicht möglich, das abgetrennte CO_2-reiche Offgas aus der Membrananlage zum Brenngas des Dampfreformers beizumischen. Aufgrund der Treibhauswirksamkeit des enthaltenen Methananteils ist für diesen Strom jedoch eine Nachnutzung vorzusehen. Beispiele dafür sind die Nutzung in einem Gasmotor, einem

Schwachgasbrenner oder einem Katalysator-Brenner (Makaruk et al., 2010). Je nach Methangehalt des Offgases kann dabei eine Zumischung von Biogas erforderlich sein, um einen stabilen Betrieb zu gewährleisten. In der vorliegenden Arbeit wird diese Verwertung des Offgases jedoch nicht weiter betrachtet. Die Eingabewerte, die bei der Simulation dieser Anlagenvariante verwendet wurden, sind im Anhang zusammengefasst (siehe Kapitel 11.5.3).

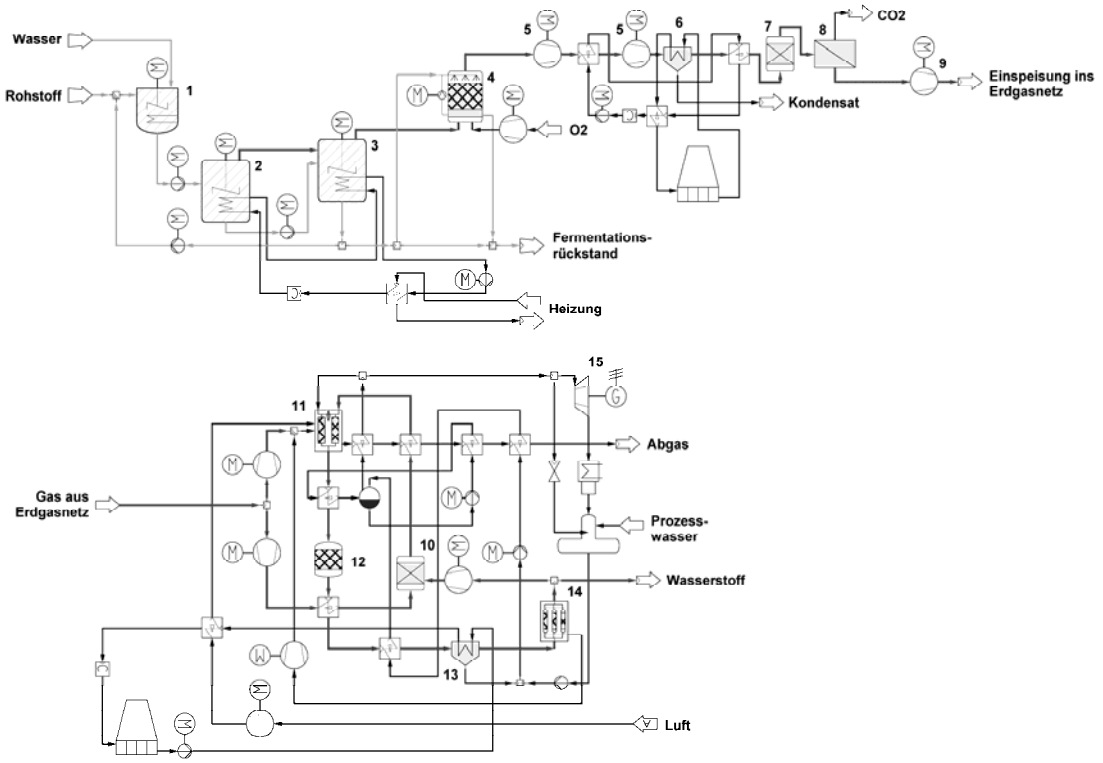


Abbildung 5.4: Flowsheet der Biogasanlage mit Gasaufreinigung, Netzeinspeisung und zentraler Reformeranlage
(1: Maischebehälter, 2: Biogasfermenter, 3: Nachgärbehälter, 4: Biologische Entschwefelungskolonne, 5: zweistufiger Kompressor, 6: Kondensator, 7: H2S-Adsorber, 8: Membranmodule, 9: Hochdruckkompressor, 10: Reaktor zur Hydrierung und adsorptiven Entfernung von Chlor- und Schwefelsubstanzen, 11: Dampfreformer, 12: Wassergas-Shift-Reaktor, 13: Kondensator, 14: PSA Anlage, 15: Dampfturbine)

5.4 Dampfreformierung von Vergasergas

Auch für die Technologie der Reformierung von Vergasergas wurden, wie bei der Dampfreformierung von Biogas, drei verschiedene Anlagenvarianten untersucht. Dabei handelt es sich um die gleichen drei Layoutprinzipien: direkte on-site Reformierung des Vergasergases, on-site Reformierung nach vorhergehender CO_2-Abtrennung und zentrale Reformierung des Vergasergases mehrerer Anlagen, das nach einer Aufbereitung auf Erdgasqualität in das Erdgasnetz eingespeist und über dieses Netz zur zentralen Reformeranlage transportiert wird. Die verschiedenen Anlagenvarianten sind nachfolgend detailliert beschrieben. In allen drei Anlagenvarianten werden Holzhackschnitzel als Rohstoff eingesetzt.

5.4.1 Direkte on-site Reformierung

In dieser einfachsten Anlagenvariante wird das erzeugte Vergasergas aus der Anlage, die der Referenzanlage in Kapitel 4.4 entspricht, in einem zweiten Teerwäscher nochmals von Teer befreit. Diese zweite Teerwäsche wird benötigt, um eine erhöhte Koksbildung im Dampfreformer zu vermeiden. Anschließend gelangt das gereinigte Vergasergas direkt in eine angeschlossene Dampfreformierungsanlage, wie in Abbildung 5.5 dargestellt ist.

Die Reformierungsanlage entspricht dabei im Layout der Referenzanlage für die Dampfreformierung von Erdgas (siehe Kapitel 4.1), weist jedoch eine geringere Anlagengröße auf. Wie bereits bei der Biogasreformierung erwähnt wurde, gilt auch hier, dass die Wirkungsgrade der on-site Dampfreformierungsanlage niedriger sind, als in einer zentralen Anlage der Größenordnung Schwechat (Hansen, 2005; OECD/IEA, 2005). Wie bei den Biogasanlagen wird auch hier das Vergasergas sowohl für die Reformierungsreaktion als auch für die Beheizung des Dampfreformers eingesetzt. Da in der Vergasungsanlage kein Heizbedarf besteht, kann keine Wärme zwischen den beiden Anlagenteilen verschoben werden. Im Idealfall sollte daher für die produzierte Abwärme der Vergasungsanlage ein Abnehmer in Form eines Fernwärmenetzes oder einer weiteren Industrieanlage mit Wärmebedarf gefunden werden. Die Eingabewerte, die für die Simulation der Anlage verwendet wurden, sind im Anhang (siehe Kapitel 11.5.4) angeführt.

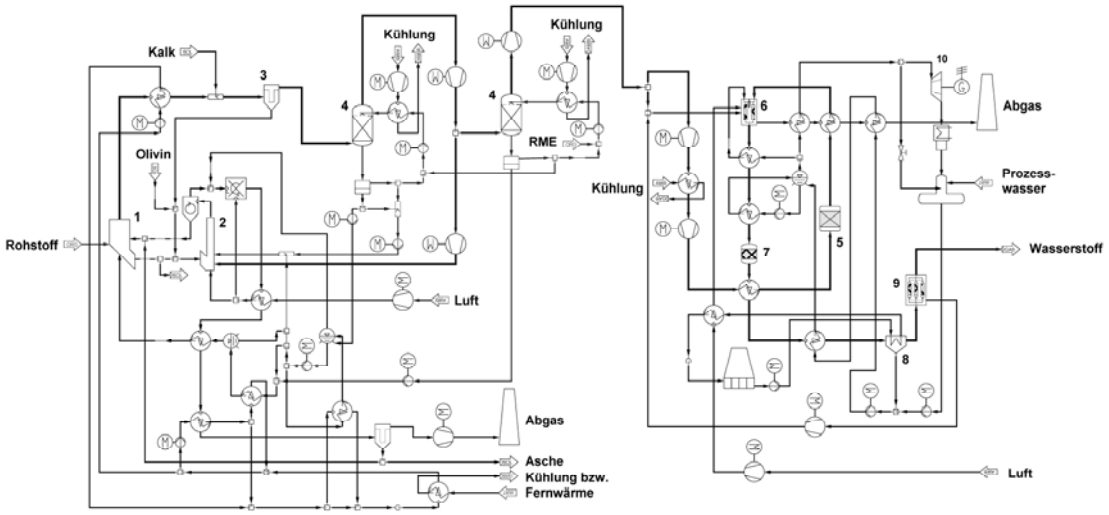


Abbildung 5.5: Flowsheet der Vergaseranlage mit direkter on-site Reformierung
(1: Biomassevergaser, 2: Verbrennungsreaktor, 3: Schlauchfilter, 4: Teerwäscher, 5: Reaktor zur Hydrierung und adsorptiven Entfernung von Chlor- und Schwefelsubstanzen, 6: Dampfreformer, 7: Wassergas-Shift-Reaktor, 8: Kondensator, 9: PSA Anlage, 10: Dampfturbine)

5.4.2 On-site Reformierung nach CO_2-Abtrennung

Die Anlagenvariante der on-site Reformierung des Vergasergases nach vorheriger Abtrennung des CO_2-Anteils wurde wiederum gewählt, um den Heizbedarf im Reformer durch die Verringerung des „Ballastanteils" im Vergasergas zu senken. Auch hier wird wieder ein zweiter Teerwäscher zur Vermeidung der Verkokung im Reformer eingesetzt. Die CO_2-Abtrennung erfolgt, im Gegensatz zum Biogasprozess, mittels MEA-Wäsche, wie das Flowsheet in Abbildung 5.6 zeigt. Der Grund dafür ist, dass das Vergasergas einen hohen Anteil an Wasserstoff enthält, der bei der CO_2-Abtrennung mittels Membrantechnik gemeinsam mit dem Kohlendioxid abgetrennt und somit verloren gehen würde. Bei der Aminwäsche werden hingegen neben dem CO_2 allenfalls weitere saure Gasbestandteile wie SO_2 oder HCl abgetrennt, der Wasserstoff verbleibt jedoch im Vergasergas. Die CO_2-beladene MEA-Lösung wird in einem Stripper mittels Dampf regeneriert und wieder in den Prozess zurückgeführt. Nur ein Teil der Lösung muss abgezogen und durch frische MEA-Lösung ersetzt werden. Der Regenerierungsschritt ist im Flowsheet nicht dargestellt. Er wurde jedoch in Form des Dampfbedarfs mitberücksichtigt. Die Ermittlung der Menge an MEA-Lösung, die laufend ersetzt werden muss, erfolgt hingegen im Modell der MEA-Wäsche, wie

in Kapitel 3.4.11.3 gezeigt wurde. Die für die Simulation der Anlage verwendeten Eingabewerte sind im Anhang (Kapitel 11.5.4) zusammengestellt.

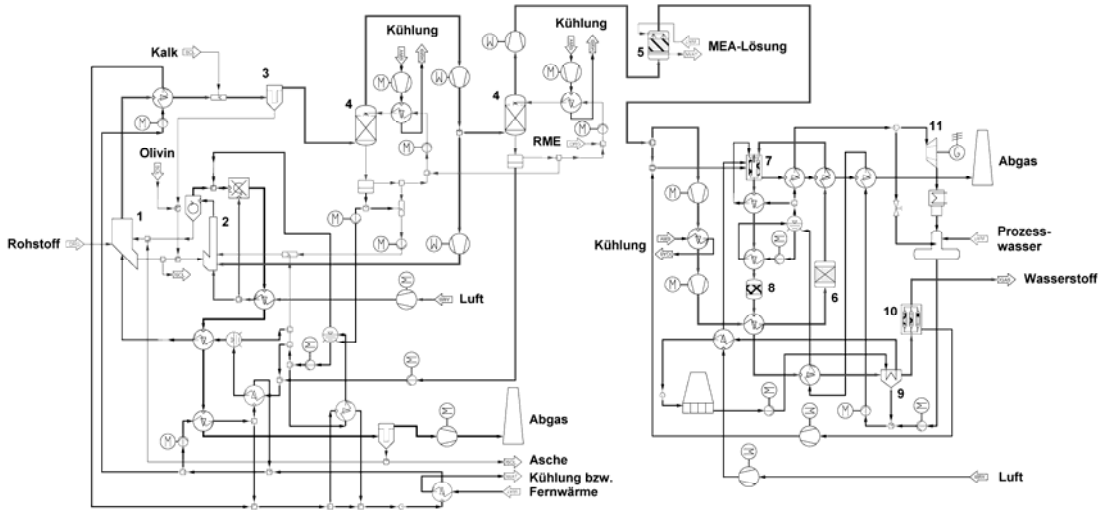


Abbildung 5.6: Flowsheet der Vergaseranlage mit CO_2-Abtrennung und on-site Reformierung
(1: Biomassevergaser, 2: Verbrennungsreaktor, 3: Schlauchfilter, 4: Teerwäscher, 5: CO_2-Absorber, 6: Reaktor zur Hydrierung und adsorptiven Entfernung von Chlor- und Schwefelsubstanzen, 7: Dampfreformer, 8: Wassergas-Shift-Reaktor, 9: Kondensator, 10: PSA Anlage, 12: Dampfturbine)

5.4.3 Zentrale Reformierung des Vergasergases nach Aufbereitung und Netzeinspeisung

In dieser Anlagenvariante wird wieder ein Konzept mit Gasaufbereitung, Netzeinspeisung und zentraler Dampfreformierung betrachtet. Im Unterschied zum Biogas muss das Vergasergas allerdings wesentlich umfangreicher aufbereitet werden. Der hohe Gehalt an Wasserstoff im Vergasergas (ca. 39 vol%, trocken) legt den Einsatz eines Methanierungsschrittes nahe, um die angestrebte Erdgasqualität erreichen zu können. In der Referenzanlage in Güssing sind bereits Versuche zur Methanierung des Vergasergases durchgeführt worden (Seemann et al., 2004; Seemann et al., 2005; Hofbauer et al., 2006; Seemann et al., 2006). Diese Versuche haben gezeigt, dass der Teeranteil, der sich nach dem Teerwäscher noch im Vergasergas befindet, im entwickelten Methanierungsreaktor ebenfalls zu Methan umgewandelt werden kann. Daher wird in dieser Anlagenvariante keine

zweite Teerwäscherstufe benötigt. Da der Katalysator für die Methanierung allerdings durch Chlor- und Schwefelkomponenten vergiftet wird, muss das Gas zunächst durch Hydrierung und Adsorption von diesen Bestandteilen befreit werden. Im Flowsheet der Anlage (siehe Abbildung 5.7) wird dieser Schritt durch das Adsorbermodell repräsentiert.

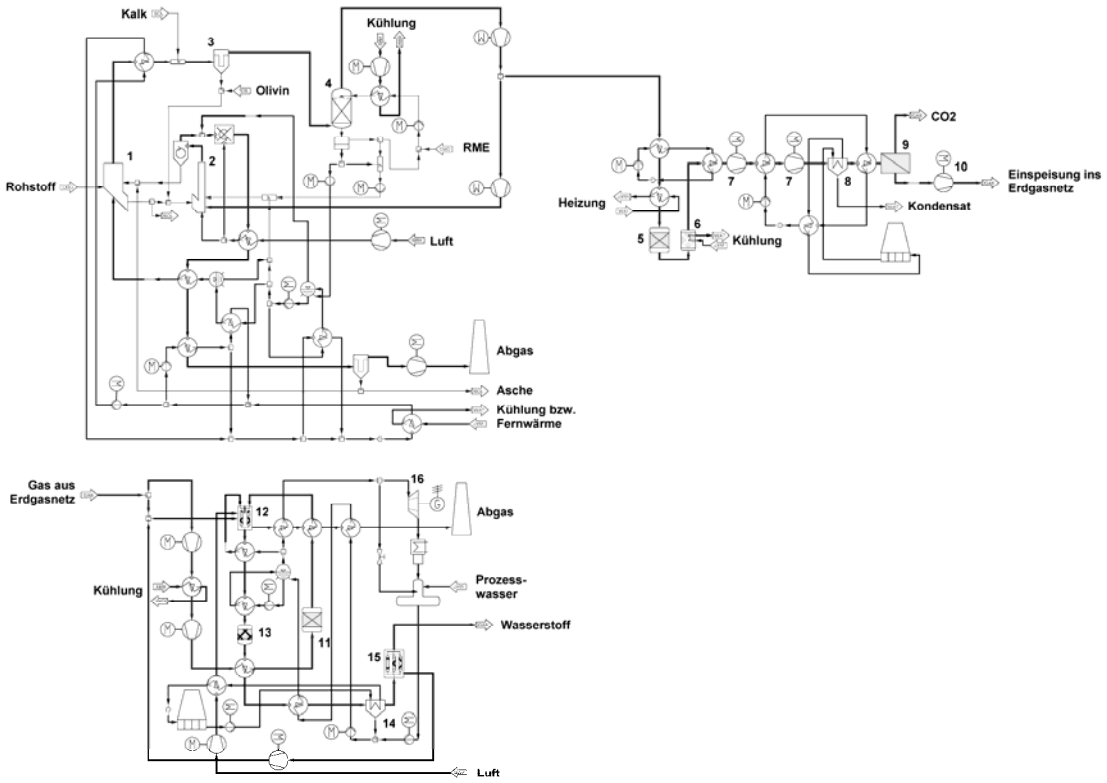


Abbildung 5.7: Flowsheet der Vergaseranlage mit Methanierung, Netzeinspeisung und zentraler Reformeranlage
(1: Biomassevergaser, 2: Verbrennungsreaktor, 3: Schlauchfilter, 4: Teerwäscher, 5: Reaktor zur Hydrierung und adsorptiven Entfernung von Chlor- und Schwefelsubstanzen, 6: Methanierungsreaktor, 7: zweistufiger Kompressor, 8: Kondensator, 9: Membranmodule, 10: Hochdruckkompressor, 11: Reaktor zur Hydrierung und adsorptiven Entfernung von Chlor- und Schwefelsubstanzen, 12: Dampfreformer, 13: Wassergas-Shift-Reaktor, 14: Kondensator, 15: PSA Anlage, 16: Dampfturbine)

Am Austritt des Methanierungsreaktors weist das produzierte Gas einen hohen Anteil an CO_2 auf (ca. 49 vol%, trocken), der vor der Netzeinspeisung abgetrennt werden muss, um die Anforderungen an das Gas zur Netzeinspeisung erfüllen zu können (ÖVGW, 2001;

ÖVGW, 2006). Diese CO_2-Abtrennung kann hier, wie in der Biogasanlage mit Netzeinspeisung, in einer Membrananlage erfolgen, da aufgrund des Methanierungsschrittes nur mehr Spuren an Wasserstoff im Gas vorhanden sind und daher die Verluste durch die Abtrennung in der Membrananlage gering sind. Um die geforderte Erdgasqualität in einer realen Anlage erreichen zu können, ist es möglicherweise erforderlich, noch eine zusätzliche Reinigungsstufe zur Abtrennung des NH_3-Anteils im Vergasergas zu implementieren. Darüber hinaus ist bei diesem Anlagenbetrieb besonders darauf zu achten, dass keine Falschluft in das Vergasergas gelangt, da ansonsten die Einhaltung der brenntechnischen Kenndaten sowie der Grenzwerte für Stickstoff und Sauerstoff für die Netzeinspeisung erschwert wird. Im vorliegenden Anlagenkonzept wird davon ausgegangen, dass die Anforderungen an die Gasqualität durch die implementierten Aufbereitungsschritte erfüllt werden können. In der Realität muss dieser Beweis jedoch erst erbracht werden.

Das aufbereitete Vergasergas mehrerer Vergaseranlagen wird in der betrachteten Prozessvariante über das Erdgasnetz in eine zentrale Dampfreformierungsanlage der Größenordnung Schwechat geleitet. Die Reformeranlage weist dabei wieder das Layout und die Größenordnung der Referenzanlage für die Dampfreformierung von Erdgas (siehe Kapitel 4.1) sowie den damit verbundenen höheren Wirkungsgrad, verglichen mit der on-site Reformierungsanlage, auf. Dieser erhöhte Wirkungsgrad der Reformeranlage wird jedoch durch eine sehr komplexe Prozesskette erkauft, in der der Wasserstoffanteil des Vergasergases zunächst in Methan umgewandelt wird, das anschließend in der zentralen Reformeranlage wieder zu Wasserstoff rückgewandelt wird. Dabei darf nicht außer Acht gelassen werden, dass jeder dieser Umwandlungsschritte naturgemäß auch mit Verlusten verbunden ist. Darüber hinaus geht in der Membrananlage sowohl ein Teil des erzeugten Methans als auch der nicht zu Methan umgewandelte Wasserstoffanteil verloren. All diese Verluste führen zu einer Verringerung der Wasserstoffausbeute der Anlagenvariante. Es bleibt daher im Detail zu untersuchen, ob der erhöhte Wirkungsgrad der zentralen Reformierungsanlage die genannten Verluste wettmachen kann, damit diese Variante gegenüber den on-site Varianten konkurrenzfähig ist.

Auch hier ist, wie bei der Anlagenvariante der Biogasfermentation mit Netzeinspeisung und zentraler Reformierungsanlage, wieder darauf hinzuweisen, dass der abgetrennte Gasstrom aus der Membrananlage ein Gemisch aus CO_2 und Methan darstellt. Dieses Gasgemisch sollte daher aufgrund seiner Treibhauswirksamkeit nicht in die Atmosphäre entlassen, sonder weiter genutzt werden. Beispiele für eine Nutzung sind, wie bereits bei der Biogasvariante mit Netzeinspeisung erwähnt, die Nutzung in einem Gasmotor, einem Schwachgasbrenner oder einem Katalysator-Brenner (Makaruk et al., 2010). Auch hier kann wieder, je nach Methangehalt des Offgases, eine Zumischung von Vergasergas erforderlich

sein, um einen stabilen Betrieb zu gewährleisten. Die direkte Nutzung im Verbrennungsteil des FICFB-Vergasers ist aufgrund des hohen Massenstroms des Offgases nicht möglich. In der vorliegenden Arbeit wird die konkrete Weiterverwendung des Offgasstroms jedoch nicht näher untersucht. Die Eingabewerte für die Simulation der Biomassevergasung mit zentraler Dampfreformierung können dem Anhang (Kapitel 11.5.4) entnommen werden.

5.5 Gekoppelte Dunkel- und Photofermentation

Der Anlagenaufbau der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation wurde gegenüber der Referenzanlage in Kapitel 4.5 nur geringfügig verändert. Es wurde eine Wärmeintegration zwischen dem Ein- und Austritt des Dunkelfermenters implementiert (siehe Abbildung 5.8, Position 7), wie sie auch von Ljunggren et al. (Ljunggren et al., 2010) vorgeschlagen wurde. Weiters wird das Kondensat des Produktgases des Dunkelfermenters mit dem aus dem Gebläse austretenden Produktgas des Dunkelfermenters vorgewärmt (siehe Abbildung 5.8, Position 8). Eine weitere Änderung gegenüber der Referenzanlage ist die Einmischung von Wasser zum feststofffreien Substratstrom, um die geforderte Zuckerkonzentration im eintretenden Substratstrom des Dunkelfermenters erreichen zu können (siehe Abbildung 5.8, Mixer zwischen Position 2 und 7).

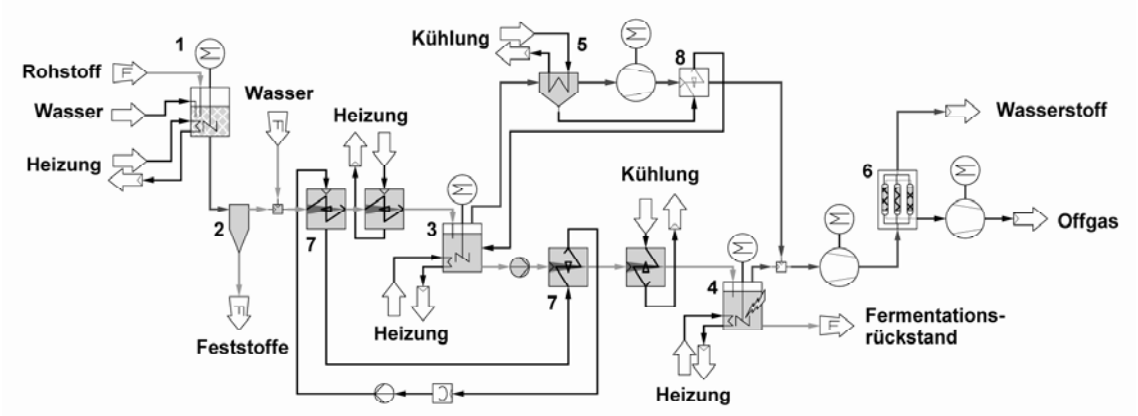


Abbildung 5.8: Flowsheet der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation
(1: Hydrolyseur, 2: Feststoffabscheidung, 3: Dunkelfermenter, 4: Photofermenter, 5: Kondensator, 6: PSA Anlage, 7: Wärmetauscher zur Wärmeintegration, 8: Wärmetauscher zur Kondensatvorwärmung)

Als Rohstoffe wurden einerseits Maiskörner und andererseits Kartoffelschalen herangezogen. Die Berechnungen wurden darüber hinaus für unterschiedliche Prozessparameter durchgeführt. Einerseits wurden die Anteile an Glukose und Säuren, die im Dunkel- bzw.

Photofermenter zu Wasserstoff umgesetzt werden, variiert. Hier wurde eine Variante gewählt, in der in beiden Fermentern jeweils 80% der Glukose bzw. der Säuren umgesetzt werden. Diese Variante repräsentiert die derzeit als realisierbar erachteten Produktionseffizienzen der beiden Fermenter. In der zweiten Variante wurden die Umsätze jeweils auf 100% gesetzt. Diese Variante ist real nicht erreichbar, gibt jedoch das theoretische Maximum der Wasserstoffproduktion an und dient somit der Abschätzung des möglichen Verbesserungspotenzials für diese Technologie. Andererseits wurde die Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage variiert. Dabei wurde eine Variante mit derzeit realistischen 80% Rückgewinnung des eintretenden Wasserstoffs gewählt, sowie eine Variante mit 95% Wasserstoffrückgewinnung. Dieser erhöhte Wert scheint in zukünftigen PSA-Anlagen erreichbar zu sein. Darüber hinaus besteht die Möglichkeit, anstelle der PSA-Anlage einen Membrankontaktor einzusetzen, der nahezu keine Wasserstoffverluste aufweisen dürfte (Modigell et al., 2008). Die Eingabewerte der Simulationen der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation, inklusive der verwendeten Rohstoffzusammensetzungen, sind im Anhang (siehe Kapitel 11.5.5) angeführt.

5.6 Gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation

Die gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation wurde in drei verschiedenen Anlagenverschaltungen analysiert. Dabei wurde die Nutzung des erzeugten Biogases zwischen den Varianten Verbrennung im Gaskessel zur reinen Erzeugung von Prozesswärme, Verbrennung im Gasmotor zur gleichzeitigen Erzeugung von Prozesswärme und Strom sowie Reformierung in einer on-site Dampfreformierungsanlage variiert. Als Rohstoff wurden in allen Varianten Kartoffelschalen herangezogen. Die verschiedenen Anlagenvarianten sind nachfolgend im Detail beschrieben. In allen drei Varianten wurden ebenfalls, wie schon bei der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation angeführt, Variationen der Umsatzwirkungsgrade in den Fermentern und Variationen der Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage des Dunkelfermenters durchgeführt. Dabei wurde für die Umsatzwirkungsgrade eine Kombination aus 80% Umsatz der eintretenden Glukose im Dunkelfermenter und 70% Umsatz der eintretenden Säuren und Glukose im Biogasfermenter gewählt. Diese Variante stellt realisierbare Wirkungsgrade in den Fermentern dar. Dabei ist anzumerken, dass im Dunkelfermenter 15% der eintretenden Glukose von den Mikroorganismen für ihr Wachstum verbraucht werden. Im Biogasfermenter stehen daher in dieser Variante nur noch 5% der in den Prozess eintretenden Glukose für eine Umsetzung zu Biogas zur Verfügung. Zusätzlich wurde wiederum das theoretische Maximum der Wasserstoffproduktion ermittelt, indem die Umsätze in den Fermentern auf jeweils 100% gesetzt wurden. Dabei ist zu erwähnen, dass in diesem Fall im Dunkelfermenter keine Glukose für das Wachstum der Mikroorganismen zur Verfügung steht. Real ist dieser Betriebszustand des Fermenters zwar nicht erreichbar, da die

Mikroorganismen ohne Wachstum keinen Wasserstoff produzieren können. Die berechneten Werte sollen allerdings auch keine realisierbaren Anlagenwerte liefern, sondern nur zur Abschätzung des Verbesserungspotenzials der Technologie herangezogen werden. Die Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage des Wasserstoffstroms aus dem Dunkelfermenter wurde, wie bei der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation, ebenfalls zwischen 80% und 95% variiert. Dabei stellt der untere Wert wieder die derzeit realisierbare Rückgewinnung und der obere Wert die zukünftig erreichbare Rückgewinnung in einer PSA-Anlage oder einem Membrankontaktor dar.

5.6.1 Gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation mit Biogasnutzung im Gaskessel

Das Anlagenlayout der Referenzanlage für die gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation wurde dahingehend erweitert, dass das wasserstoffreiche Gas der Dunkelfermentationsstufe in einer PSA-Anlage zu Wasserstoff in der erforderlichen Reinheit aufgereinigt wird, wie aus Abbildung 5.9 ersichtlich ist. Außerdem wurde der Betrieb des Dunkelfermenters gegenüber der Referenzanlage auf 70 °C und 0,5 bar abgeändert. In der Anlage wird der Großteil des Wasserdampfes aus dem Gas des Dunkelfermenters abgetrennt und das Kondensat wieder in den Dunkelfermenter zurückgeleitet. Anschließend wir das Gas auf den erforderlichen Eingangsdruck für die Druckwechseladsorption komprimiert und vor dem Eintritt in die PSA-Anlage erneut gekühlt. Das produzierte Biogas wird in dieser Anlagenvariante mit dem Offgasstrom aus der PSA-Anlage gemischt und in einem Gaskessel verbrannt, wodurch Wärme für den Prozess erzeugt wird. Für die Verbrennung wird auch Verbrennungsluft benötigt, die zur Regelung der Verbrennungstemperatur im Gaskessel mit rezirkuliertem Rauchgas gemischt wird. Die erzeugte Prozesswärme wird zur Aufwärmung des bereits durch prozessinternen Wärmetausch zwischen Ein- und Austritt des Dunkelfermenters vorgewärmten Substrats vor dem Eintritt in den Dunkelfermenter sowie zur Beheizung des Dunkelfermenters selbst genutzt. Diese Nutzung der Prozesswärme wurde über einen Zwischenkreislauf implementiert. Die interne Wärmerückgewinnung reicht nicht aus, um das säurereiche Substrat am Austritt des Dunkelfermenters auf die für die Biogasfermentation benötigte Temperatur von 35 °C zu kühlen. Aus diesem Grund wurde ein Wärmetauscher mit externer Kühlung vor der Biogasfermentation vorgesehen. Die Anlagendaten für die Simulation dieser Anlagenvariante sind dem Anhang zu entnehmen (siehe Kapitel 11.5.6.1).

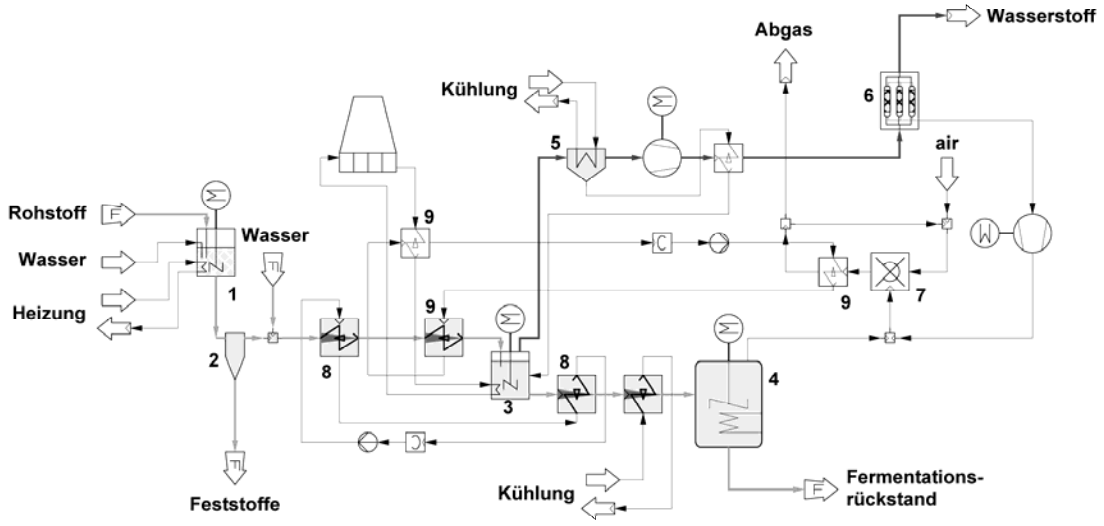


Abbildung 5.9: Flowsheet der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation mit Biogasnutzung im Gaskessel
(1: Hydrolyseur, 2: Feststoffabscheidung, 3: Dunkelfermenter, 4: Biogasfermenter, 5: Kondensator, 6: PSA Anlage, 7: Gaskessel, 8: Wärmetauscher zur Wärmeintegration, 9: Wärmetauscher zur Nutzung der Abgaswärme des Gaskessels)

5.6.2 Gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation mit Biogasnutzung im Gasmotor

Auch in dieser Anlagenvariante wird das wasserstoffreiche Gas aus der Dunkelfermentation nach vorhergehender Wasserkondensation, Verdichtung und Abkühlung in einer PSA-Anlage auf die gewünschte Reinheit für die Nutzung in Fahrzeugen aufgereinigt. Der Dunkelfermenter wird wiederum, anders als in der Referenzanlage, mit 70 °C und 0,5 bar betrieben. Das erzeugte Biogas wird in dieser Variante ebenfalls mit dem Offgas der PSA-Anlage gemischt, das Gemisch wird jedoch in einen Gasmotor zur gleichzeitigen Produktion von Wärme und elektrischem Strom geleitet, wie in Abbildung 5.10 dargestellt ist. Bei der Erzeugung von Strom durch Verbrennung des Gases im Gasmotor fällt auch Abwärme auf unterschiedlichen Temperaturniveaus an. Die erforderliche Motorkühlung auf niedrigem Temperaturniveau (ca. 50-55 °C) kann hier nicht mehr weiterverwendet werden und wird daher extern gekühlt. Die Hochtemperaturkühlung des Motors tritt hingegen mit einer Kühlwassertemperatur um die 90 °C aus dem Motor aus und kann zur Aufwärmung von Prozessströmen genutzt werden.

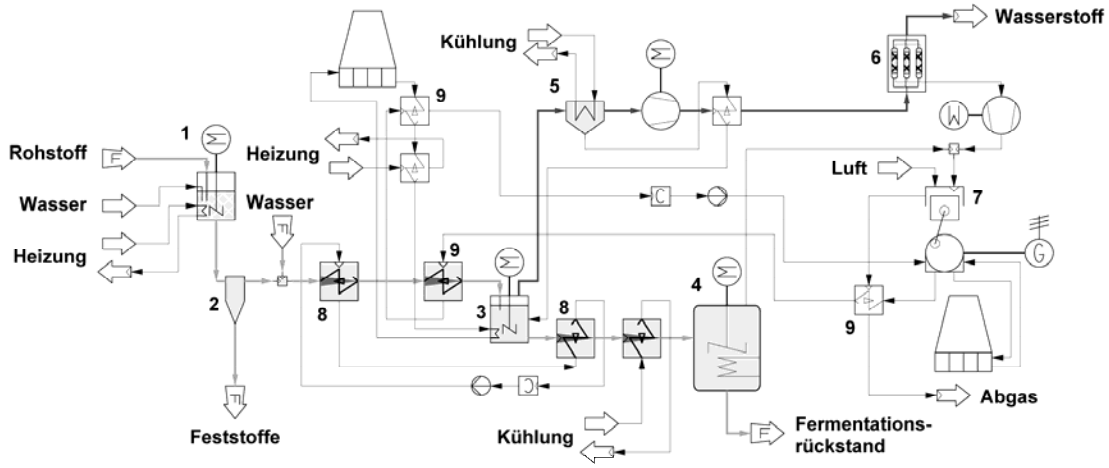


Abbildung 5.10: Flowsheet der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation mit Biogasnutzung im Gasmotor
(1: Hydrolyseur, 2: Feststoffabscheidung, 3: Dunkelfermenter, 4: Biogasfermenter, 5: Kondensator, 6: PSA Anlage, 7: Gasmotor, 8: Wärmetauscher zur Wärmeintegration, 9: Wärmetauscher zur Nutzung der Abgaswärme des Gasmotors)

Im konkreten Anlagenbeispiel wird das heiße Kühlwasser des Motors durch das Abgas des Gasmotors weiter aufgewärmt und zur Erwärmung des, durch interne Wärmeintegration bereits vorgewärmten, Substrats am Eintritt des Dunkelfermenters sowie zur Beheizung des Dunkelfermenters selbst genutzt. Für den Fall, dass diese beiden Heizschritte nicht ausreichen, ist noch ein weiterer Wärmetauscher mit externem Heizmedium für die Beheizung des Dunkelfermenters vorgesehen. Ebenso ist ein weiterer Kühler vor dem Eintritt der Säuren in den Biogasfermenter vorgesehen, da die Kühlung durch die Wärmeintegration nicht zur erforderlichen Substratkühlung ausreicht. Die für die Simulation angenommenen Anlagendaten sind im Anhang (siehe Kapitel 11.5.6.2) zusammengestellt.

5.6.3 Gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation mit Biogasnutzung in einer on-site Dampfreformierungsanlage

In dieser Anlagenvariante wird das produzierte Biogas in einer on-site Dampfreformierungsanlage zu wasserstoffreichem Gas umgewandelt und auf die erforderliche Gasqualität gebracht (siehe Abbildung 5.11).

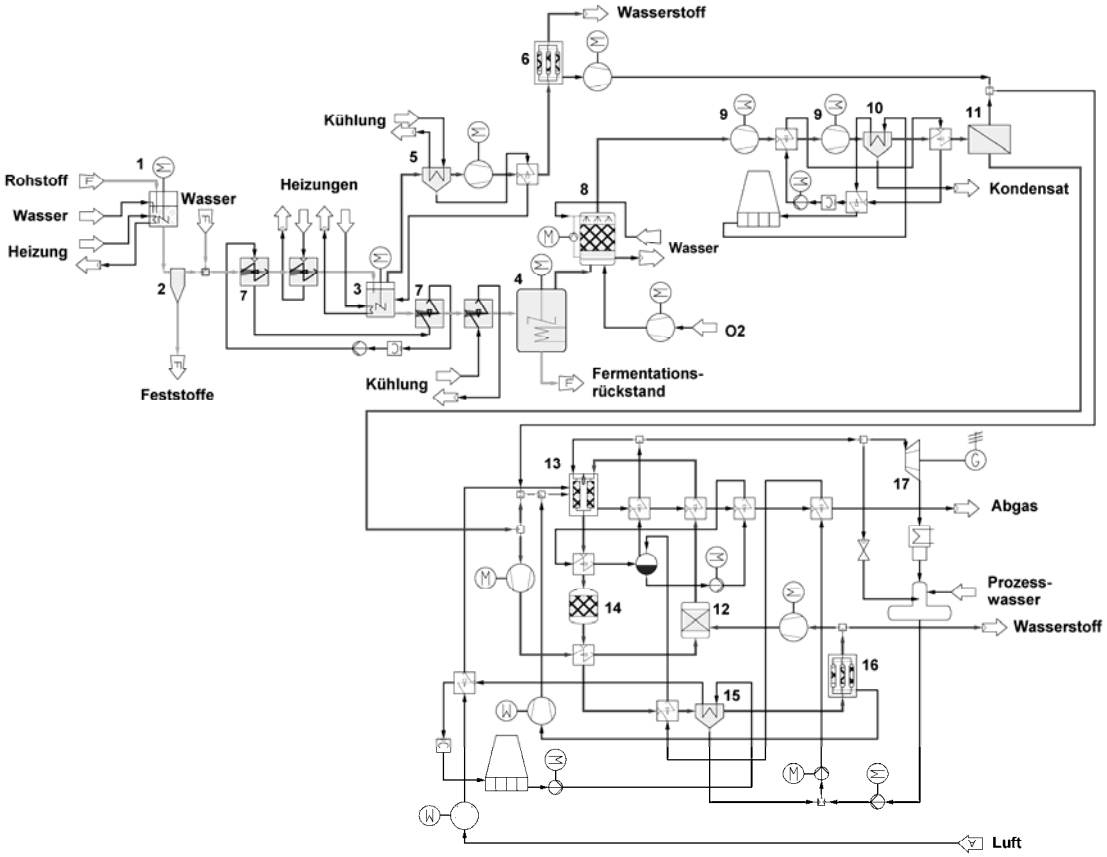


Abbildung 5.11: Flowsheet der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation mit Biogasnutzung in einer on-site Dampfreformierungsanlage
(1: Hydrolyseur, 2: Feststoffabscheidung, 3: Dunkelfermenter, 4: Biogasfermenter, 5: Kondensator, 6: PSA Anlage, 7: Wärmetauscher zur Wärmeintegration, 8: Biologische Entschwefelungskolonne, 9: zweistufiger Kompressor, 10: Kondensator, 11: Membranmodule, 12: Reaktor zur Hydrierung und adsorptiven Entfernung von Chlor- und Schwefelsubstanzen, 13: Dampfreformer, 14: Wassergas-Shift-Reaktor, 15: Kondensator, 16: PSA Anlage, 17: Dampfturbine)

Vor der Einleitung des Biogases in die Reformierungsanlage wird der Haupanteil des im Gas enthaltenen Schwefelwasserstoffs in einer biologischen Entschwefelungskolonne entfernt. Anschließend wird das Kohlendioxid in einer Membrananlage aus dem Biogas abgetrennt. Dabei entspricht die Membrananlage dem bereits bei der on-site Reformierung von Biogas mit vorhergehender CO_2-Abtrennung (siehe Kapitel 5.3.2) beschriebenen Layout. Die on-site Reformierungsanlage ist ebenfalls nach den in diesem Kapitel angegebenen Kriterien aufgebaut.

Wie aus Abbildung 5.11 ersichtlich ist, wurde in dieser Anlagenvariante keine Wärmeintegration zwischen den Anlagenteilen der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation einerseits und der Membrananlage beziehungsweise der on-site Reformierungsanlage andererseits berücksichtigt. Prinzipiell wäre es möglich, die Wärme, die im Kühlturm der Reformierungsanlage abgeführt werden muss, zur Aufwärmung des Substrates für die Dunkelfermentation heranzuziehen. Mit dieser Wärmeintegration könnten jedoch nur maximal 40% des benötigten Heizbedarfs für die Substratvorwärmung abgedeckt werden, weshalb weiterhin auch eine externe Substratbeheizung erforderlich wäre. Da nicht sicher gestellt ist, dass diese Erhöhung der Komplexität der Anlage auch wirtschaftlich sinnvoll ist, insbesondere da sich die Technologie der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation noch im Entwicklungsstadium befindet, wurde diese mögliche Wärmeintegration in der vorliegenden Arbeit nicht berücksichtigt. Die Anlagendaten für die Simulation dieser Anlagenvariante sind dem Anhang zu entnehmen (siehe Kapitel 11.5.6.3).

6 Gesamtprozessketten

Um den Wasserstoff in Fahrzeugen nutzen zu können, muss neben den Anlagen zur Erzeugung des Wasserstoffs auch die Versorgungskette von der Produktionsanlage bis zur Wasserstofftankstelle zur Verfügung gestellt werden. Für eine gesamtwirtschaftliche Betrachtung des Themas „Wasserstoff zur Nutzung in Fahrzeugen" ist es daher notwendig, alle Schritte dieser Prozesskette mit zu berücksichtigen. In den nachfolgenden Kapiteln wird dargelegt, welche Schritte in der vorliegenden Arbeit für die Prozesskette von der Produktionsanlage bis zur Nutzung im Fahrzeug berücksichtigt wurden und welche Varianten betrachtet wurden.

6.1 Standardprozessketten

Basierend auf den Ergebnissen der Prozesssimulation und Angaben aus der Literatur zur benötigten Infrastruktur für den Betrieb von Wasserstofffahrzeugen (GM et al., 2002; Simbeck et al., 2002; OECD/IEA, 2005; EUCAR et al., 2007) wurde für jede der behandelten Technologien eine Standardprozesskette für das Gesamtsystem vom Rohstoff bis zur Nutzung des Wasserstoffs im Fahrzeug ausgewählt.

In dieser Standardprozesskette wird der am Ende des jeweiligen Produktionsprozesses erhaltene Wasserstoff mit einem Kompressor auf 217 bar komprimiert und in einem Speicher zwischengespeichert. Dieser Speicher ist so ausgelegt, dass er die Menge an Wasserstoff, die innerhalb von 12 Stunden in der Anlage produziert wird, zwischenspeichern kann. Diese Speicherung soll dem Ausgleich von Abnahmeschwankungen dienen. In einer Abfüllstation werden anschließend Druckgasflaschen mit 167 bar für den Wasserstofftransport von der Produktionsanlage zur Wasserstofftankstelle befüllt. Der Transport des Wasserstoffs erfolgt mittels LKWs, die jeweils ein Bündel von Druckgasflaschen mit einer Füllmenge von insgesamt 200 kg Wasserstoff transportieren. In jeder Tankstelle dient eines dieser Flaschenbündel als Zwischenspeicher für den Wasserstoff. Es wird angenommen, dass die

Anlage zur Wasserstoffproduktion und die Wasserstofftankstelle 100 km voneinander entfernt sind.

Für die hier durchgeführte Betrachtung wird davon ausgegangen, dass 200.000 Wasserstoffautos in Österreich vorhanden sind. Die Versorgung dieser Fahrzeuge mit Wasserstoff soll in 200 verteilten Tankstellen mit einem Umsatz von jeweils ca. 460 kg H_2 pro Tag erfolgen. Damit werden pro Tag etwas mehr als zwei Flaschenbündel-Transporte benötigt, um den Betrieb der Tankstelle gewährleisten zu können. Das zwischengespeicherte Flaschenbündel kann somit im Notfall etwas weniger als den halben Tagesverbrauch einer Tankstelle abdecken.

Jede Tankstelle ist mit einem Kompressor ausgestattet, der den zwischengespeicherten Wasserstoff auf den erforderlichen Druck für die Betankung der Wasserstoffautos von 450 bar bringt. Anschließend wird der komprimierte Wasserstoff erneut gespeichert, um die laufende Betankung der Fahrzeuge sicherzustellen. Dieser Zwischenspeicher wird so ausgelegt, dass der durchschnittliche Verbrauch der Tankstelle innerhalb von drei Stunden mit einer Füllung gedeckt werden kann. Damit sollen Versorgungsschwankungen durch die Kompressoranlage ausgeglichen werden. Die Betankung erfolgt mittels spezieller Zapfsäulen in gasförmigem Zustand. Die Konfiguration der Gesamtsysteme ist in Abbildung 6.1 dargestellt. Bei den dargestellten Gesamtsystemen wird davon ausgegangen, dass die Wasserstofffahrzeuge mit einem 350 bar Druckgastank ausgestattet sind. Jede Standardprozesskette wird sowohl in Kombination mit Brennstoffzellen- als auch mit H_2-Verbrennungsmotorfahrzeugen untersucht.

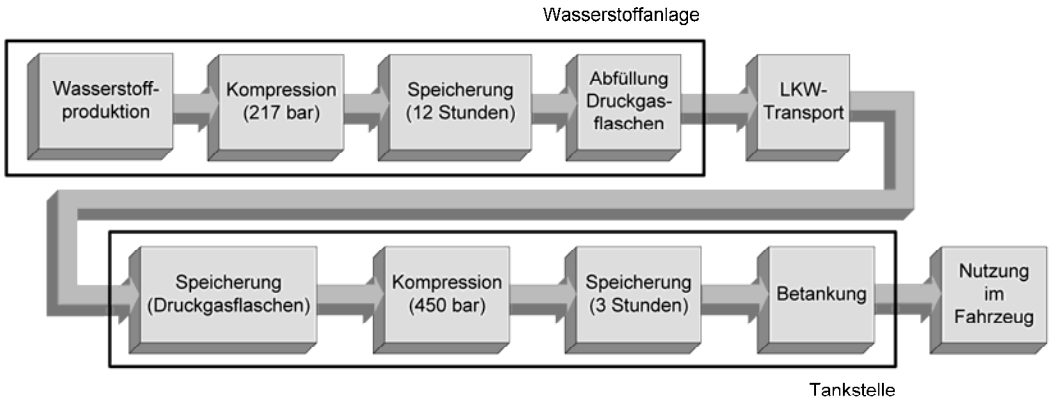


Abbildung 6.1: Gesamtsystem für die Standardprozesskette von der Produktion bis zur Nutzung des Wasserstoffs im Fahrzeug

Für die angegebene Standardprozesskette wird in der vorliegenden Arbeit eine Wirtschaftlichkeitsanalyse durchgeführt. Mit dieser Analyse wird ermittelt, wie hoch die Gestehungskosten des Wasserstoffs für die einzelnen Technologien vom Rohstoff bis zum erzeugten Wasserstoff sind. Darüber hinaus wird auch ermittelt, wie hoch die Kosten pro gefahrenem Kilometer sowohl in Fahrzeugen mit Brennstoffzelle als auch in Fahrzeugen mit Verbrennungsmotor sind. Für diese Analyse und den Vergleich mit den Kosten pro gefahrenem Kilometer für Diesel- und Benzinfahrzeuge werden Daten über den Kraftstoffverbrauch dieser Fahrzeuge benötigt. Diese Daten wurden aus Literaturangaben (EUCAR et al., 2007; Rechberger et al., 2008) entnommen und sind im Anhang (siehe Kapitel 11.3) angeführt.

6.2 Varianten der Standardprozesskette

Zusätzlich zu den im vorigen Kapitel ausgeführten Standardprozessketten wird eine weitere Variante betrachtet, in der das Druckniveau in den Wasserstoffspeichern der Fahrzeuge erhöht ist. Diese Variante wird nur für den Prozess der Biogasfermentation von Maissilage mit Netzeinspeisung und zentraler Reformierungsanlage untersucht, um exemplarisch die Auswirkung des höheren Druckniveaus zu untersuchen. Die Fahrzeuge besitzen in dieser Variante einen 700 bar Gastank. Damit muss der Kompressor in der Tankstelle den Wasserstoff auf 880 bar anstelle von 450 bar komprimieren. Auch diese Gesamtprozesskette wird sowohl in Kombination mit Brennstoffzellen- als auch mit H_2-Verbrennungsmotorfahrzeugen untersucht.

Eine weitere Variante der Gesamtprozesskette untersucht die Auswirkung der Weiterentwicklung der Wasserstofffahrzeuge. Basierend auf Literaturangaben (EUCAR et al., 2007; Rechberger et al., 2008) wird die zu erwartende Verringerung des Wasserstoffverbrauchs pro gefahrenem Kilometer dazu herangezogen, um die Wasserstoffkosten pro Kilometer für das Jahr 2050 abzuschätzen. Die für den Verbrauch der einzelnen Fahrzeuge verwendeten Daten für das Jahr 2050 sind im Anhang (siehe Kapitel 11.3) angeführt. Bei dieser Betrachtung wird vernachlässigt, dass es auch bei den Produktionstechnologien zu weiteren Leistungsverbesserungen kommen wird, da diese Verbesserungen äußerst schwer abzuschätzen sind. Mit Ausnahme der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation sowie der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation wird darüber hinaus davon ausgegangen, dass die Verbesserungen im Vergleich zur Entwicklung des Wasserstoffverbrauchs in den Fahrzeugen vernachlässigbar sind. Die Verringerung des fossilen Kraftstoffverbrauchs in den LKWs für den Transport des Wasserstoffs zwischen Produktion und Tankstelle wurde jedoch berücksichtigt. Auch hier sind die verwendeten Daten für den Verbrauch im Jahr 2050

wieder im Anhang (siehe Kapitel 11.3) angegeben. Die Änderung der Treibstoffkosten wird jedoch ebenfalls aufgrund der schwierigen Abschätzbarkeit der Preisentwicklung nicht mitbetrachtet. Es kann jedoch, auch nach Meinung der Experten, generell davon ausgegangen werden, dass es zu einer starken Steigerung der Preise für fossile Treibstoffe kommen wird. Die Untersuchungen für das Jahr 2050 werden wiederum sowohl für Brennstoffzellen- als auch für Wasserstoffverbrennungsmotorfahrzeuge durchgeführt.

6.3 Wirtschaftlichkeitsberechnung

Zur Durchführung der Wirtschaftlichkeitsberechnung wurde das Programm IPSEpro PSEconomy® (Version 4.0, Module Version 1.1, Build 874) eingesetzt. In diesem Programm gibt es prinzipiell die Möglichkeit, wirtschaftliche Berechnungen für einen Prozess durchzuführen, der in einem IPSEpro Flowsheet abgebildet ist. Dazu ist eine direkte Verlinkung zwischen PSEconomy und dem IPSEpro Flowsheet erforderlich. Im Rahmen dieser Arbeit wurden jedoch selbst entwickelte Komponenten in der Prozesssimulation verwendet, die die benötigten Schnittstellen zu PSEconomy noch nicht aufweisen. Daher wurde die wirtschaftliche Berechnung ohne Anbindung an ein Flowsheet, also durch reine Eingabe der benötigten Daten in PSEconomy, durchgeführt.

PSEconomy bietet die Möglichkeit, auf der Basis von wirtschaftlichen Daten (Investitionskosten, Betriebskosten, Zinssätzen, Steuersätzen, Abschreibungsdauer, Kredite, Eigenmittel, …) eine Investitionskostenrechnung durchzuführen. Dabei werden über die jährlichen Cash Flows Kennzahlen wie mittlere Rentabilität, Amortisationsdauer, dynamische Amortisationsdauer und interner Zinsfuß ermittelt, die als wirtschaftliche Bewertungskriterien herangezogen werden können.

Im der vorliegenden Arbeit wurde die dynamische Amortisationsdauer als Wirtschaftlichkeitskriterium herangezogen. Sie gibt an, nach welcher Zeitdauer die Summe der erzielten Cash Flows der Summe aus Investitionskosten, Nebenkosten und anfallenden Zinskosten entspricht. Dabei wird, im Gegensatz zur statischen Amortisationsdauer, auch der zeitliche Anfall der Cash Flows berücksichtigt, indem deren Barwerte zur Berechnung herangezogen werden. Die genaue Berechnungsmethode und die zugehörigen Formelzusammenhänge können der Dokumentation der Software entnommen werden (SimTech, 2005).

Für die Berechnung der Wirtschaftlichkeit der einzelnen Gesamtprozessketten wurden großteils Daten aus der Literatur zu den Investitions- und Betriebskosten der einzelnen Apparate und Betriebsmittel herangezogen. In einzelnen Fällen mussten jedoch aufgrund

fehlender Informationen Annahmen getroffen werden. Alle verwendeten Kostendaten sind im Anhang (siehe Kapitel 11.4) angeführt. Diese Kostendaten der Prozessketten vom Rohstoff inklusive Transport zur Produktionsanlage bis hin zum Verkauf an der Zapfsäule der Tankstelle bilden die Grundlage für die Ermittlung der Wasserstoffgestehungskosten an der Tankstelle. In diesen Gestehungskosten werden nur die reinen Produktions-, Transport- und Bereitstellungskosten, aber keine darüber hinausgehenden Gewinne, Abgaben oder Steuern für den produzierten Wasserstoff berücksichtigt. Wie bereits erwähnt, wurde die dynamische Amortisationszeit als Zielgröße festgelegt. Bei der Ermittlung der Gestehungskosten wurden daher die Kosten pro kg Wasserstoff an der Tankstelle so lange variiert, bis eine dynamische Amortisationszeit von gerade weniger als 10 bzw. 15 Jahren erhalten wurde. Die Variation wurde dabei in 0,01 EUR/kg Schritten durchgeführt. Neben den im Anhang (siehe Kapitel 11.4) angegebenen Investitions- und Betriebskosten wurden im Zuge der Arbeit die nachfolgend angeführten Annahmen für die Berechnung der Wirtschaftlichkeit der einzelnen Prozessketten getroffen. Diese Annahmen basieren nicht rein auf den üblichen Ansätzen, die auf schnellstmögliche Rentabilität und Gewinnmaximierung ausgelegt sind, sondern stellen eine Mischung mit konservativeren Ansätzen dar. Der Grund dafür ist, dass im Bereich von dezentralen Biomasseverwertungsanlagen, die einen Großteil der betrachteten Prozessketten darstellen, üblicherweise konservtivere Ansätze zu Rentabilität und Gewinnen gewählt werden.

Kapitalaufteilung:	20% Eigenkapital, 80% Fremdkapital
Kapitalbeschaffungskosten:	0,2% des Fremdkapitals
Rückstellungen:	0,23% des Fremdkapitals pro Jahr
Wartung/Instandhaltung:	2% der Investitionskosten pro Jahr
Versicherung:	0,5% der Investitionskosten pro Jahr
Kosten Werbung/Sponsoring:	7.500 EUR pro Jahr für Elektrolyse klein
	15.000 EUR pro Jahr für alle anderen Anlagen
Abschreibung:	linear auf 10 Jahre
Inflationsrate:	2,5% pro Jahr
Abzinsungsrate:	4% pro Jahr
Körperschaftssteuer:	25% pro Jahr
Kapitalzinssätze:	10% pro Jahr für Eigenkapital,
	5% pro Jahr für Fremdkapital

7 Ergebnisse und Diskussion

In diesem Kapitel wird zunächst die Effizienz der betrachteten Technologien zur Wasserstoffproduktion untersucht. Dabei wird sowohl die Effizienz der Produktion von Wasserstoff aus dem eingesetzten Rohstoff beurteilt, als auch die Effizienz der Umwandlung der Energie, die mit dem Rohstoff und über Wärmeströme sowie über elektrischen Strom zugeführt wird, in die im Wasserstoff enthaltene Energie. Anschließend werden die Ergebnisse der Wirtschaftlichkeitsberechnung für die in Kapitel 6 dargestellten Gesamtprozessketten vom Rohstoff bis zur Nutzung des erzeugten Wasserstoffs in Fahrzeugen dargestellt und diskutiert.

7.1 Effizienzbewertung der betrachteten Technologien

Die Ergebnisse der Simulationsberechnungen der in Kapitel 5 dargestellten Anlagenvarianten zur Wasserstoffproduktion bilden die Grundlage für die Effizienzbewertung der verschiedenen Varianten. Die Anlagengrößen der verschiedenen betrachteten Technologien und Anlagenvarianten, ausgedrückt über die in den Anlagen produzierten Mengen an Wasserstoff, sind in Abbildung 7.1 dargestellt. Bei den Anlagenvarianten der Biogasfermentation und Biomassevergasung mit zentraler Reformierungsanlage wurden die Wasserstoffmengen dabei pro Biogasfermentations- bzw. pro Biomassevergasungsanlage angegeben. Die Anzahl an Biogasfermentations- und Biomassevergasungsanlagen, die für den Betrieb einer zentralen Reformierungsanlage benötigt werden, sind in Tabelle 7.1 angegeben. In dieser Tabelle sind darüber hinaus die in den zentralen Reformierungsanlagen produzierten Mengen an Wasserstoff angeführt. Die Abbildung 7.1 zeigt, dass die produzierten Wasserstoffmengen nicht nur von der Technologie sondern im Fall der Biogasfermentation auch vom eingesetzten Rohstoff abhängen. Das liegt daran, dass diese Technologie auf einheitliche Fermentergrößen mit einem nutzbaren Volumen von ca. 5.500 m^3 ausgelegt wurde, wodurch sich aufgrund der unterschiedlichen Verweilzeiten und Rohstoffzusammensetzungen unterschiedliche produzierte Wasserstoffmengen ergeben.

Dampfreformierung Erdgas

Alkalische Elektrolyse

- klein
- gross

Biogasfermentation, Maissilage

- on-site Reformierung
- CO_2 Abtr., on-site Reformierung
- zentrale Reformierung

Biogasfermentation, Kartoffel

- on-site Reformierung
- CO_2 Abtr., on-site Reformierung
- zentrale Reformierung

Biogasfermentation, Grünschnitt

- on-site Reformierung
- CO_2 Abtr., on-site Reformierung
- zentrale Reformierung

Biogasfermentation, Biotonne

- on-site Reformierung
- CO_2 Abtr., on-site Reformierung
- zentrale Reformierung

Vergasung, Hackschnitzel

- on-site Reformierung
- CO_2 Abtr., on-site Reformierung
- zentrale Reformierung

Dunkel/Photofermentt., Maiskorn

- 80% Umsatz jeder Fermenter
- 100% Umsatz jeder Fermenter

Dunkel/Photofermentt., Kartoffel

- 80% Umsatz jeder Fermenter
- 100% Umsatz jeder Fermenter

Dunkel/Biogasfermentt., Kartoffel

- 80/70% Umsatz, Gasmotor
- 100/100% Umsatz, Gasmotor
- 80/70% Umsatz, Gaskessel
- 100/100% Umsatz, Gaskessel
- 80/70% Umsatz, Reformierung
- 100/100% Umsatz, Reformierung

Abbildung 7.1: Anlagengrößen der betrachteten Technologien zur Wasserstoffproduktion

Bei der gekoppelten Dunkel- und Photo-fermentation wurden die Anlagen hingegen auf eine produzierte Wasserstoffmenge von 60 kg/h ausgelegt und der Rohstoffmassenstrom daran angepasst. Bei der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation mit 80% Umsatz des Zuckers im Dunkelfermenter und 70% Umsatz der Säuren und verbliebenen Zucker im Biogasfermenter wurde die Anlagengröße auf den Rohstoffmassenstrom ausgelegt, der auch in der Anlage der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation von Kartoffelschalen mit jeweils 80% Umsatz der Zucker im Dunkelfermenter bzw. der Säuren im Photofermenter eingesetzt wird. In den Varianten mit jeweils 100% Umsetzung der Zucker und Säuren im Dunkel- bzw. Biogasfermenter wurde der Rohstoffmassenstrom hingegen dahingehend angepasst, dass der produzierte Wasserstoffmassenstrom aus dem Dunkelfermenter ident mit dem der Variante mit 80% und 70% Umsatz in den Fermentern ist.

Tabelle 7.1: Anzahl an Biogasfermentationsanlagen und Biomassevergasungsanlagen pro zentraler Reformierungsanlage und insgesamt produzierte Wasserstoffmenge

Anlagenvariante	Anlagenanzahl pro zentraler Reformierungsanlage	Erzeugter Wasserstoff pro zentraler Reformierungsanlage	
Einheit	-	kg/h	Nm^3/h
Biogasfermentation von Maissilage	87	2.951	32.821
Biogasfermentation von Kartoffel	85	2.938	32.683
Biogasfermentation von Grünschnitt	121	2.967	33.005
Biogasfermentation von Biotonne	126	2.959	32.916
Biomassevergasung von Hackschnitzel	38	2.953	32.847

7.1.1 Produktionseffizienz der betrachteten Technologien

Für die biomassebasierten Wasserstofftechnologien wurde eine Analyse der Produktionseffizienz bezogen auf den zugeführten trockenen Rohstoffmassenstrom durchgeführt. Die Ergebnisse der Anlagenvarianten für die Reformierung von Biogas und Vergasergas sind in Abbildung 7.2 dargestellt. Die Ergebnisse für die Anlagenvarianten der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation sowie der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation sind Abbildung 7.3 zu entnehmen.

Innerhalb einer Rohstoffvariante der Reformierung von Biogas liefert jeweils die Anlagenvariante mit reiner on-site Reformierung die geringste Wasserstoffmenge pro kg trockenem Rohmaterial. Die Variante mit CO_2-Abtrennung und nachfolgender on-site Reformierung liefert wiederum niedrigere Wasserstofferträge als die Variante mit Biogas-

Netzeinspeisung und zentraler Reformierung. Dieses Ergebnis entspricht den Erwartungen, da die CO_2-Abtrennung dazu führt, dass im Dampfreformer weniger Ballastgas aufgeheizt werden muss, um die Reformierungsreaktion durchführen zu können. Daher wird für die Beheizung des Reformers weniger Brenngas benötigt, und damit der Anteil an Gas, der reformiert werden kann, gesteigert. Die Wasserstofferträge der Variante mit zentraler Reformierungsanlage sind wiederum höher als die für die beiden Varianten mit on-site Reformierung, da die zentrale Reformierungsanlage im Vergleich zur on-site Anlage höhere Wirkungsgrade aufweist.

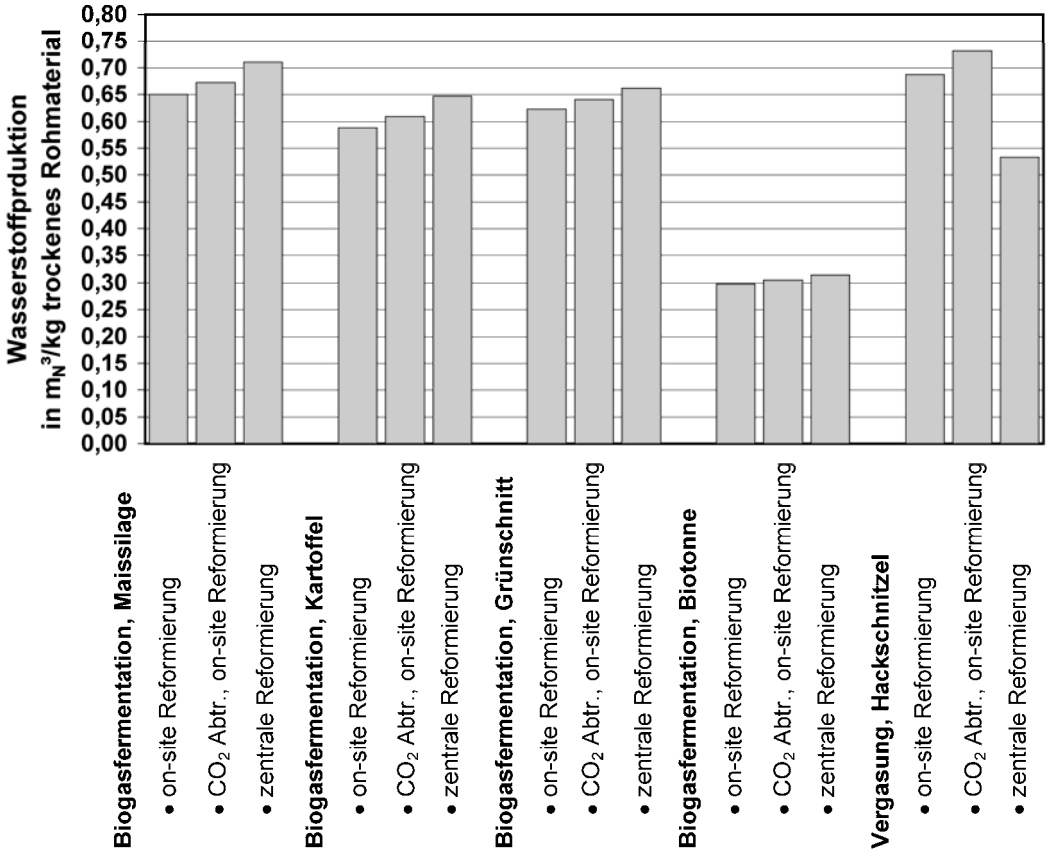


Abbildung 7.2: Wasserstoffproduktionseffizienz pro kg eingesetztem trockenem Rohmaterial der Technologien basierend auf Biogas und Vergasergas

Der Vergleich zwischen den verschiedenen Rohstoffvarianten der Biogasfermentation zeigt wiederum, dass die Maissilage die höchsten Wasserstofferträge liefert, gefolgt von Grünschnitt, Kartoffelabfällen und Biotonne. Die Reformierung von Biogas aus Abfällen, die

in der Biotonne gesammelt wurden, liefert im Vergleich zu den anderen Biogasrohstoffen nur weniger als die Hälfte der Wasserstoffmenge pro kg eingebrachtem Rohmaterial. Diese Unterschiede zwischen den Ergebnissen entstehen durch die unterschiedlichen Biogasausbeuten pro kg eingebrachtem Rohmaterial, die eben für die Biotonne auch wesentlich niedriger liegt, als für die drei anderen Rohstoffe (Institut für Energetik und Umwelt et al., 2006).

Bei den Anlagenvarianten der Reformierung von Vergasergas liefert ebenfalls die Variante mit CO_2-Abtrennung vor der on-site Reformierung höhere spezifische Wasserstoffausbeuten als die Variante mit direkter on-site Reformierung. Auch hier führt die CO_2-Abtrennung wieder zu einer Reduktion des Ballastgases im Reformer und damit zu einer geringeren Menge an benötigtem Brenngas im Reformer. Die Variante mit Aufbereitung des Vergasergases auf Erdgasqualität und Netzeinspeisung sowie zentraler Reformierungsanlage liefert hier jedoch sogar wesentlich schlechtere Ergebnisse als die Variante mit direkter on-site Reformierung des Vergasergases. Der Grund dafür liegt darin, dass das Vergasergas bereits einen hohen Anteil an Wasserstoff, ca. 40 vol% (trocken), aufweist. Soll das Vergasergas in ein Ergasnetz eingespeist werden, so muss dieser Wasserstoffanteil im Methanierungsreaktor in Methan umgewandelt werden. Diese Umwandlung erfolgt jedoch nicht vollständig. In der gewählten Anlagenauslegung weist das aus dem Methanierungsreaktor austretende Gas noch ca. 8 vol% (trocken) an Wasserstoff auf. Dieser Wasserstoffanteil wird vor der Netzeinspeisung in der Membrananlage gemeinsam mit dem CO_2 abgetrennt und geht damit für die Nutzung verloren. In der zentralen Reformierungsanlage wird das im Methanierungsreaktor gebildete Methan wieder zu Wasserstoff rückreformiert. Diese Umwandlung ist allerdings wieder mit Umwandlungsverlusten verbunden, weshalb ein weiterer Teil des ursprünglichen Wasserstoffanteils nicht für die Nutzung zur Verfügung steht. Dieser Anteil am Wasserstoffverlust ist zwar geringer als der Verlust durch die Methanierung und Membrantrennung, er trägt jedoch trotzdem zur Summe der Verluste bei, wodurch sich die in Abbildung 7.2 dargestellten niedrigen spezifischen Wasserstoffausbeuten ergeben.

Die Gegenüberstellung der Reformierung von Biogas und der Reformierung von Vergasergas zeigt, dass die beiden on-site Reformierungsvarianten des Vergasergases den Biogasvarianten überlegen sind. Dabei ist beachtenswert, dass nur die zentrale Reformierungsvariante mit Maissilage als Rohstoff eine höhere spezifische Wasserstoffproduktion liefert, als die direkte on-site Reformierung des Vergasergases. Die Variante der on-site Reformierung des Vergasergases mit vorhergehender CO_2-Abtrennung liefert generell bessere Wasserstofferträge als jede untersuchte Biogasvariante.

Die Ergebnisse der spezifischen Wasserstoffproduktion für die gekoppelte Dunkel- und Photofermentation sowie für die Varianten der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation sind in Abbildung 7.3 dargestellt.

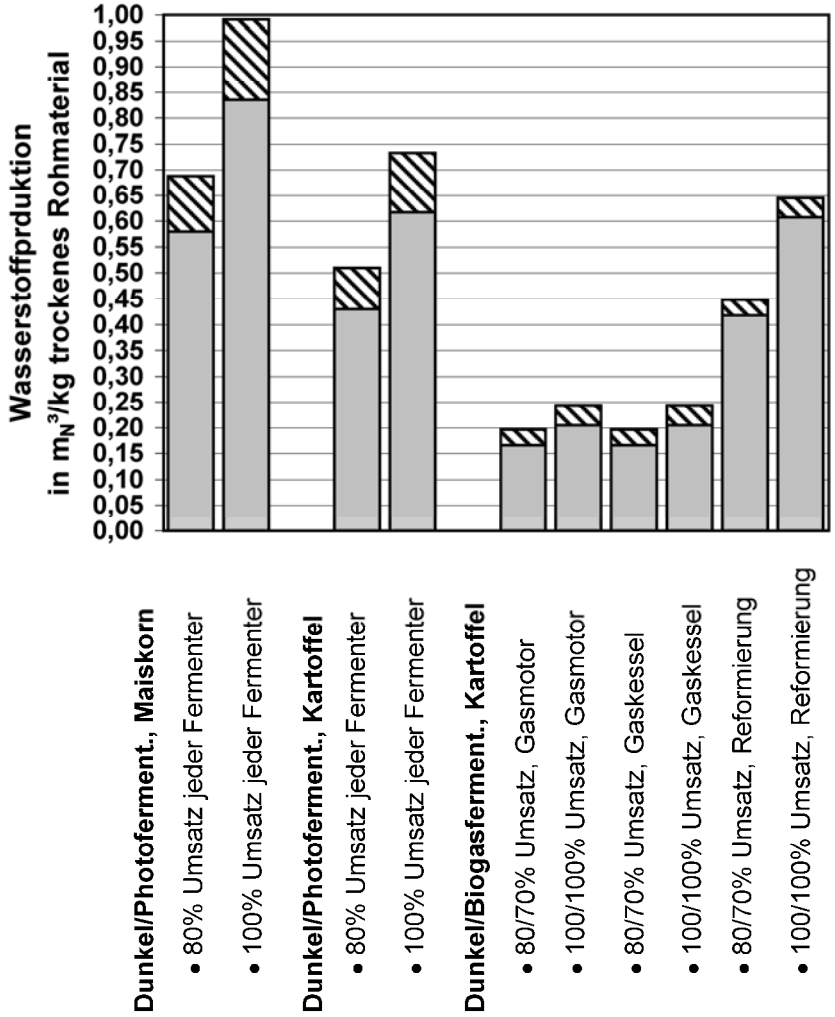


Abbildung 7.3: Wasserstoffproduktionseffizienz pro kg eingesetztem trockenem Rohmaterial der Technologien basierend auf Dunkelfermentation
(graue Balken: 80% Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage, schraffierte Balken: 95% Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage)

Die Abbildung zeigt deutlich, dass die Wasserstoffproduktion bei der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation stark vom gewählten Rohstoff abhängt. Die Ergebnisse fallen dabei für den Rohstoff Maiskorn wesentlich besser aus als für den Rohstoff Kartoffelabfälle. Es zeigt sich auch, dass zwischen der realisierbaren Variante mit 80% Umsatz des Substrates in jedem Fermenter und dem theoretischen Maximum mit 100% Umsatz in jedem Fermenter eine relativ große Spanne liegt. Durch eine Optimierung des Umsatzes der Substrate in den Fermentern ist hier folglich noch ein beträchtliches Verbesserungspotenzial der realen Wasserstoffausbeuten möglich. Darüber hinaus bewirkt auch die Erhöhung der Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage eine beträchtliche Steigerung der spezifischen Wasserstoffproduktion. Daher würden sich auch diese Verbesserungen aus Sicht der produzierten Menge an Wasserstoff deutlich lohnen.

Im Gegensatz dazu ist bei der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation mit Nutzung des Biogases im Gasmotor bzw. Gaskessel das Potenzial zwischen den derzeit realen Umsatzwirkungsgraden und dem theoretischen Maximum mit 100% Umsatz relativ gering, da nur die Erhöhung des Umsatzes im Dunkelfermenter die Wasserstoffausbeute erhöht. In der Variante mit on-site Reformierung des produzierten Biogases zeigt sich jedoch ebenfalls ein sehr deutliches Potenzial zur Erhöhung der Wasserstoffausbeute durch eine Erhöhung der Umsätze in den Fermentern. Die Erhöhung der Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage des Dunkelfermenters zeigt jedoch in allen drei Anlagenvarianten nur relativ geringe Erhöhungen der spezifischen Wasserstoffproduktion.

Generell ist zu sagen, dass bei den Anlagenvarianten der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation mit Nutzung des produzierten Biogases im Gasmotor bzw. im Gaskessel die Wasserstoffproduktion erwartungsgemäß niedrig ausfällt. In der Variante mit on-site Reformierung des Biogases kann die spezifische Wasserstoffproduktion im Vergleich dazu bei den realistischen Umsätzen in den Fermentern etwa verdoppelt werden. Eine Gegenüberstellung der Ergebnisse der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation mit Kartoffelabfällen als Rohstoff und der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation mit on-site Reformierung des produzierten Biogases, die ebenfalls Kartoffelabfälle als Rohstoff verwertet, zeigt, dass die Ergebnisse mit 80% Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage sehr ähnlich ausfallen. Die Erhöhung der Wasserstoffrückgewinnung auf 95% bewirkt jedoch, wie bereits erwähnt, bei der Dunkel-/Photofermentation eine wesentlich stärkere Erhöhung der spezifischen Wasserstoffproduktion als bei der Dunkel-/Biogasfermentation, weshalb in diesem Fall die gekoppelte Dunkel- und Photofermentation überlegen ist.

Ein Vergleich der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation von Maiskorn mit realistischen Umsätzen von jeweils 80% in den Fermentern und einer Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage von ebenfalls 80% mit den Ergebnissen der Biogasreformierung und

der Reformierung von Vergasergas zeigt, dass nur die Ergebnisse der Biogasfermentation mit Biotonnenabfall als Rohstoff und die zentrale Reformierung von Vergasergas schlechtere Ergebnisse liefern. Wird die Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage der Dunkel-/Photofermentation jedoch auf 95% erhöht, so weisen nur die Biogasfermentation von Maissilage mit zentraler Reformierung sowie die Varianten der Reformierung von Vergasergas mit on-site Reformierungen eine höhere spezifische Wasserstoffproduktion auf. Wird zusätzlich eine Erhöhung der Umsätze im Dunkel- sowie im Photofermenter in Betracht gezogen, so kann die Wasserstoffproduktion durchaus um einiges höher ausfallen als bei allen betrachteten Biogas- und Vergasergasvarianten.

Die Ergebnisse der Dunkel-/Photofermentation von Kartoffelabfällen sowie der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation mit on-site Reformierung fallen im Vergleich mit den Varianten der Reformierung von Biogas und Vergasergas weniger gut aus. Hier können im besten Fall mit 95% Wasserstoffrückgewinnung und Umsätzen über den derzeit realisierbaren 80/80% bzw. 80/70% bessere Ergebnisse als bei den untersuchten Varianten der Reformierung von Biogas und Vergasergas erzielt werden. Die einzige Ausnahme stellt die Biogasfermentation der Biotonnenabfälle dar, die auch verglichen mit den realisierbaren Varianten schlechtere Ergebnisse liefert.

Ein konkreter Vergleich zwischen den Ergebnissen der Reformierung von Biogas und der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation zeigt, dass die Unterschiede in den Wasserstoffausbeuten bei Einsatz des gleichen Rohstoffs auch daran liegen, dass unterschiedliche Teile des Rohstoffs für die Umsetzung zum Wasserstoff herangezogen werden. Im Fall der Dunkel- und Photofermentation können nur die Stärke- und Zuckeranteile des Rohstoffs zu Wasserstoff umgewandelt werden. Bei der Biogasfermentation können hingegen auch weitere Bestandteile wie Proteine zu Biogas umgesetzt werden. Daher kann es bei der Reformierung von Biogas, bezogen auf die Menge an eingesetztem Rohstoff, zu höheren Wasserstoffausbeuten als bei der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation kommen.

7.1.2 Energieeffizienz der betrachteten Technologien

Ein energetischer Vergleich zwischen Technologien, die auf unterschiedlichen Umwandlungsprinzipien beruhen, wie im vorliegenden Fall thermische, elektrochemische bzw. biologische Umwandlung, ist generell schwierig und mit Kompromissen verbunden, da eine gemeinsame energetische Bezugsbasis nur schwer festzulegen ist. In der vorliegenden Arbeit wird die Energieeffizienz der betrachteten Technologien auf zwei verschiedene Arten beurteilt. In der ersten Analyse wird der Energieinhalt im erzeugten Wasserstoff, ermittelt über

den unteren Heizwert von Wasserstoff, auf die mit dem Rohstoff eingebrachte Menge an Energie bezogen. Dieser Rohstoff-Energieinhalt wird dabei über den unteren trockenen Heizwert des jeweiligen Rohstoffs ermittelt. Würde ein reiner Vergleich zwischen thermischen Umwandlungsverfahren durchgeführt, so wäre es sinnvoller, den feuchten Heizwert für den Vergleich heranzuziehen, da er auch die benätigte Energie zur Verdampfung des im Brennstoff enthaltenen Wasseranteils mitberücksichtigt. In der vorliegenden Arbeit werden jedoch thermische und biologische Umwandlungsverfahren miteinander verglichen. Bei den biologischen Umwandlungsverfahren ist für den optimalen Ablauf der Reaktionen üblicherweise ein sehr hoher Wassergehalt in den Reaktoren (> 70 gew%) erforderlich, weshalb auch bevorzugt sehr feuchte Biomasse als Rohstoff für diese Technologien eingesetzt wird. Der Wassergehalt dieser Biomasse muss bei biologischen Prozessen jedoch naturgemäß nicht verdampft werden, um das gewünschte Produktgas zu erhalten. Aus diesem Grund würde ein energetischer Vergleich der Technologien auf Basis des feuchten Heizwertes die biologischen Prozesse extrem schlecht beurteilen. Insbesondere auch deshalb, weil für manche Rohstoffe aufgrund ihres hohen Wassergehaltes rein rechnerisch sogar negative feuchte Heizwerte zustande kommen. Um dennoch einen energetischen Vergleich durchführen zu können, wurde in der vorliegenden Arbeit daher der untere trockene Heizwert als gemeinsame Bezugsbasis herangezogen. Die exakteste Möglichkeit die verschiedenen Technologien miteinander zu vergleichen wäre eine exergetische Analyse. Diese Analyse bedeutet allerdings einen hohen Arbeitsaufwand, da für die meisten Rohstoffe keine Daten zu ihrem Exergieinhalt verfügbar sind. Aus diesem Grund wurde in der vorliegenden Arbeit von einer solchen Analyse abgesehen, da sie den Rahmen der Arbeit überschritten hätte.

In der zweiten durchgeführten Energieeffizienzanalyse wird der Energieinhalt des erzeugten Wasserstoffs auf die insgesamt eingebrachte Menge an Energie bezogen. Diese Gesamtmenge an eingebrachter Energie beinhaltet sowohl den Energieinhalt des Rohstoffs, wiederum bezogen auf den unteren trockenen Heizwert, als auch die Energie, die über Strom und Wärme in den Prozess eingebracht wird. Die verschiedenen Energieformen werden dabei als gleichwertig beurteilt, auch wenn tatsächlich die Wärmeenergie aufgrund ihres Anergieanteils anders bewertet werden müsste als die Brennstoffenergie und die Energie des elektrischen Stromes, die reine Exergien darstellen. Da jedoch der Anteil an zugeführter Wärme und zugeführtem Strom im Vergleich zur Brennstoffenergie gering sind, wurde diese Bewertung der Einfachheit halber vernachlässigt.

Wird in einem Prozess, wie beispielsweise bei den Anlagenvarianten mit Dampfreformierung, auch Strom erzeugt, so wird diese erzeugte Menge an Strom vom Strombedarf des Prozesses abgezogen. Hier kann es auch dazu kommen, dass mehr Strom produziert wird, als für den Betrieb des Prozesses erforderlich ist. In diesem Fall wird ein negativer Strombedarf berücksichtigt, wodurch sich die Energieeffizienz des Prozesses verbessert. Für

den Fall, dass in einem Prozess auch Prozesswärme produziert wird, wird diese Wärmemenge ebenfalls von der für den Betrieb des Prozesses benötigten Wärmemenge abgezogen. Wird in einem Prozess mehr Wärme erzeugt, als für den Betrieb benötigt wird, so wird die Überschusswärme nicht weiter berücksichtigt, sondern nur der Wärmebedarf des Prozesses auf Null gesetzt. Grund dafür ist, dass eine weitere Verwertung der Wärme nicht, wie beim produzierten Strom, generell vorausgesetzt werden kann. Hier wäre eine Ansiedlung weiterer Betriebe oder die Möglichkeit der Einspeisung in ein Fernwärmenetz oder Ähnliches erforderlich. Daher wurde dieser mögliche Benefit in der vorliegenden Arbeit nicht berücksichtigt. In Abbildung 7.4 sind die Energieeffizienzen der Technologien dargestellt, die auf Biogasfermentation und Biomassevergasung basieren.

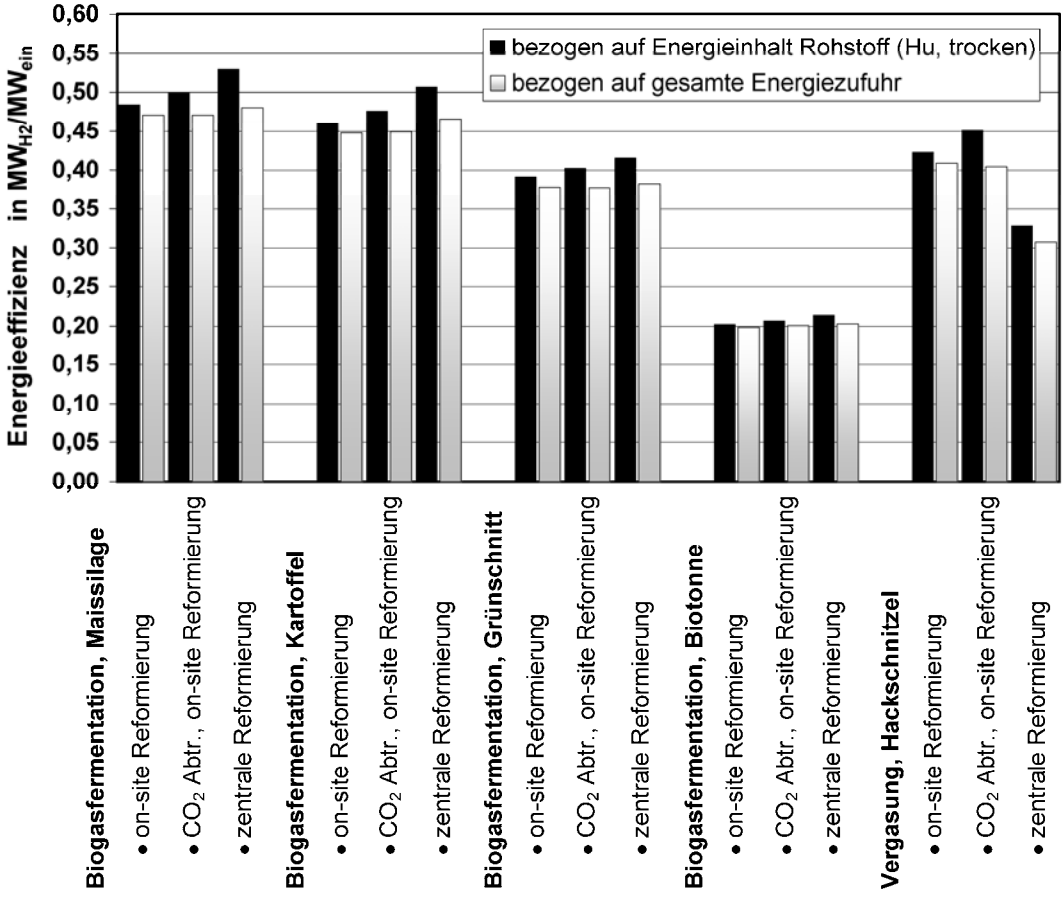


Abbildung 7.4: Energieeffizienz der Technologien basierend auf Biogas und Vergasergas

Der Vergleich zwischen den Varianten mit Biogasfermentation zeigt, dass die Reformierung von Biogas aus Maissilage, wie bei der Produktionseffizienz, auch bei der

Energieeffizienz die besten Werte liefert. Im Gegensatz zur Produktionseffizienz liefert allerdings die Variante mit Kartoffelschalen bessere Energieeffizienzen als die Variante mit Grünschnitt. Das liegt daran, dass der Grünschnitt einen unteren trockenen Heizwert aufweist, der das1,24-fache des Heizwerts von Kartoffelschalen beträgt (siehe Angaben in Kapitel 11.5.3). Die Wasserstoffproduktion bezogen auf den trockenen Rohstoffmassenstrom liegt für Grünschnitt jedoch nur um das 1,02-fache bis 1,06-fache höher als für Kartoffelschalen. Daher ergeben sich insgesamt für Kartoffelschalen höhere Energieeffizienzen bezogen auf den Energieinhalt des Rohstoffes als für Grünschnitt, wie in Abbildung 7.4 ersichtlich ist. Die niedrige Wasserstoffproduktion bei der direkten on-site Reformierungsvariante mit Kartoffel als Rohstoff (siehe Abbildung 7.2) wird auch dadurch verursacht, dass im Gegensatz zu der Variante mit Grünschnitt ein höherer Anteil an Biogas zur Beheizung des Dampfreformers benötigt wird, da das produzierte Biogas aus den Kartoffelschalen einen höheren Anteil an CO_2 im Gas aufweist. Im Gegenzug bewirkt dieser erhöhte Heizbedarf im Dampfreformers auch eine größere Menge an Abgas in der Reformierungsanlage, die zu einer höheren Stromproduktion führt. Dieser zusätzlich produzierte Stromanteil senkt den externen Strombedarf der Anlagenvariante ab. Dadurch erreicht die Energieeffizienz bezogen auf die insgesamt eingebrachte Menge an Energie für die on-site Reformierung von Kartoffelschalen 97,5% der Energieeffizienz bezogen auf die Rohstoffenergie, wohingegen bei Grünschnitt nur 96,7% erreicht werden. Die Varianten mit Biotonnenabfällen als Rohstoff weisen auch bei der Energieeffizienz die schlechtesten Ergebnisse unter den Biogasvarianten auf.

Auch bei der Energieeffizienz zeigt sich wieder deutlich, dass die Varianten mit zentraler Reformierung jeweils die besten Ergebnisse liefern, gefolgt von den Varianten mit CO_2-Abtrennung und on-site Reformierung und der direkten on-site Reformierung. Die Energieeffizienzen bezogen auf die insgesamt eingebrachte Energiemenge liegen jeweils deutlich niedriger als die auf den reinen Rohstoffenergieinhalt bezogenen Varianten. Dies liegt hauptsächlich am Strombedarf der Prozesse, da in den on-site Reformierungsvarianten der gesamte Wärmebedarf durch interne Wärmeintegration abgedeckt werden kann. Nur in den Varianten mit zentraler Reformierung ist zusätzlich zum Strombedarf noch der Wärmebedarf der Biogasanlagen enthalten, der nicht, wie bei den on-site Varianten, durch Wärmeintegration mit der Reformierungsanlage gedeckt werden kann. Daher ist bei den zentralen Reformierungsvarianten der Unterschied zwischen den beiden Energieeffizienzen höher als bei den on-site Reformierungsvarianten. Bei den Varianten der Biogasreformierung mit Biotonnenabfällen als Rohstoff fällt der absolute Unterschied zwischen den beiden Energieeffizienzen deshalb so gering aus, weil die Effizienzwerte generell sehr niedrig liegen. Prozentuell gesehen liegen die Unterschiede im gleichen Bereich wie für alle anderen

Biogasvarianten (Energieeffizienz bezogen auf gesamte Energiemenge beträgt zwischen 90,8% und 98,2% der Energieeffizienz bezogen auf die Rohstoffenergie).

Ein Vergleich zwischen den Energieeffizienzen der Biogasvarianten und der Vergasungsvarianten liefert ein ganz anderes Ergebnis als für die Produktionseffizienzen. Im Gegensatz zur Produktionseffizienz, bei der die Vergasungsvarianten mit on-site Reformierung besser abgeschnitten haben als die Biogasvarianten, liegt die Energieeffizienz der Vergasungsvarianten niedriger als die der Biogasvarianten mit Maissilage und Kartoffelschalen als Rohstoffe. Der Grund dafür liegt darin, dass der untere trockene Heizwert der Hackschnitzel das 1,21-fache bzw. das 1,27-fache des Heizwerts der Maissilage bzw. der Kartoffelschalen beträgt (vgl. Angaben in Kapitel 11.5.3 und 11.5.4). Die auf den trockenen Rohstoffmassenstrom bezogene Wasserstoffproduktion liegt für die on-site Reformierungsvarianten des Vergasergases jedoch nur um das 0,97- bis 1,12-fache höher als für die Reformierungsvarianten des Biogases aus Maissilage bzw. um das 1,06- bis 1,25-fache höher als für die Reformierungsvarianten des Biogases aus Kartoffelschalen. Verglichen mit den Energieeffizienzen für die Reformierung von Biogas aus Grünschnitt sowie Biotonnenabfällen als Rohstoff liefert die Reformierung von Vergasergas mit on-site Reformierung jedoch höhere Energieeffizienzen. Gegenüber der Biogasreformierung basierend auf Biotonnenabfällen liefert sogar die zentrale Reformierungsvariante von Vergasergas über 50% höhere Energieeffizienzen als jede der drei Anlagenvarianten der Biogasreformierung.

Die Energieeffizienz bezogen auf die gesamte eingebrachte Energiemenge beträgt bei der Reformierung von Vergasergas 89,9% bis 96,8% der Effizienz bezogen auf den Rohstoffenergieinhalt. Dabei ist bemerkenswert, dass im Fall der on-site Reformierung mit vorangehender CO_2-Abtrennung die auf die Gesamtenergie bezogene Energieeffizienz niedriger liegt als bei der Variante mit direkter on-site Reformierung. Das liegt daran, dass die CO_2-Abtrennung mittels MEA-Absorption einen relativ hohen Energiebedarf in Form von Dampf für die Regenerierung der MEA-Lösung aufweist. Dieser Energiebedarf verringert daher die auf die insgesamt eingebrachte Energie bezogene Energieeffizienz deutlich gegenüber der direkten on-site Reformierungsvariante.

In Abbildung 7.5 sind die Energieeffizienzen für die Varianten der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation sowie der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation dargestellt. Ähnlich wie bei der Produktionseffizienz ist auch bei der Energieeffizienz die Dunkel- und Photofermentation von Maiskorn der Dunkel- und Photofermentation von Kartoffelabfällen überlegen. Allerdings fällt der Unterschied zwischen den beiden Rohstoffen nicht so deutlich aus, wie bei der Produktionseffizienz. Diese Abweichung zur Produktions-effizienz liegt auch hier wieder an den Unterschieden zwischen den unteren trockenen

Heizwerten der beiden Rohstoffe, wobei der Heizwert der Maiskörner etwa das 1,24-fache des Heizwerts der Kartoffelschalen beträgt (siehe Angaben in Kapitel 11.5.5). Die auf den trockenen Rohstoffmassenstrom bezogene Wasserstoffproduktion liegt für Maiskörner jedoch um das 1,35-fache höher als die für Kartoffelschalen.

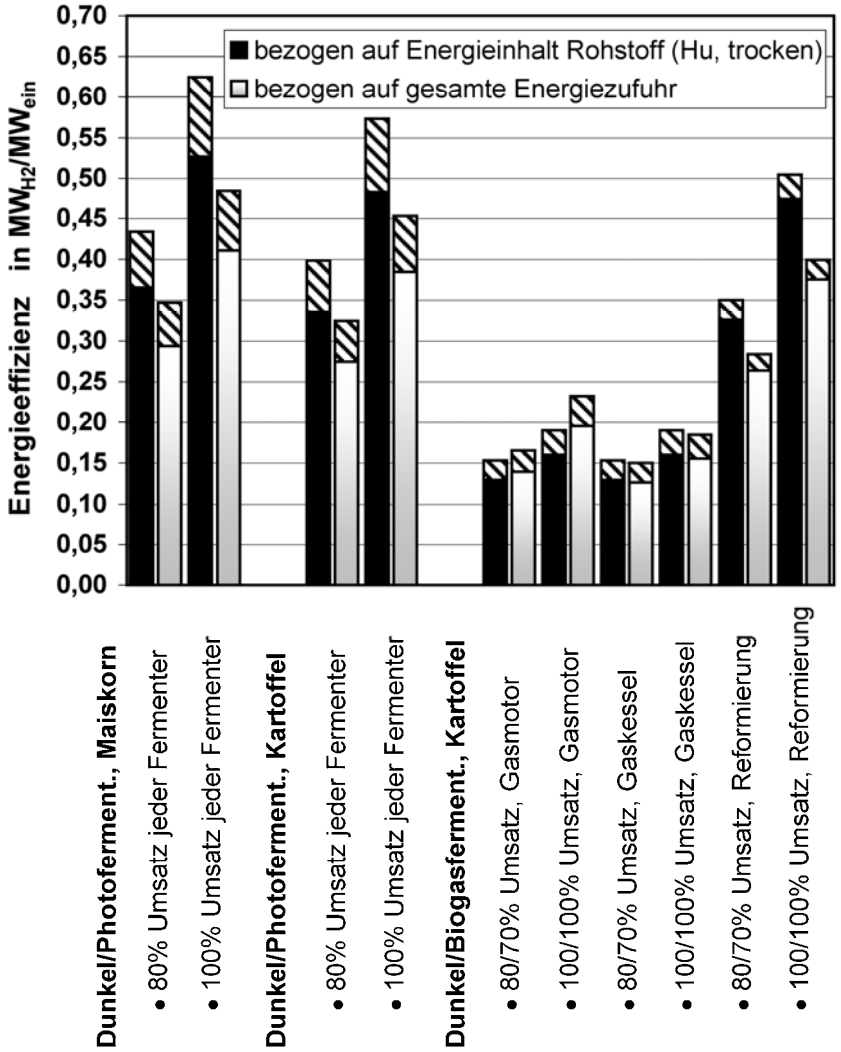


Abbildung 7.5: Energieeffizienz der Technologien basierend auf Dunkelfermentation (volle Balken: 80% Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage, schraffierte Balken: 95% Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage)

Durch eine Steigerung der Umsätze in den Dunkel- und Photofermentern ist auch bei der Energieeffizienz, so wie schon bei der Produktionseffizienz, ein nennenswertes

Optimierungspotenzial zu erwarten, da die Spanne zwischen der realistisch (jeweils 80% Umsatz in den Fermentern) und der theoretisch maximal erreichbaren Energieeffizienz bei jeweils 100% Umsatz in den Fermentern beträchtlich ist. Darüber hinaus kann auch durch die Erhöhung der Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage eine Steigerung der Energieeffizienz um ca. 19% erreicht werden. Das Verhältnis zwischen der auf die insgesamt eingebrachte Energiemenge bezogenen Energieeffizienz und der reinen rohstoffbezogenen Energieeffizienz fällt hier etwas schlechter aus als bei den biogas- und vergasergasbasierten Technologien. Das Verhältnis der beiden Effizienzen liegt für die gekoppelte Dunkel- und Photofermentation zwischen 77,6% und 81,7%, wobei mit Kartoffelschalen etwas höhere Verhältnisse als beim Rohstoff Maiskorn erreicht werden.

Die Energieeffizienzen der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation zeigen im Wesentlichen das gleiche Verhalten wie die Produktionseffizienzen dieser Technologie. Bemerkenswert ist jedoch, dass die Energieeffizienzen bezogen auf die insgesamt eingebrachte Menge an Energie für die Varianten mit Nutzung des Biogases im Gasmotor höher liegen als die Effizienzen bezogen auf den Rohstoffenergieinhalt. Dieser Umstand entsteht dadurch, dass im Gasmotor wesentlich mehr Strom produziert wird, als für den Betrieb der Anlage nötig wäre. Der dadurch entstehende Benefit übersteigt sogar noch den im realistischen Fall mit 80/70% Umsatz in den Fermentern vorhandenen Bedarf an Prozesswärme. Im Fall der Nutzung des Biogases im Gaskessel kann hingegen zwar der gesamte Bedarf an Prozesswärme abgedeckt werden, allerdings kann der Strombedarf nicht durch eine Eigenproduktion bereitgestellt werden. Deshalb fällt hier die auf den Gesamtenergiebedarf bezogene Energieeffizienz immer niedriger aus, als die auf die Rohstoffenergie bezogene. Für diese beiden Anlagenvarianten der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation mit Nutzung des Biogases im Gasmotor bzw. im Gaskessel ergibt sich für die Energieeffizienz, wie auch schon für die Produktionseffizienz, nur ein geringes reelles Optimierungspotenzial durch Erhöhung der Umsätze in den Fermentern, da sogar die theoretisch maximal mögliche Energieeffizienz mit 100% Umsatz in den Fermentern nur wenig höher liegt, als die Energieeffizienz mit realistischen 80% Umsatz in den Fermentern. Eine Erhöhung der Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage auf 95% zeigt hingegen vergleichsweise ein höheres realisierbares Optimierungspotenzial.

Die Energieeffizienzen der Varianten mit on-site Reformierung des produzierten Biogases sind für 80% Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage, ähnlich wie bei den Produktionseffizienzen, vergleichbar mit den Energieeffizienzen der Dunkel- und Photofermentation mit dem gleichen Rohstoff (Kartoffelschalen). Eine Erhöhung der Wasserstoffrückgewinnung wirkt sich bei der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation wieder wesentlich weniger stark auf die Energieeffizienzen aus als bei der Dunkel- und Photofermentation, da diese Erhöhung nur die Wasserstoffgewinnung aus dem

Dunkelfermenter beeinflusst. Wie bei der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation ist aber auch hier durch die Erhöhung der Umsätze in den Fermentern ein rentables Optimierungspotenzial für die Energieeffizienzen zu erwarten.

In Abbildung 7.6 ist eine Gegenüberstellung der Energieeffizienzen aller betrachteten Technologien und Anlagenvarianten dargestellt. Sie zeigt deutlich, dass die Referenztechnologie der Erdgasreformierung bei weitem die höchsten Energieeffizienzen aufweist. Das liegt daran, dass der Rohstoff in der Reformierungsanlage sehr effizient ausgenutzt wird. Darüber hinaus wird in der gewählten Anlagenverschaltung mehr Strom produziert, als für den Betrieb der Anlage nötig ist. Daher liegt die Energieeffizienz bezogen auf die insgesamt eingebrachte Menge an Energie auch höher als die auf den Energieinhalt des Rohstoffs bezogene Energieeffizienz. Für die alkalische Elektrolyse wurde nur die auf die Gesamtenergie bezogene Energieeffizienz ermittelt, da der verwendete Rohstoff Wasser keinen bewertbaren Energieinhalt aufweist. Diese Energieeffizienz der Elektrolyseanlagen ist beträchtlich höher als die der biomassebasierten Technologien. Die Abbildung zeigt auch, dass innerhalb der biomassebasierten Technologien die Biogasvarianten mit Maissilage und Kartoffelschalen als Rohstoff die höchsten Energieeffizienzen aufweisen. Nur die theoretischen Varianten der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation mit 100% Umsatz in den Fermentern weisen noch höhere Energieeffizienzen auf. Um mit der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation höhere Effizienzen zu erzielen als mit der Reformierung von Biogas aus Maissilage bzw. Kartoffelschalen wäre also auf jeden Fall eine beträchtliche kombinierte Erhöhung der Umsätze in den Fermentern und der Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage nötig. Das gilt insbesondere auch für die Energieeffizienz bezogen auf die gesamte Energiezufuhr in den Prozess. Verglichen mit der Reformierung von Vergasergas fällt die Energieeffizienz der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation etwas besser aus. Aber selbst hier ist eine kombinierte Erhöhung der Umsätze in den Fermentern und der Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage erforderlich, um die Werte der on-site Reformierung von Vergasergas zu erreichen. Ähnliches gilt auch für die kombinierte Dunkel- und Biogasfermentation mit on-site Reformierung des Biogases.

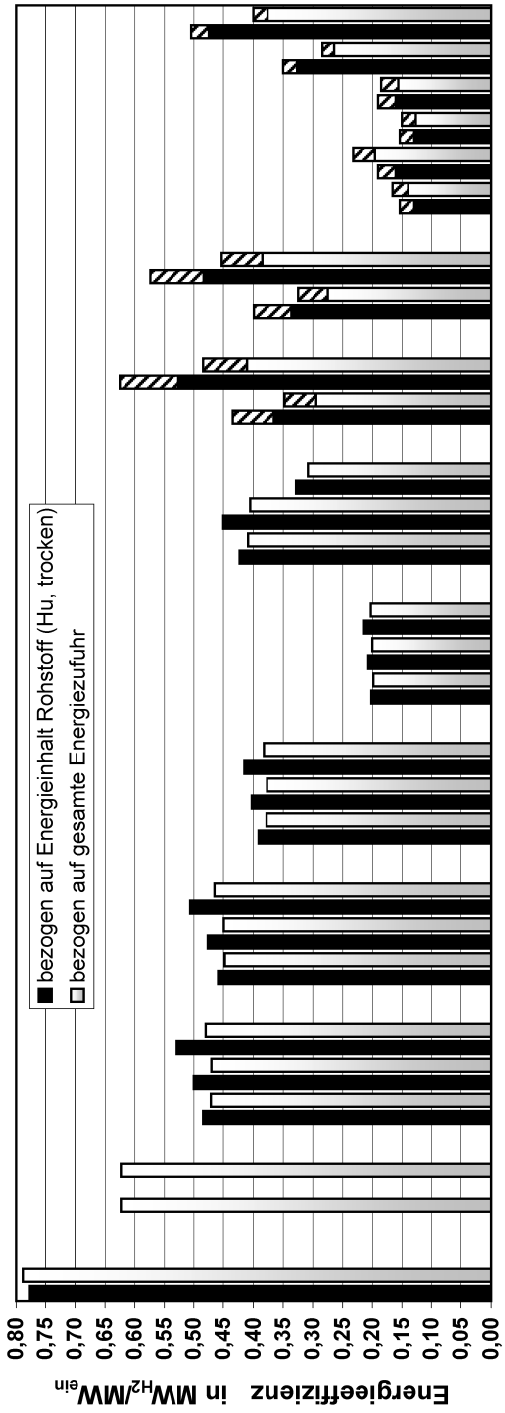


Abbildung 7.6: Energieeffizienz aller betrachteten Technologien zur Wasserstoffproduktion (Technologien mit Dunkelfermentation: volle Balken beziehen sich auf 80% Wasserstoffrückgewinnung, schraffierte Balken auf 95% Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage)

7.2 Wirtschaftlichkeit der Gesamtprozessketten

Für die Beurteilung der Wirtschaftlichkeit der in Kapitel 6 beschriebenen Gesamtprozessketten wurden die Gestehungskosten des Wasserstoffs an der Tankstelle für einen Abschreibungszeitraum von 10 bzw. 15 Jahren ermittelt. Eine Gegenüberstellung dieser Gestehungskosten bezogen auf den Energieinhalt des Wasserstoffs in kWh für die Technologien der Reformierung von Biogas und der Reformierung von Vergasergas ist in Abbildung 7.7 gezeigt. Zu Vergleichszwecken sind in diesem Diagramm auch die Gestehungskosten für Diesel und Benzin angeführt.

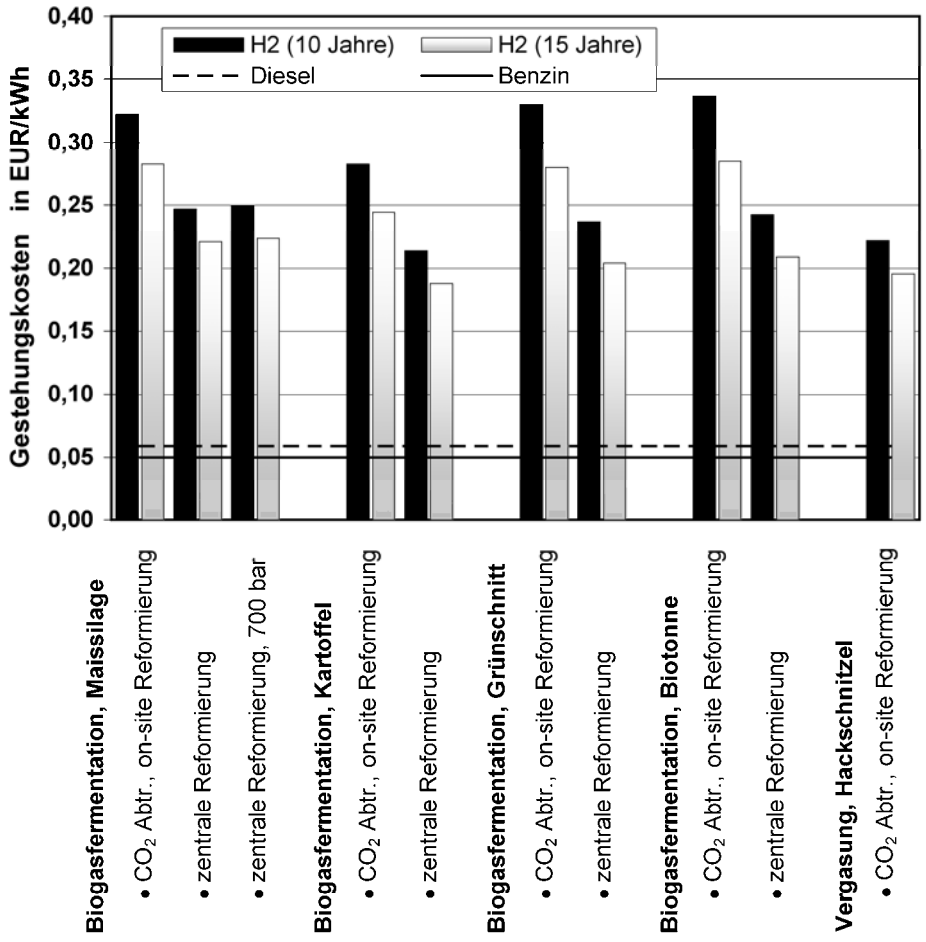


Abbildung 7.7: Gestehungskosten an der Tankstelle pro kWh für die Technologien basierend auf Biogas und Vergasergas

Die Abbildung zeigt, dass innerhalb der Varianten der Reformierung von Biogas diejenigen mit Kartoffelschalen als Rohstoff die niedrigsten Gestehungskosten pro kWh H_2 aufweisen. Bei den Varianten mit CO_2-Abtrennung und on-site Reformierung liefert der Rohstoff Maissilage die zweitniedrigsten energiebezogenen Kosten, gefolgt von den Rohstoffen Grünschnitt und Biotonnenabfälle. Bei den zentralen Reformierungsvarianten stellt sich die Reihenfolge etwas anders dar, hier steigen die Kosten der Reihe nach von den Kartoffelschalen über Grünschnitt und Biotonnenabfälle zum höchsten Wert für die Maissilage an. Es zeigt sich daher, dass eine Rohstoffvariante nicht generell günstiger als eine andere ist, sondern dass die Wirtschaftlichkeit auch von der Kombination aus Anlagenlayout und Rohstoff abhängt. Besonders hervorzuheben ist, dass die Variante mit Biotonnenabfällen im Vergleich zu den anderen Rohstoffvarianten sehr ähnliche Kosten liefert, obwohl sie für die Produktions- und Energieeffizienz sehr viel schlechtere Ergebnisse aufweist. Das liegt unter anderem auch daran, dass für die Biotonnenabfälle zwar Kosten für den Transport berücksichtigt wurden, es wurde jedoch davon ausgegangen, dass die Biotonnenabfälle selbst keine Kosten aufweisen.

Für die Variante der Reformierung von Biogas mit Maissilage als Rohstoff wurde zusätzlich zu den üblichen Gesamtprozessketten auch eine Kette mit Wasserstoffautos mit einem Wasserstofftank mit 700 bar anstelle der sonst gewählten 350 bar untersucht. Diese Änderung des Drucks bewirkt kaum eine Änderung der Gestehungskosten pro kWh Wasserstoff an der Tankstelle. Sie sind jedoch geringfügig (um 0,002-0,003 EUR/kWh) höher als die Kosten für die Prozesskette mit 350 bar Wasserstofftank.

Der Vergleich der on-site Reformierung von Vergasergas mit den Varianten für die Reformierung von Biogas zeigt, dass die Reformierung von Vergasergas wesentlich günstiger ist als alle Anlagen der Reformierung von Biogas im Anlagenlayout der CO_2-Abtrennung und anschließenden on-site Reformierung. Die Vergasungstechnologie ist dabei um 0,049-0,115 EUR/kWh günstiger als die Biogastechnologien. Verglichen mit den zentralen Reformierungsvarianten für Biogas liegt die Biogasvariante mit Kartoffelschalen als Rohstoff etwas niedriger (0,008 EUR/kWh) als die Reformierung des Vergasergases. Die anderen Varianten der zentralen Biogasreformierung liefern um 0,008-0,028 EUR/kWh höhere Gestehungskosten als die Biomassevergasung mit CO_2-Abtrennung und on-site Reformierung.

Die Verlängerung der Abschreibungsdauer von 10 auf 15 Jahre senkt die Gestehungskosten erwartungsgemäß ab. Bei den Varianten mit CO_2-Abtrennung und on-site Reformierung wirkt sich diese Verlängerung etwas stärker mit einer Reduktion der Gestehungskosten um 12,0-15,4% aus. Bei den zentralen Reformierungsvarianten beträgt die Kostenreduktion hingegen nur 10,6-14,1% Prozent. Verglichen mit den Gestehungs-

kosten an der Tankstelle für Diesel und Benzin sind die Kosten für den Wasserstoff aus der Reformierung von Biogas bzw. Vergasergas extrem hoch. Gegenüber den Diesel-Gestehungskosten betragen die Kosten für biogas- und vergasergasbasierten Wasserstoff das 3,2- bis 5,7-fache, gegenüber Benzin sind die Kosten sogar 3,8 bis 6,7 Mal so hoch.

Die Wasserstoffgestehungskosten an der Tankstelle pro kWh H_2 für die Technologien der Dunkel- und Photofermentation sowie der Dunkel- und Biogasfermentation sind in Abbildung 7.8 dargestellt. Von den beiden Rohstoffen für die gekoppelte Dunkel- und Photofermentation liefern die Kartoffelschalen die niedrigeren Kosten obwohl die Wasserstoffproduktion pro Kilogramm eingesetztem Rohmaterial für Maiskorn ca. 1,35-mal höher ist als die für Kartoffelschalen. Der Grund dafür ist, dass die Summe der Kosten für den Rohstoff, den Rohstofftransport und das zur Verdünnung des Substrates benötigte Wasser für die Anlagenvariante mit Maiskorn als Rohstoff 2,38 bis 2,39-mal höher ist als für den Rohstoff Kartoffelschalen. Dadurch wird der mengenmäßige Vorteil des Maiskorns durch die zusätzlichen Kosten mehr als kompensiert, wodurch die Gestehungskosten für die Kartoffelschalen niedriger ausfallen als für Maiskorn. In beiden Anlagenvarianten bieten sowohl die Erhöhung der Umsätze in den beiden Fermentern als auch die Erhöhung der Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage nur geringe Optimierungspotenziale. Zwischen den realistischen Umsätzen von jeweils 80% in den Fermentern und dem theoretischen Maximum der Wasserstoffproduktion mit jeweils 100% Umsatz in den Fermentern können die Gestehungskosten nur um 3,3-7,4% verringert werden. Die tatsächlich mögliche Kostenreduktion durch Verbesserung der Umsätze wird noch um einiges darunter liegen. Die Erhöhung der Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage von 80% auf 95% bewirkt sogar nur eine Kostenreduktion um 1,5-3,9%. Eine Erhöhung der Abschreibungsdauer von 10 auf 15 Jahre bewirkt bei der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation ebenfalls nur eine sehr geringe Senkung der Wasserstoffgestehungskosten um 5,3-6,4%.

Die Varianten der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation mit Nutzung des Biogases im Gasmotor bzw. Gaskessel liefern, im Gegensatz zu ihrem schlechten Abschneiden bei der Wasserstoffproduktion, eine gute Wirtschaftlichkeit. Die Variante mit Biogasnutzung im Gasmotor führt sogar zu niedrigeren Gestehungskosten als beide Varianten der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation. Die Variante mit Biogasnutzung im Gaskessel ist in jedem Fall günstiger als die Dunkel- und Photofermentation von Maiskorn. Für einige Kombinationen aus Umsatz und Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage ist sie sogar günstiger als die Dunkel- und Photofermentation von Kartoffelschalen.

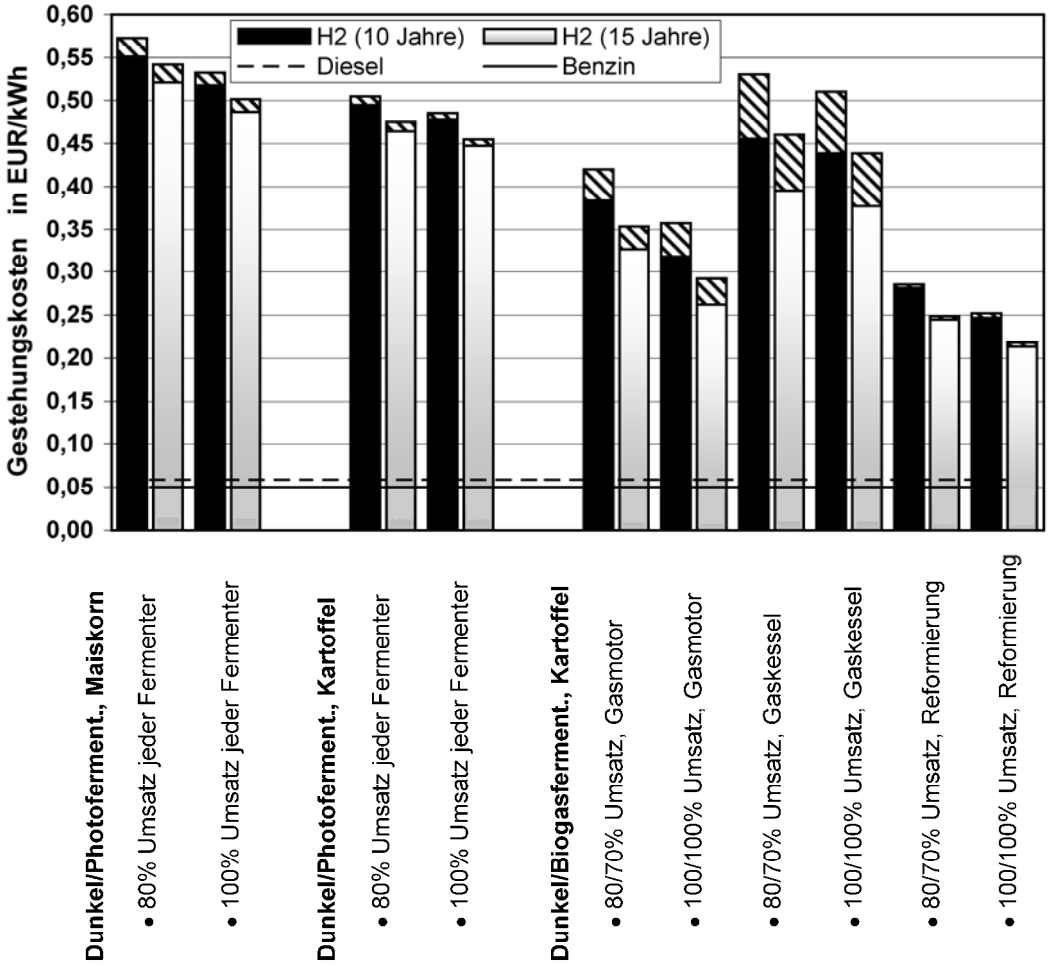


Abbildung 7.8: Gestehungskosten an der Tankstelle pro kWh für die Technologien basierend auf Dunkelfermentation
(volle Balken: 95% Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage, schraffierte Balken: 80% Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage)

Innerhalb aller in Abbildung 7.8 dargestellten Technologien führt die gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation mit direkter on-site Reformierung des erzeugten Biogases zu den niedrigsten Wasserstoffgestehungskosten pro kWh Wasserstoff. Im Vergleich zur gekoppelten Dunkel- und Photofermentation von Maiskorn liegen die Kosten hier um 49,0-56,6% niedriger, verglichen mit der Dunkel-/Photofermentation von Kartoffelschalen liegen die Gestehungskosten um 43,1-52,3% niedriger. Die Wasserstoffgestehungskosten bei der on-site Reformierung des Biogases können gegenüber der Nutzung des Biogases im Gaskessel um 38,0-50,6% reduziert werden, gegenüber der Nutzung des Biogases im Gasmotor hingegen nur um 18,6-31,9%.

Die Steigerung der Umsätze in den Fermentern der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation von 80/70% auf das theoretische Maximum von jeweils 100% liefert für die drei Anlagenvarianten sehr unterschiedliche Optimierungspotenziale. Die geringste Kostenreduktion wird für die Variante mit Nutzung des Biogases im Gaskessel erzielt. Sie beträgt nur 3,7-4,6%, wodurch für eine realistische Umsatzerhöhung so gut wie keine Senkung der Kosten zu erwarten ist. Für die Variante der Nutzung des Biogases im on-site Reformer beträgt die theoretisch maximale Kostenreduktion durch Erhöhung der Umsätze immerhin 11,8-13,0%. Das höchste Reduktionspotenzial für die Wasserstoffgestehungskosten ergibt sich für die gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation mit Nutzung des Biogases im Gasmotor. Hier beträgt die theoretische Reduktion der Kosten 14,9-19,8% und bietet daher gute Chancen für eine rentable Kostenreduktion bei einer realistischen Erhöhung der Umsätze.

Auch die Erhöhung der Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage von 80% auf 95% führt zu sehr unterschiedlichen Kostenreduktionen. Hier kann für die Variante der Biogasnutzung durch on-site Reformierung nur eine verschwindende Senkung der Gestehungskosten von 1,6-2,3% erreicht werden. Bei der Nutzung des Biogases im Gasmotor tritt ebenfalls nur ein geringes Einsparungspotenzial von 7,6-11,2% auf. Die größte Auswirkung auf die Wasserstoffgestehungskosten durch die Steigerung der Wasserstoffrückgewinnung ergibt sich für die Anlagenvariante der Dunkel- und Biogasfermentation mit Nutzung des Biogases im Gaskessel. In diesem Fall beträgt die Reduktion der Gestehungskosten pro kWh Wasserstoff 14,0-14,2%.

Die Verlängerung der Abschreibungsdauer von 10 auf 15 Jahre bewirkt bei den drei Anlagenvarianten der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation eine Senkung der Kosten um 12,9-18,1%. Auch bei den Technologien, die auf der Dunkelfermentation basieren, sind die erzielten Gestehungskosten für Wasserstoff an der Tankstelle pro Kilowattstunde Wasserstoff deutlich höher als die Kosten für die Standardtreibstoffe Benzin und Diesel. Die Gestehungskosten für den Wasserstoff sind hier im Vergleich zum Diesel ca. 3,6 bis 9,7 Mal höher, im Vergleich zum Benzin betragen sie sogar das 4,3- bis 11,4-fache.

Eine Gegenüberstellung der Gestehungskosten an der Tankstelle pro kWh H_2 aller betrachteten Technologien zur Wasserherstellung ist in Abbildung 7.9 gezeigt. Erwartungsgemäß liegen die Kosten für die Standardtechnologie Dampfreformierung von Erdgas im Vergleich deutlich am niedrigsten. Sie liegen jedoch immer noch um ca. 57,6-96,2% höher als die Gestehungskosten für Diesel und Benzin.

Abbildung 7.9: Gestehungskosten an der Tankstelle pro kWh für alle betrachteten Technologien zur Wasserstoffproduktion (Technologien mit Dunkelfermentation: volle Balken beziehen sich auf 95% Wasserstoffrückgewinnung, schraffierte Balken auf 80% Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage)

Die Gestehungskosten für Wasserstoff aus der alkalischen Elektrolyse liegen im Bereich der Kosten für die Varianten der Reformierung von Biogas. Dabei entstehen mit der kleinen Elektrolyseanlage rund 30,0-33,7% höhere Kosten als mit der großen Elektrolyseanlage. Durch den Einsatz von Ökostrom für den Betrieb der Elektrolyseanlagen werden die Gestehungskosten hingegen nur um 5,2-7,5% gegenüber dem konventionellen Strommix erhöht. Im Vergleich zum Diesel liegen die Gestehungskosten für die alkalische Elektrolyse beim 3,8 bis 5,7-fachen, im Vergleich zum Benzin sogar beim 4,4 bis 6,7-fachen.

Die Wasserstoffgestehungskosten für die gekoppelte Dunkel- und Photofermentation von Mais liegen im Vergleich zur teuersten Reformierungsvariante von Biogas (CO_2-Abtrennung und on-site Reformierung von Biotonnenabfällen) um 53,7-90,3% höher. Die Dunkel-/Photofermentation von Kartoffelschalen führt ebenso zu Kosten, die um 42,1-66,7% höher liegen als für diese Biogasreformierungsvariante. Im Gegensatz dazu führt die gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation mit on-site Dampfreformierung des erzeugten Biogases nur zu 13,6-33,8% höheren Wasserstoffgestehungskosten als die günstigste Variante der Reformierung von Biogas, nämlich der zentralen Reformierung von Biogas aus Kartoffelschalen.

Da auch die Gestehungskosten pro gefahrenem Kilometer von Interesse sind, wurden auch diese Kosten analysiert. Für die kilometerbezogenen Gestehungskosten wurde zusätzlich eine Unterscheidung in Wasserstofffahrzeuge mit Verbrennungskraftmaschine und Fahrzeuge mit Brennstoffzelle vorgenommen, um den unterschiedlichen Kraftstoffverbrauch dieser beiden Fahrzeugvarianten mitzuberücksichtigen. Die Ergebnisse dieser Analyse für Fahrzeuge mit Verbrennungskraftmaschine sowie Brennstoffzellenantrieb sind in Abbildung 7.10 dargestellt. Da die Ergebnisse der Gestehungskosten bezogen auf einen gefahrenen Kilometer direkt durch Umrechnung der Gestehungskosten pro kWh H_2 mit dem Kraftstoffverbrauch pro Kilometer (0,0078 kg H_2 pro km für Brennstoffzellenfahrzeuge bzw. 0,0140 kg H_2 pro km für Verbrennungskraftmotoren, siehe auch Anhang Kapitel 11.3) und dem unteren Heizwert von Wasserstoff (33,33 kWh/kg) ermittelt wurden, gelten die oben gemachten Aussagen über die Verhältnisse zwischen den Ergebnissen der einzelnen Wasserstoffproduktionstechnologien auch für die kilometerbezogenen Gegenüberstellungen. Daher sind in Abbildung 7.10 auch nur die Ergebnisse für eine Abschreibungsdauer von 10 Jahren angeführt. Die Reduktion der Kosten durch die Verlängerung der Abschreibungsdauer von 10 auf 15 Jahre kann durch die angegebenen Verhältnisse zwischen den beiden Abschreibungszeiträumen in der Diskussion der Ergebnisse für die Gestehungskosten pro kWh H_2 ermittelt werden.

Abbildung 7.10: Gestehungskosten an der Tankstelle pro gefahrenem km für alle betrachteten Technologien zur Wasserstoffherstellung
(Technologien mit Dunkelfermentation: volle Balken beziehen sich auf 95% Wasserstoffrückgewinnung, schraffierte Balken auf 80% Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage)

Der Vergleich der Gestehungskosten pro gefahrenem Kilometer zwischen der Variante der Standardwasserstoffproduktion durch Dampfreformierung von Erdgas und den Treibstoffen Benzin und Diesel zeigt, dass die Kosten für den Wasserstoff pro gefahrenem Kilometer für Fahrzeuge mit Verbrennungskraftmaschinen auch hier höher liegen als die Kosten für Benzin und Diesel. Allerdings ist der Unterschied zwischen den Kosten nicht mehr so hoch wie bei den Gestehungskosten pro kWh H_2. Konkret liegt der Preis für Wasserstoff pro Kilometer aus der Reformierung von Erdgas für Fahrzeuge mit H_2-Motor 46,4-53,1% über dem von Benzin und Diesel. Für Brennstoffzellenfahrzeuge liegen die Wasserstoffgestehungskosten der Reformierung von Erdgas hingegen sogar niedriger als die Kosten für Benzin und Diesel. Die Wasserstoffkosten pro gefahrenem Kilometer liegen für diese Prozesskette dabei um 14,7-18,4% niedriger als die der derzeitigen fossilen Treibstoffe.

Wie bereits oben erwähnt, werden die Gestehungskosten pro gefahrenem Kilometer rein durch Umrechnung der Gestehungskosten pro kWh H_2 über den Heizwert und den Kraftstoffverbrauch pro gefahrenem Kilometer ermittelt. Das gilt jedoch nicht nur für die Wasserstoffergebnisse, sondern auch für die angegebenen Werte für Benzin und Diesel (erforderliche Kraftsoffwerte sind im Anhang, Kapitel 11.3, angeführt). Durch die unterschiedlichen Heizwerte und Kraftstoffverbräuche kommen die kilometerbezogenen Wasserstoffgestehungskosten relativ gesehen niedriger zu liegen als die kilometerbezogenen Diesel- und Benzingestehungskosten:

$$\text{Kosten } H_{2,\text{Motor}} \text{ pro km} = 0{,}467 * \text{Kosten } H_{2,\text{ Motor}} \text{ pro kWh}$$

$$\text{Kosten } H_{2,\text{Brennstoffzelle}} \text{ pro km} = 0{,}260 * \text{Kosten } H_{2,\text{ Brennstoffzelle}} \text{ pro kWh}$$

$$\text{Kosen Diesel pro km} = 0{,}507 * \text{Kosten Diesel pro kWh}$$

$$\text{Kosten Benzin pro km} = 0{,}625 * \text{Kosten Benzin pro kWh}$$

Damit verringern sich auch die Verhältnisse zwischen den Wasserstoffgestehungskosten der einzelen Varianten und den Benzin- und Dieselgestehungskosten pro gefahrenem Kilometer gegenüber den Verhältnissen pro kWh. Für die erneuerbaren Technologien in Kombination mit Fahrzeugen mit Wasserstoffmotor betragen die Wasserstoffgestehungskosten somit das 3,19- bis 8,93-fache der Dieselgestehungskosten bzw. das 1,78- bis 4,98-fache der Benzinkosten. Für die erneuerbaren Technologien in Kombination mit Brennstoffzellenfahrzeugen betragen die Wasserstoffgestehungskosten hingegen nur das 2,80- bis 8,45-fache der aktuellen Dieselgestehungskosten bzw. das 1,56- bis 4,71-fache der Benzingestehungskosten. Es ist auch erwähnenswert, dass sich die Kosten zwischen Benzin und Diesel in den beiden Vergleichen unterschiedlich verhalten. Die Gestehungskosten pro kWh sind für Diesel um 18% höher als für Benzin. Die Kosten pro Kilometer sind für Diesel hingegen niedriger und betragen hier nur 95,7% der Kosten für Benzin. Das liegt

daran, dass der kilometerbezogene Benzinverbrauch höher ist als der Dieselverbrauch (siehe Kapitel 11.3).

Der Vergleich zwischen den Ergebnissen für Fahrzeuge mit Verbrennungskraftmaschinen und Fahrzeuge mit Brennstoffzellen zeigt eindeutig, dass die Wasserstoffgestehungskosten pro gefahrenem Kilometer für Fahrzeuge mit Verbrennungskraftmaschinen deutlich über den Kosten für Fahrzeuge mit Brennstoffzellen liegen. Die Kosten für die Wasserstoffmotoren liegen dabei 79,5% höher als die Kosten für die Brennstoffzellenantriebe. Der Grund dafür ist, dass der Wasserstoffverbrauch pro gefahrenem Kilometer in Fahrzeugen mit Verbrennungskraftmaschinen ebenfalls um diese 79,5% höher liegt als der für Fahrzeuge mit Brennstoffzellen (vgl. Angaben im Anhang Kapitel 11.3).

Als weitere Analyse der Wirtschaftlichkeit der Wasserstoffproduktion wurde eine Abschätzung der Änderung der Kosten pro gefahrenem Kilometer für das Jahr 2050 durchgeführt. Für diese Analyse wurde der zu erwartende Verbrauch an Wasserstoff in den Wasserstofffahrzeugen für das Jahr 2050 herangezogen (siehe Anhang Kapitel 11.3). Darüber hinaus wurde auch für den Transport des Wasserstoffs zwischen der Anlage zur Wasserstoffproduktion und der Wasserstofftankstelle ein verringerter Kraftstoffverbrauch der fossil betriebenen LKWs berücksichtigt. Ansonsten wurden keine weiteren Veränderungen von Wirkungsgraden der Anlagen oder Ähnliches berücksichtigt, da eine Vorhersage solcher Veränderungen enorm schwierig ist und den Rahmen der vorliegenden Arbeit überschritten hätte. Die Ergebnisse der Wasserstoffgestehungskosten an der Tankstelle pro Kilometer sind für Fahrzeuge mit Verbrennungskraftmaschine für heute und das Jahr 2050 in Abbildung 7.11, die Ergebnisse für Fahrzeuge mit Brennstoffzellenantrieb in Abbildung 7.12 dargestellt.

Für das Jahr 2050 wird erwartet, dass der Kraftstoffverbrauch pro gefahrenem Kilometer bei Benzinfahrzeugen im Vergleich zum heutigen Verbrauch stärker gesenkt werden kann als für Dieselfahrzeuge (siehe Angaben im Anhang Kapitel 11.3). Aus diesem Grund werden für das Jahr 2050, unter der Annahme von gegenüber heute unveränderten Kosten pro kWh für Diesel und Benzin, höhere Gestehungskosten pro gefahrenem Kilometer für Diesel (0,0260 EUR/km) als für Benzin (0,0256 EUR/km) erwartet. Der Übersichtlichkeit halber sind jedoch in den Diagrammen in Abbildung 7.11 und Abbildung 7.12 nur die Kosten für Benzin eingetragen. Es bleibt anzumerken, dass die Kosten für Benzin und Diesel bis zum Jahr 2050 mit hoher Sicherheit stark gegenüber den heutigen Kosten ansteigen werden. Daher werden sich auch bei gesenktem Verbrauch der Fahrzeuge Kosten für Benzin und Diesel pro gefahrenem Kilometer ergeben, die höher liegen als die heutigen kilometerbezogenen Kosten. Wie bereits erwähnt, wird diese Kostensteigerung jedoch aufgrund der schwierigen Abschätzbarkeit nicht mitberücksichtigt.

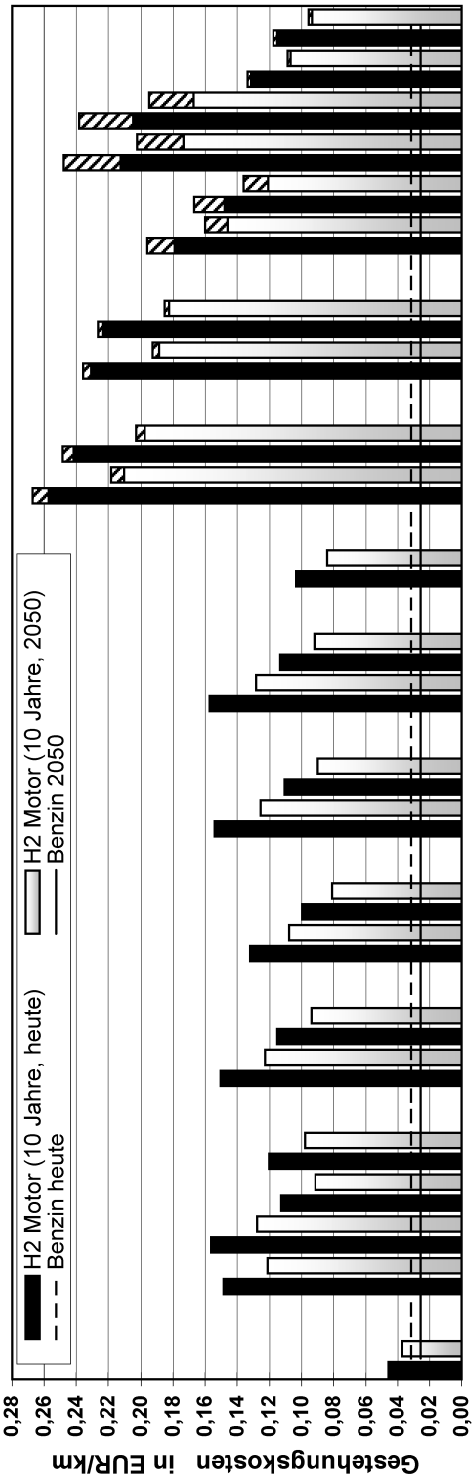


Abbildung 7.11: Gestehungskosten an der Tankstelle heute und für das Jahr 2050 pro gefahrenem km für alle betrachteten Technologien zur Wasserstoffherstellung und Fahrzeuge mit Wasserstoffverbrennungsmotor (Technologien mit Dunkelfermentation: volle Balken beziehen sich auf 95% Wasserstoffrückgewinnung, schraffierte Balken auf 80% Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage)

Abbildung 7.12: Gestehungskosten an der Tankstelle heute und für das Jahr 2050 pro gefahrenem km für alle betrachteten Technologien zur Wasserstoffherstellung und Fahrzeuge mit Wasserstoffbrennstoffzelle (Technologien mit Dunkelfermentation: volle Balken beziehen sich auf 95% Wasserstoffrückgewinnung, schraffierte Balken auf 80% Wasserstoffrückgewinnung in der PSA-Anlage)

Die Verringerung des Kraftstoffverbrauches der Wasserstofffahrzeuge sowie der LKWs für den Transport des Wasserstoffs zwischen der Wasserstoffproduktion und der Wasserstofftankstelle führt bei allen untersuchten Technologien zu sehr ähnlichen Kostenreduktionen pro gefahrenem Kilometer. Einzige Ausnahme stellt die Standardtechnologie der Dampfreformierung von Erdgas dar, die im Vergleich zu den anderen Technologien ein etwas höheres Reduktionspotenzial aufweist. Im Fall der Fahrzeuge mit Verbrennungskraftmaschinen kann unter den getroffenen Annahmen für den Pfad der Reformierung von Erdgas eine Reduktion der Wasserstoffgestehungskosten um 19,5% bis zum Jahr 2050 erzielt werden. Werden Fahrzeuge mit Brennstoffzellenantrieb herangezogen, so ist sogar eine Kostenreduktion von 27,4% zu erwarten, da bei den Brennstoffzellen ein höheres Optimierungspotenzial für den kilometerbezogenen Kraftstoffverbrauch erwartet wird (siehe Angaben im Anhang Kapitel 11.3) als bei den Wasserstoffverbrennungsmotoren.

Für die Gesamtprozessketten aller anderen Wasserstofftechnologien können bei Fahrzeugen mit Motor 18,3-18,7% der Gestehungskosten bis zum Jahr 2050 eingespart werden, bei Brennstoffzellenfahrzeugen sogar 26,2-26,6%. Dabei führen die Technologien der alkalischen Elektrolyse in der großen Anlagenbauform (sowohl mit als auch ohne Ökostrombetrieb), die Reformierungsvarianten von Biogas und Vergasergas sowie die gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation mit Nutzung des Biogases im on-site Reformer zu den höheren Einsparungspotenzialen.

Die Wasserstoffgestehungskosten pro Kilometer im Jahr 2050 liegen bei der Reformierung von Erdgas und Fahrzeugen mit Verbrennungskraftmaschine um 43,8% höher als die Kosten für Benzin pro km für das Jahr 2050. Bei Brennstoffzellenautos liegen die Wasserstoffkosten hingegen um 27,7% niedriger. Bis zum Jahr 2050 kann die Differenz zwischen den Wasserstoff- und Benzingestehungskosten pro km für Fahrzeuge mit H_2-Motor um 22,7% gegenüber heutigen Fahrzeugen verringert werden und somit die Wasserstoffkosten näher an die Benzinkosten herangeführt werden. Bei Fahrzeugen mit Brennstoffzelle, bei denen die Wasserstoffgestehungskosten für heutige Fahrzeuge schon niedriger liegen als die Benzingestehungskosten, kann die Differenz sogar noch um weitere 23,5% vergrößert werden.

Bei allen anderen untersuchten Technologien zur Wasserstoffherstellung in Kombination mit Fahrzeugen mit Verbrennungskraftmaschinen kann die Differenz der Gestehungskosten zwischen Wasserstoff und Benzin im Jahr 2050 gegenüber heute um 18,3-19,0% gesenkt werden. Für Fahrzeuge mit Brennstoffzellen kann die Differenz sogar um 28,4-36,7% verkleinert werden. In beiden Fällen liegen die höheren Reduktionspotenziale bei der großen alkalischen Elektrolyse, den Varianten der Reformierung von Biogas mit zentraler Reformierung, der Reformierung von Vergasergas und der gekoppelten Dunkel- und

Biogasfermentation mit on-site Reformierung des produzierten Biogases. Trotz dieses Potenzials zur Verringerung des Unterschiedes in den Gestehungskosten für Wasserstoff und Benzin pro gefahrenem Kilometer liegen die Kosten für Wasserstoff für die Prozessketten mit regenerativen Produktionstechnologien auch im Jahr 2050 für Fahrzeuge mit Wasserstoffmotor noch 3,2- bis 8,5-mal und für Fahrzeuge mit Brennstoffzellen 1,6- bis 4,3-mal so hoch wie die Kosten für Benzin im Jahr 2050. Allerdings muss dabei wieder bedacht werden, dass für Benzin keine Kostensteigerung bis zum Jahr 2050 berücksichtigt wurde. Die Kosten für Benzin müssten bis zum Jahr 2050 etwa das 1,6-fache der derzeitigen Kosten betragen, um die gleichen Gestehungskosten pro gefahrenem Kilometer zu verursachen, wie die günstigste der untersuchten regenerativen Technologien (zentrale Reformierung von Biogas aus Kartoffelschalen) in Kombination mit Brennstoffzellenfahrzeugen. Würden die Benzinkosten auf das 2,6-fache ansteigen, so wären bei Verwendung von Brennstoffzellenfahrzeugen nur noch die kilometerbezogenen Wasserstoffgestehungskosten der Anlagenvarianten der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation sowie der gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation mit Nutzung des Biogases im Gaskessel bzw. im Gasmotor höher, als die kilometerbezogenen Benzinkosten.

8 Schlussfolgerungen und Ausblick

Die nachhaltige Produktion von Wasserstoff kann mit Hilfe von unterschiedlichen Technologien erfolgen. In der vorliegenden Arbeit wurden 5 verschiedene Technologien, teilweise mit unterschiedlichen Anlagenbauformen und teilweise mit unterschiedlichen Rohstoffen untersucht, die für den Einsatz in Österreich geeignet sind. Dabei wurden sowohl die Produktions- und Energieeffizienz als auch die Wirtschaftlichkeit der verschiedenen Varianten beurteilt. Um für eine gegebene Region die geeignetste Technologie zu ermitteln, müssen jedoch nicht nur die technischen Leistungsmerkmale, wie Produktions- und Energieeffizienz, sowie die wirtschaftlichen Kenndaten, sondern vor allem auch die in der Region vorgegebenen Rahmenbedingungen wie Rohstoffsituation und Infrastruktur berücksichtigt werden. Nur die Summe all dieser Informationen ermöglicht es, die regional nachhaltigste und wirtschaftlichste Produktionstechnologie für Wasserstoff zu ermitteln. Die Berücksichtigung der regionalen Gegebenheiten hätte den Rahmen der vorliegenden Arbeit gesprengt, an dieser Stelle soll jedoch kurz auch auf diese Problematik eingegangen werden.

Die Analyse der Produktions- und Energieeffizienz der verschiedenen Technologien hat gezeigt, dass die zentrale Reformierung von Biogas aus Maissilage zu einer der besten Wasserstofftechnologien innerhalb der untersuchten Verfahren zählt. Die Kosten für diese Technologievariante liegen dagegen eher im Mittelfeld der Technologien. Da die Kosten üblicherweise einen sehr hohen Stellenwert in der Beurteilung haben, wird die Reformierung von Biogas aus Maissilage daher gegenüber den anderen Biogasrohstoffen nicht bevorzugt werden. Diese Produktionsvariante wird darüber hinaus in einer Region, in der Mais nicht angebaut wird, nicht zielführend sein, da ansonsten extrem weite Transportwege für den Rohstoff in Kauf genommen werden müssten. Für eine nachhaltige Wasserstoffproduktion sollten die Transportwege für die Rohstoffe jedoch so gering wie möglich gehalten werden. In diesem Fall sollte also überlegt werden, ob der Einsatz von Rohstoffen für die Biogasfermentation mit niedrigerer Wasserstoffproduktion oder eventuell die Wahl einer anderen Technologie, wie beispielsweise der Biomassevergasung, nicht zielführender wäre. Ebenso sollten Abfälle wie Grünschnitt und Kartoffelschalen den Vorzug gegenüber

Rohstoffen erhalten, die auch als Nahrungsmittel eingesetzt werden können (beispielsweise Mais). Auf diese Weise kann verhindert werden, dass eine Konkurrenzsituation zwischen der Lebensmittel- und der Energieproduktion entsteht. Eine weitere Möglichkeit diese Problematik zu verhindern, wäre die Nutzung von Zwischenfrüchten aus dem Ackerbau (Amon et al., 2007). Diese Zwischenfrüchte haben bei geeigneter Wahl den zusätzlichen Vorteil, dass sie Stickstoff und andere Pflanzennährstoffe im Boden anreichern und somit die Bodenqualität erhöhen und den Düngemittelbedarf absenken.

Die Produktionsvarianten mit zentraler Reformierungsanlage liefern generell gute Ergebnisse für die Effizienzen sowie die Kosten. Sie sind jedoch ungünstig in Regionen, in denen die erforderliche Infrastruktur an Erdgasleitungen nicht oder nicht in ausreichender Kapazität vorhanden ist. Die Errichtung der erforderlichen Anschlüsse an das Erdgasnetz würde in solchen Fällen voraussichtlich die Kosten der Varianten derart erhöhen, dass die Wirtschaftlichkeit dafür nicht in einem annehmbaren Abschreibungszeitraum gegeben wäre. Darüber hinaus muss bei den zentralen Reformierungsvarianten auch darauf geachtet werden, dass die Standorte der Reformeranlagen so gewählt sind, dass die Transportwege von den Anlagen zu den Wasserstofftankstellen nicht zu weit ausfallen. Es ist daher empfehlenswert, solche zentralen Reformierungsanlagen in unmittelbarer Nähe von Ballungsräumen zu positionieren, da hier sowohl die Straßeninfrastruktur als auch der benötigte Absatz an Wasserstoff in einem vertretbaren Umkreis der Anlage gewährleistet ist.

Für Regionen, in denen kein sehr dichtes Netz an Wasserstofftankstellen aufgebaut werden kann, wie beispielsweise dünn besiedelte Gebirgsregionen, sind die Technologien mit on-site Reformierung, die alkalische Elektrolyse bzw. die gekoppelte Dunkel- und Photofermentation zu bevorzugen. Diese Technologien weisen alle eine Größenordnung auf, in der nur wenige Tankstellen mit einer Produktionsanlage versorgt werden können. Daher werden auch die Transportwege für die Verteilung des Wasserstoffs zu den Tankstellen in einem vertretbaren Rahmen bleiben. Innerhalb der betrachteten on-site Reformierungs-varianten liefert die Biomassevergasung von Hackschnitzeln die höchsten Produktions-effizienzen, dafür aber nur vergleichsweise mittelmäßige Energieeffizienzen. Auch hier muss aber wieder die Rohstoffsituation mit einbezogen werden. In Regionen mit geringem Waldanteil ist daher vom Einsatz der Vergasungstechnologie eher abzusehen.

Bei der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation ist anzumerken, dass der Flächenbedarf für die Photofermentation berächtlich ist (Ljunggren et al., 2010). Bei der Wahl dieses Prozesses muss daher mitberücksichtigt werden, dass die erforderlichen Fermenterflächen zur Verfügung stehen und darüber hinaus eine ausreichende Einstrahlungsdichte der Sonnenenergie aufweisen. Ein Einsatz dieser Technologie kann daher

nur in geeigneten Regionen mit hoher Sonneneinstrahlung und ausreichend Platzangebot erfolgen. Darüber hinaus sollten auch die jahreszeitlichen Schwankungen der Sonneneinstrahlung nicht zu groß sein. Die Kosten für diese Technologie liegen nach dem derzeitigen Stand der Forschung relativ hoch. Es bleibt jedoch festzuhalten, dass sich die gekoppelte Dunkel- und Photofermenation noch in einem sehr frühen Entwicklungsstadium befindet und daher auch alle Aussagen über die möglichen Anlagen- und Betriebskosten nur auf bisherigen Forschungsergebnissen beruhen. Hier können sich also durchaus noch Änderungen der Kosten durch geänderte Betriebsbedingungen oder detailliertere Erkenntnisse über den Anlagenaufbau ergeben. Ähnliches gilt auch für die gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation, die bereits jetzt in der Variante mit on-site Reformierung des erzeugten Biogases wirtschaftlich gesehen mit den besten biomassebasierten Technologievarianten mithalten kann. Diese Technologien können daher für die Zukunft sehr vielversprechend sein.

Die alkalische Elektrolyse weist sowohl in der kleinen als auch in der großen Bauweise eine vergleichsweise sehr hohe Energieeffizienz auf. Die Kosten für diese Technologie sind jedoch nur in der großen Bauweise konkurrenzfähig zu den besten biomassebasierten Produktionsvarianten. Die kleine Elektrolyseanlage kann darüber hinaus nur etwas weniger als 20% des Wasserstoffbedarfs einer in dieser Studie betrachteten Tankstelle erzeugen. Soll jedoch eine sehr dezentrale Tankstelle mit wenigen zu versorgenden Fahrzeugen betrieben werden, so stellt diese Variante die beste Alternative dar. Bemerkenswert ist auch, dass der Unterschied in den Kosten zwischen dem Betrieb mit dem üblichen Strommix bzw. mit Ökostrom vergleichsweise sehr gering ist. Diese sofort verfügbare Variante der nachhaltigen Produktion von Wasserstoff durch Elektrolyse mit Ökostrom ist daher gerade für die Einführungsphase einer Wasserstoffgesellschaft sehr interessant.

Schließlich bleibt zu bemerken, dass die nachhaltigen Varianten der Wasserstoffproduktion erwartungsgemäß schlechte Ergebnisse im Vergleich zur Stand-der-Technik Technologie der Reformierung von Erdgas liefern. Das gilt sowohl für die Energieeffizienz, bei der die Erdgasreformierung aufgrund der besonders guten Ausnutzung des Rohstoffs allen anderen Technologien weit überlegen ist, als auch für die Kosten, die vergleichsweise sehr niedrig und nahe an den Kosten der derzeitigen fossilen Treibstoffe liegen. Es bleibt aber anzumerken, dass die Kosten mit aktuellen Gaspreisen ermittelt wurden. Bei steigenden Gaspreisen aufgrund von Versorgungsengpässen durch unsichere Liefersituationen oder sinkende Vorräte können die Kosten für die Erdgasreformierung aber, ebenso wie die Kosten der derzeitigen Fahrzeugtreibstoffe, sehr stark ansteigen.

Als Ausblick für nachfolgende Arbeiten ist es wünschenswert, die durchgeführten Analysen auf weitere Technologievarianten auszubauen. Als Beispiele für neu zu untersuchende Technologien seien hier die AER-(Adsorption Enhanced Reforming)-Vergasung (Marquard-Möllenstedt et al., 2004; Pfeifer et al., 2007), die ein Gas mit höherem Wasserstoffgehalt erzeugt als die gewählte Vergasungstechnologie und daher einen wesentlich geringeren Aufwand für die Gasaufbereitung erfordert, die solarthermische Wasserstofferzeugung (Baykara, 2004; Miri et al., 2007) sowie die Wasserstofferzeugung mittels thermochemischer Kreisläufe (Andress et al., 2009; Andress et al., 2010) genannt. Aber auch weitere Optimierungen der betrachteten Anlagenvarianten sind zu erwarten. Hier sollte besonders die Verbesserung des Energiebedarfs, etwa durch Wärmeintegration oder die Senkung des Bedarfs an Frischwasser in der Dunkelfermentation durch Rezirkulation von Prozesswasser, untersucht werden. Die im Zuge dieser Arbeit entwickelten Simulationsmodelle bilden eine gute Ausgangsbasis, um neue Varianten zu untersuchen. Aber auch hier besteht durchaus Erweiterungspotenzial sowohl hinsichtlich der Implementierung weiterer Modellparameter als auch hinsichtlich der Entwicklung von Modellen für neue Apparate. Darüber hinaus sollte besonders für die noch wenig entwickelten Technologien der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation sowie der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation in einiger Zeit eine neue Bewertung auf Basis der dann aktuellen Prozess- und Kostenparameter erfolgen.

Bezüglich der Rohstoffe sollte die Bandbreite auf weitere Abfallstoffe wie Lebensmittelproduktionsabfälle, Zwischenfrüchte aus einem nachhaltigen Fruchtwechselanbau oder letzlich auch auf die Verwertung von lignozellulosehaltigen Rohstoffen ausgedehnt werden. In Zusammenhang mit den Rohstoffen wäre auch eine kombinierte Analyse mit der Rohstoffsituation in verschiedenen Regionen wünschenswert. Diese gesamtheitliche Betrachtung könnte konkretere Aussagen über die geeignetste Kombination von Rohstoffen und Technologien an bestimmten Standorten und das Potenzial zur Wasserstoffproduktion aus verschiedenen Rohstoffen in verschiedenen Regionen liefern.

Im Zuge der vorliegenden Arbeit war es auch nicht möglich, eine Sensitivitätsanalyse von Prozess- und Kostenparametern durchzuführen. Diese Sensitivitätsrechnungen wären jedoch für eine detailliertere Beurteilung der Technologien und deren Haupteinflussfaktoren erforderlich. Das betrifft insbesondere auch die zu erwartende Kostensteigerung für die fossilen Treibstoffe, da diese Kosten einen wesentlichen Einfluss auf die Realisierungschancen der Wasserstofftechnologien haben. Weiters wäre eine Detailanalyse der einzelnen Kostenanteile für jede Technologievariante wünschenswert, um das Kostenreduktionspotenzial von Optimierungsmaßnahmen abschätzen zu können und damit wiederum Vorschläge für eine Prozessoptimierung entwickeln zu können.

Nicht zuletzt sollte für die Beurteilung der Nachhaltigkeit der Technologien eine Life Cycle Analysis durchgeführt werden. Solche Analysen wurden für einige der in dieser Arbeit betrachteten Technologien bereits durchgeführt (GM et al., 2002; Spath et al., 2004; Jungmeier, 2006; EUCAR et al., 2007; Friedl et al., 2008). Die gemeinsame Betrachtung der Produktions- sowie Energieeffizienz, der Wirtschaftlichkeit und der Ökobilanz von konkreten Technologievarianten ermöglicht jedoch erst eine vollständige Beurteilung der Potenziale.

9 Nomenklatur

Lateinische Buchstaben

H_i	Henrykonstante der Komponente i im Lösungsmittel	Pa
H_u	unterer Heizwert	kJ/kg
K_p	aus Partialdrücken gebildete Gleichgewichtskonstante	verschieden
M	Molmasse	kg/kmol
$\dot{m}$	Massenstrom	kg/s
Mtoe	Megatonnen Öleinheiten	Mt
P	Leistung	kW
p_{ges}	Gesamtdruck	Pa
p_i	Partialdruck	Pa
R_1, R_2	Restmolekül 1, Restmolekül 2	-
$\dot{V}$	Volumenstrom	m^3/s
x_i	Molenanteil der Komponente i in der Flüssigphase	-
y_i	Molenanteil der Komponente i in der Gasphase	-

Griechische Buchstaben

α	Wärmeübergangskoeffizient	$W/(m^2*K)$
υ	stöchiometrischer Koeffizient	-
ρ	Dichte	kg/m^3
Π	Produkt	-

Indizes

ab	Abgabe
ges	gesamt
i	Komponente i
u	unterer

10 Literaturverzeichnis

C. Aichernig; Fünf Jahre Betriebserfahrung beim Biomasse-Vergasungskraftwerk Güssing, Repotec, 2006.

I. Akkerman, M. Janssen, J. Rocha, R. H. Wijffels; Photobiological hydrogen production: photochemical efficiency and bioreactor design; International Journal of Hydrogen Energy, 2002, 27(11-12), 1195-1208.

M. Altmann, P. Schmidt, R. Wurster, M. Zerta, W. Zittel; Potential for Hydrogen as a Fuel for Transport in the Long Term (2020 - 2030), Full Backround Report, European Commission Joint Research Centre, 2004.

T. Amon, B. Amon, V. Kryvoruchko, A. Machmüller, K. Hopfner-Sixt, V. Bodiroza, R. Hrbek, J. Friedel, E. Pötsch, H. Wagentristl, M. Schreiner, W. Zollitsch; Methane production through anaerobic digestion of various energy crops grown in sustainable crop rotations; Bioresource Technology, 2007, 98(17), 3204-3212.

W. A. Amos; Updated Cost Analysis of Photobiological Hydrogen Production from Chlamydomonas reinhardtii Green Algae, NREL, NREL/MP-560-35593, 2004.

R. J. Andress, X. Huang, B. W. Bequette, L. L. Martin; A systematic methodology for the evaluation of alternative thermochemical cycles for hydrogen production; International Journal of Hydrogen Energy, 2009, 34(9), 4146-4154.

R. J. Andress, L. L. Martin; On the synthesis of hydrogen producing alternative thermochemical cycles with electrochemical steps; International Journal of Hydrogen Energy, 2010, 35(3), 958-965.

M. J. Antal, S. G. Allen, D. Schulman, X. Xu, R. J. Divilio; Biomass Gasification in Supercritical Water; Industrial & Engineering Chemistry Research, 2000, 39(11), 4040-4053.

G. Antonopoulou, H. N. Gavala, I. V. Skiadas, K. Angelopoulos, G. Lyberatos; Biofuels generation from sweet sorghum: Fermentative hydrogen production and anaerobic digestion of the remaining biomass; Bioresource Technology, 2008, 99(1), 110-119.

J. N. Armor; The multiple roles for catalysis in the production of H2; Applied Catalysis A: General, 1999, 176(2), 159-176.

S. Badwal, S. Giddey, F. Ciacchi; Hydrogen and oxygen generation with polymer electrolyte membrane (PEM)-based electrolytic technology; Ionics, 2006, 12(1), 7-14.

M. J. Barbosa, J. M. S. Rocha, J. Tramper, R. H. Wijffels; Acetate as a carbon source for hydrogen production by photosynthetic bacteria; Journal of Biotechnology, 2001, 85(1), 25-33.

S. Z. Baykara; Hydrogen production by direct solar thermal decomposition of water, possibilities for improvement of process efficiency; International Journal of Hydrogen Energy, 2004, 29(14), 1451-1458.

T. Blades, M. Rudloff, O. Schulze; Sustainable SunFuel from CHOREN´s Carbo-V® Process; in ISAF XV. San Diego, 2005.

BMWA; BGBl. II Nr. 401, Verordnung: Ökostromverordnung 2006, Österreich, 2006.

H. Boerrigter, S. Van Paasen, P. Bergman, J. Könemann, R. Emmen, A. Wijnands; "OLGA" Tar removal Technology, Proof-of-Concept (PoC) for application in integrated biomass gasification combined heat and power (CHP) systems, Energy research Centre of the Netherlands (ECN), ECN Biomas, ECN-C--05-009, 2005.

N. Boukis, N. Dahmen, E. Dinjus, K. Scheffer; Wasserstofferzeugung aus Biomasse - Wasserspaltung mit organischen Verbindungen; in Jahrestagung des ForschungsVerbunds Sonnenenergie, Wasserstoff und Brennstoffzellen - Energieforschung im Verbund, Berlin, 2004.

P. Broadhurst, P. Abbott; Improving hydrogen plant performance: Part II; PTQ, 2002, Q4, 137-145.

A. Burke, M. Gardiner; Hydrogen Storage Options: Technologies and Comparisons for Light-Duty Vehicle Applications, Institute of Transportation Studies, University of California, Davis, UCD-ITS-RR-05-01, 2005.

A. M. Buswell, H. F. Mueller; Mechanism of Methane Fermentation; Industrial & Engineering Chemistry, 1952, 44(3), 550-552.

California Department of Food and Agriculture; Specifications for Hydrogen used in Internal Combustion Engines and Fuel Cells; in California Code of Regulations, Title 4, Division 9, Chapter 6, Article 8, U.S.A, 2008.

J. Chaffin, S. Bobbio, H. Inyang, L. Kaanagbara; Hydrogen Production by Plasma Electrolysis; Journal of Energy Engineering, 2006, 132(3), 104-108.

C.-Y. Chen, W.-B. Lu, C.-H. Liu, J.-S. Chang; Improved phototrophic H2 production with Rhodopseudomonas palustris WP3-5 using acetate and butyrate as dual carbon substrates; Bioresource Technology, 2008a, 99(9), 3609-3616.

L. Chen, Q. Hong, J. Lin, F. M. Dautzenberg; Hydrogen production by coupled catalytic partial oxidation and steam methane reforming at elevated pressure and temperature; Journal of Power Sources, 2007, 164(2), 803-808.

S.-D. Chen, K.-S. Lee, Y.-C. Lo, W.-M. Chen, J.-F. Wu, C.-Y. Lin, J.-S. Chang; Batch and continuous biohydrogen production from starch hydrolysate by Clostridium species; International Journal of Hydrogen Energy, 2008b, 33(7), 1803-1812.

G. Chiappetta, G. Clarizia, E. Drioli; Design of an integrated membrane system for a high level hydrogen purification; Chemical Engineering Journal, 2006, 124(1-3), 29-40.

V. R. Choudhary, K. C. Mondal, T. V. Choudhary; Oxy-methane reforming over high temperature stable NiCoMgCeOx and NiCoMgOx supported on zirconia-haffnia catalysts: Accelerated sulfur deactivation and regeneration; Catalysis Communications, 2007, 8(3), 561-564.

C.-F. Chu, Y.-Y. Li, K.-Q. Xu, Y. Ebie, Y. Inamori, H.-N. Kong; A pH- and temperature-phased two-stage process for hydrogen and methane production from food waste; International Journal of Hydrogen Energy, 2008, 33(18), 4739-4746.

P. Claassen, M. Budde, F. van der Wal, Z. Kadar, G. van Noorden, T. de Vrije; Biological Hydrogen Production from Biomass by Thermophilic Bacteria; in 12th European Conference on Biomass for Energy, Industry and Climate Protection, Amsterdam, 2002.

P. Claassen, M. Budde, E. van Niel, T. de Vrije; Utilization of biomass for hydrogen fermentation; in Biofuels for fuel cells: Renewable energy from biomass fermentation, IWA Publishing, London, 221-230, 2005.

P. Claassen, M. Budde, G. van Noorden, S. Hoekema, J. Hazewinkel, J. van Groenestijn, T. de Vrije; Biological Hydrogen Production from Agro-Food By-Products; in Total Food Conference, Norwich, 2004.

P. A. M. Claassen, T. de Vrije; Non-thermal production of pure hydrogen from biomass: HYVOLUTION; International Journal of Hydrogen Energy, 2006, 31(11), 1416-1423.

M. Claußen; Voraussetzungen für die Konversion von Biogas zu einem flüssigen Kohlenwasserstoff; in Gülzower Fachgespräch: Workshop "Aufbereitung von Biogas" 17./18. Juni 2003, FAL Braunschweig, Fachagentur Nachwachsende Rohstoffe e.V., Gülzow, 93-117, 2003.

J. Contadini, C. Diniz, D. Sperling, R. Moore; Hydrogen production plants: emissions and thermal efficiency analysis; in Second International Symposium on Technological and Environmental Topics in Transports, Milan, 2000.

P. Corbo, F. Migliardini; Hydrogen production by catalytic partial oxidation of methane and propane on Ni and Pt catalysts; International Journal of Hydrogen Energy, 2007, 32(1), 55-66.

P. D'Jesús, N. Boukis, B. Kraushaar-Czarnetzki, E. Dinjus; Gasification of corn and clover grass in supercritical water; Fuel, 2006, 85(7-8), 1032-1038.

D. Dalle Nogare, P. Baggio, C. Tomasi, L. Mutri, P. Canu; A thermodynamic analysis of natural gas reforming processes for fuel cell application; Chemical Engineering Science, 2007, 62(18-20), 5418-5424.

R. F. de Souza, J. C. Padilha, R. S. Gonçalves, M. O. de Souza, J. Rault-Berthelot; Electrochemical hydrogen production from water electrolysis using ionic liquid as electrolytes: Towards the best device; Journal of Power Sources, 2007, 164(2), 792-798.

T. de Vrije, G. G. de Haas, G. B. Tan, E. R. P. Keijsers, P. A. M. Claassen; Pretreatment of Miscanthus for hydrogen production by Thermotoga elfii; International Journal of Hydrogen Energy, 2002, 27(11-12), 1381-1390.

A. Demirbas; Hydrogen-rich gas from fruit shells via supercritical water extraction; International Journal of Hydrogen Energy, 2004, 29(12), 1237-1243.

A. L. Dicks; Hydrogen generation from natural gas for the fuel cell systems of tomorrow; Journal of Power Sources, 1996, 61(1-2), 113-124.

T. Dreier, U. Wagner; Perspektiven einer Wasserstoff-Energiewirtschaft Teil 1: Techniken und Systeme zur Wasserstofferzeugung; BWK, 2000, 52(12), 41-46.

M. Dresselhaus, G. Crabtree, M. Buchanan; Basic Research Needs for the Hydrogen Economy, Argonne National Laboratory, U.S. Department of Energy Office of Science Laboratory, 2004.

DWV; H2-Roadmap, AP1 "Prinzipielle Anforderungen an die Infrastruktur", DWV Deutscher Wasserstoff Verband e.V., Berlin, 2003.

Energie-Control; Verordnung der Energie-Control Kommission, mit der die Tarife für die Systemnutzung in der Gaswirtschaft bestimmt werden (Gas-Systemnutzungstarife-Verordnung 2008); in GSNT-VO 2008, Österreich, 2008.

EUCAR, CONCAWE, JRC; Well-to-Wheels Analysis of Future Automotive Fuels and Powertrains in the European Context, Version 2c, Joint Research Centre, European Commission, 2007.

European Commission; Directive 2003/30/EC on the promotion of the use of biofuels or other renewable fuels for transport. OJ L 123, European Commission, Brussels, 2003a.

European Commission; Hydrogen Energy and Fuel Cells - A visison of our future, European Commission, 2003b.

European Commission; Biofuels Progress Report - Report on the progress made in the use of biofuels and other renewable fuels in the Member States of the European Union, Commission of the European Communities, 2006.

European Commission; EU energy policy data, Commission of the European Communities, 2007.

European Hydrogen Fuel Cell Technology Platform; Implementation Plan - Status 2006, European Hydrogen Fuel Cell Technology Platform, 2007.

H. H. P. Fang, H. Liu, T. Zhang; Phototrophic hydrogen production from acetate and butyrate in wastewater; International Journal of Hydrogen Energy, 2005, 30(7), 785-793.

R. Forkmann, J. Hensel; Untersuchungen zur mikrobiologischen Entschwefelung von brennbaren Gasen mit hohen H2S-Gehalten in Tropfkörperanlagen; in VDI-Berichte: Biologische Abgasreinigung - Gase, Gerüche, Keime, VDI-Verlag, Düsseldorf, 2003.

A. Friedl, A. Miltner, W. Schnitzhofer, W. Ahrer, K. Pollak; Nachhaltige Wasserstoffproduktion in Österreich, Endbericht, Projekt im Rahmen der Förderung "A3 - Automotive Forschung in Österreich und Europa", Bundesministerium für Verkehr, Innovation und Technologie, 2008.

J. Gabrielsen, M. L. Michelsen, E. H. Stenby, G. M. Kontogeorgis; A Model for Estimating CO2 Solubility in Aqueous Alkanolamines; Industrial & Engineering Chemistry, 2005, 44(9), 3348-3354.

P. Giunta, N. Amadeo, M. Laborde; Simulation of a low temperature water gas shift reactor using the heterogeneous model/application to a pem fuel cell; Journal of Power Sources, 2006, 156(2), 489-496.

GM, LBST, bp, ExxonMobil, Shell, TotalFinaElf; GM Well-to-Wheel Analysis of energy use and greenhouse gas emissions of advanced fuel/vehicle systems - A European study, Annex "Full Background Report", L-B-Systemtechnik GmbH, 2002.

S. A. Grigoriev, V. I. Porembsky, V. N. Fateev; Pure hydrogen production by PEM electrolysis for hydrogen energy; International Journal of Hydrogen Energy, 2006, 31(2), 171-175.

A. Gronauer, E. Albrecht, V. Aschmann, M. Effenberger, e. al.; Biogashandbuch Bayern, Bayerisches Staatsministerium für Umwelt, Gesundheit und Verbraucherschutz, München, 2004.

M. H. Halabi, M. H. J. M. de Croon, J. van der Schaaf, P. D. Cobden, J. C. Schouten; Modeling and analysis of autothermal reforming of methane to hydrogen in a fixed bed reformer; Chemical Engineering Journal, 2008, 137(3), 568-578.

A. Hansen; Small-scale Reformers for Stationary Hydrogen Production with Minimum CO_2-emissions, Report from Subtask C, IEA-HIA Task 16, IEA, 2005.

M. Harasek, A. Makaruk, M. Miltner, R. Schlager; Process dynamics of a biogas upgrading system - Simulation and experimental practice; in AIChE Annual Meeting, Salt Lake City, 2007.

H. Hartmann, T. Böhm, L. Maier; Naturbelassene biogene Festbrennstoffe - umweltrelevante Eigenschaften und Einflussmöglichkeiten, Bayerisches Landesamt für Umweltschutz, Augsburg, im Auftrag des Bayerischen Staatsministeriums für Landesentwicklung und Umweltfragen, München, 2000.

J. Haslbeck, M. Rutkowski, T. Buchanan, H. Goldstein, M. Klett, R. Schoff, J. White; Evaluation of Fossil Fuel Power Plants with CO_2 Recovery, U.S. Department of Energy, 2002.

M. Hellmayr; Agrarischer Paritätsspiegel, LBG Wirtschftstreuhand- und Beratungsgesellschaft m.b.H, Wien, 2007.

K. Hemmes, A. de Groot, H. den Uil; BIO-H_2 Application potential of biomass related hydrogen production technologies to the Dutch energy infrastructure of 2020-2050, Energieonderzoek Centrum Nederland (ECN), ECN-C--03-028, 2003.

D. L. Hoang, S. H. Chan; Modeling of a catalytic autothermal methane reformer for fuel cell applications; Applied Catalysis A: General, 2004, 268(1-2), 207-216.

D. L. Hoang, S. H. Chan, O. L. Ding; Hydrogen production for fuel cells by autothermal reforming of methane over sulfide nickel catalyst on a gamma alumina support; Journal of Power Sources, 2006, 159(2), 1248-1257.

S. Hoekema, M. Bijmans, M. Janssen, J. Tramper, R. H. Wijffels; A pneumatically agitated flat-panel photobioreactor with gas re-circulation: anaerobic photoheterotrophic cultivation of a purple non-sulfur bacterium; International Journal of Hydrogen Energy, 2002, 27(11-12), 1331-1338.

H. Hofbauer; CFB - Steam Gasification; in 14th European Conference on Biomass for Energy, Industry and Climate Protection, Paris, 2005a.

H. Hofbauer; Vergasung - ein Baustein zur Realisierung von Polygeneration; in Symposium Polygeneration 2005, Güssing, 2005b.

H. Hofbauer, R. Rauch, S. Fürnsinn, C. Aichernig; Energiezentrale Güssing; Berichte aus Energie- und Umweltforschung, 79/2006, Bundesministerium für Verkehr, Innovation und Technologie, 2006.

H. Hofbauer, R. Rauch, G. Loeffler, S. Kaiser, E. Fercher, H. Tremmel; Six Years Experience with the FICFB-Gasification Process; in 12th European Conference on Biomass for Energy, Industry and Climate Protection, Amsterdam, 2002.

D. Hornbachner, G. Hutter, D. Moor; Biogas-Netzeinspeisung; Berichte aus Energie- und Umweltforschung, 19/2005, Bundesministerium für Verkehr, Innovation und Technologie, 2005.

K. Hou, R. Hughes; The kinetics of methane steam reforming over a Ni/[alpha]-Al2O catalyst; Chemical Engineering Journal, 2001, 82(1-3), 311-328.

Institut für Energetik und Umwelt, Bundesforschungsanstalt für Landwirtschaft, Kuratorium für Technik und Bauwesen in der Landwirtschaft; Handreichung: Biogasgewinnung und -nutzung, Fachagentur für Nachwachsende Rohstoffe e.V., 2006.

ISO; Basic considerations for the safety of hydrogen systems, ISO, 2001.

J. Ivy; Summary of Electrolytic Hydrogen Production - Milestone Completion Report, National Renewable Energy Laboratory, U.S. Department of Energy, 2004.

G. Jungmeier; Wasserstoff aus erneuerbarer Energie in Österreich - Ein Energieträger der Zukunft?; Berichte aus Energie- und Umweltforschung, 40/2006, Bundesministerium für Verkehr, Innovation und Technologie, 2006.

Z. Kádár, T. De Vrije, M. Budde, Z. Szengyel, K. Réczey, P. Claassen; Hydrogen production from paper sludge hydrolysate; Applied Biochemistry and Biotechnology, 2003, 107(1), 557-566.

R. K. Kaila, A. O. I. Krause; Autothermal reforming of simulated gasoline and diesel fuels; International Journal of Hydrogen Energy, 2006, 31(13), 1934-1941.

I. K. Kapdan, F. Kargi; Bio-hydrogen production from waste materials; Enzyme and Microbial Technology, 2006, 38(5), 569-582.

K. Khorsand, M. A. Marvast, N. Pooladian, M. Kakavand; MODELING AND SIMULATION OF METHANATION CATALYTIC REACTOR IN AMMONIA UNIT; Petroleum Coal, 2007, 49(1), 46-53.

P. Kolbitsch, C. Pfeifer, H. Hofbauer; Catalytic steam reforming of model biogas; Fuel, 2008, 87(6), 701-706.

G. Kyazze, R. Dinsdale, A. J. Guwy, F. R. Hawkes, G. C. Premier, D. L. Hawkes; Performance characteristics of a two-stage dark fermentative system producing hydrogen and methane continuously; Biotechnology and Bioengineering, 2007, 97(4), 759-770.

N. Laosiripojana, W. Sangtongkitcharoen, S. Assabumrungrat; Catalytic steam reforming of ethane and propane over CeO2-doped Ni/Al2O3 at SOFC temperature: Improvement of resistance toward carbon formation by the redox property of doping CeO2; Fuel, 2006, 85(3), 323-332.

D. B. Levin, L. Pitt, M. Love; Biohydrogen production: prospects and limitations to practical application; International Journal of Hydrogen Energy, 2004, 29(2), 173-185.

D. R. Lide; CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition, ed. D. R. Lide. Boca Raton, FL, USA: CRC Press, 2005/2006.

D. Liu, D. Liu, R. J. Zeng, I. Angelidaki; Hydrogen and methane production from household solid waste in the two-stage fermentation process; Water Research, 2006, 40(11), 2230-2236.

M. Ljunggren, G. Zacchi; Techno-economic evaluation of a two-step biological process for hydrogen production; Biotechnology Progress, 2010, 26(2), 496-504.

F. Löffler; Staubabscheiden. Stuttgart: Georg Thieme Verlag, 1988.

A. Makaruk, M. Miltner, M. Harasek; Membrane biogas upgrading processes for the production of natural gas substitute; Separation and Purification Technology, 2010, In Press, doi:10.1016/j.seppur.2010.05.010.

C. Mansilla, J. Sigurvinsson, A. Bontemps, A. Maréchal, F. Werkoff; Heat management for hydrogen production by high temperature steam electrolysis; Energy, 2007, 32(4), 423-430.

M. P. Marceta Kaninski, D. L. Stojic, Đ. P. Saponjic, N. I. Potkonjak, S. S. Miljanic; Comparison of different electrode materials-Energy requirements in the electrolytic hydrogen evolution process; Journal of Power Sources, 2006, 157(2), 758-764.

T. Marquard-Möllenstedt, P. Sichler, M. Specht, M. Michel, R. Berger, K. Hein, E. Höftberger, R. Rauch, H. Hofbauer; Wasserstoffherstellung durch absorptionsunterstütz-

te Wasserdampf-Vergasung von Biomasse; in DGMK-Fachbereichstagung "Energetische Nutzung von Biomassen, Velen/Westfalen, 2004.

A. Marshall, B. Børresen, G. Hagen, M. Tsypkin, R. Tunold; Hydrogen production by advanced proton exchange membrane (PEM) water electrolysers--Reduced energy consumption by improved electrocatalysis; Energy, 2007, 32(4), 431-436.

R. J. Marty, D. I. Demeyer; The effect of inhibitors of methane production of fermentation pattern and stoichiometry in vitro using rumen contents from sheep given molasses; British Journal of Nutrition, 1973, 30(02), 369-376.

M. Miltner; Persönliche Mitteilung aus dem FFG-Projekt "Biogasaufbereitung und Netzeinbindung", Projekt Nr. 812.199; TU Wien, 2010.

M. Miltner, A. Makaruk, M. Harasek; Application of gas permeation for biogas upgrade - Operational experiences of feeding biomethane into the Austrian gas grid; in 16th European Conference on Biomass for Energy, Industry and Climate Protection, Valencia, 2008a.

M. Miltner, A. Makaruk, M. Harasek; Biogasaufbereitung und Netzeinspeisung; Technik in Bayern, 2008b, 1, 43.

R. Miri, S. Mraoui; Electrolyte process of hydrogen production by solar energy; Desalination, 2007, 206(1-3), 69-77.

O. Mizuno, R. Dinsdale, F. R. Hawkes, D. L. Hawkes, T. Noike; Enhancement of hydrogen production from glucose by nitrogen gas sparging; Bioresource Technology, 2000, 73(1), 59-65.

M. Modigell, M. Schumacher, F. Beggel, J. Guichard, S.-E. Sequeira, V. M. Teplyakov, V. B. Zenkevitch; Evaluation of different gas upgrading technologies in biohydrogen production processes; in PRES 2008, enthalten in "CD-ROM of Full Texts of CHISA 2008", Praha, 2008.

K. Murata, M. Saito, M. Inaba, I. Takahara; Hydrogen production by autothermal reforming of sulfur-containing hydrocarbons over re-modified Ni/Sr/ZrO2 catalysts; Applied Catalysis B: Environmental, 2007, 70(1-4), 509-514.

P. Neumann, F. von Linde; Options for economical supply of hydrogen; MPT International, 2003, 2, 72-75.

J. Nitzsche, H. Krause, S. Thieme, F. Deichsel; Dampfreformierung von Biogas für die Anwendung in PEM-Brennstoffzellen; in enertec Internationale Fachmesse für Energie. Leipzig, 2007.

T. Nussbaumer; Abgasreinigung und -kondensation; in Energie aus Biomasse - Grundlagen, Techniken und Verfahren, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 2001.

OECD/IEA; Prospects for Hydrogen and Fuel Cells, International Energy Agency (IEA), 2005.

ÖVGW; Erdgas in Österreich - Gasbeschaffenheit; in ÖVGW G31, Österreich, 2001.

ÖVGW; Regenerative Gase - Biogas; in ÖVGW G33, Österreich, 2006.

E. Özgür, N. Afsar, T. de Vrije, M. Yücel, U. Gündüz, P. A. M. Claassen, I. Eroglu; Potential use of thermophilic dark fermentation effluents in photofermentative hydrogen production by Rhodobacter capsulatus; Journal of Cleaner Production, 2010, In Press, doi:10.1016/j.jclepro.2010.02.020.

J. Pasel, R. C. Samsun, D. Schmitt, R. Peters, D. Stolten; Test of a water-gas-shift reactor on a 3 kWe-scale--design points for high- and low-temperature shift reaction; Journal of Power Sources, 2005, 152, 189-195.

M. Persson, O. Jönsson, A. Wellinger; Biogas upgrading to Vehicle Fuel Standards and Grid Injection, IEA Bioenergy, 2006.

E. Perz; A Computer Method for Thermal Power Cycle Calculation; Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 1991, 113(2), 184-189.

E. W. Perz, S. Bergmann; A simulation environment for the techno-economic performance prediction of water and power cogeneration systems using renewable and fossil energy sources; Desalination, 2007, 203(1-3), 337-345.

C. Pfeifer, B. Puchner, H. Hofbauer; In-Situ CO2-Absorption in a Dual Fluidized Bed Biomass Steam Gasifier to Produce a Hydrogen Rich Syngas; International Journal of Chemical Reactor Engineering, 2007, 5(A9).

C. Pfeifer, R. Rauch, H. Hofbauer; In-Bed Catalytic Tar Reduction in a Dual Fluidized Bed Biomass Steam Gasifier; Industrial & Engineering Chemistry Research, 2004, 43(7), 1634-1640.

B. E. Poling, J. M. Prausnitz, J. P. O´Connell; The Properties of Gases and Liquids, 5th Edition: McGraw-Hill, 2001.

M. Prechtl, M. Hannesschläger; Polygeneration - Implementierung einer Bioethanolanlage in das energetische Gesamtkonzept in Bruck/Leitha: Teil A - Datensammlung der bestehenden Anlagen zur Erzeugung von Energie aus erneuerbaren Energieformen, Energie Park Bruck an der Leitha, 2004.

S. Prechtl, R. Schneider, T. Anzer, M. Faulstich; Mikrobiologische Entschwefelung von Biogas; in Gülzower Fachgespräch: Workshop "Aufbereitung von Biogas" 17./18. Juni 2003, FAL Braunschweig, Fachagentur Nachwachsende Rohstoffe e.V., Gülzow, 169-183, 2003.

T. Pröll, H. Hofbauer; Development and Application of a Simulation Tool for Biomass Gasification Based Processes; International Journal of Chemical Reactor Engineering, 2008, 6(A89).

T. Pröll, R. Rauch, C. Aichernig, H. Hofbauer; Fluidized bed steam gasification of solid biomass – Analysis and optimization of plant operation using process simulation; in 18th International Conference on Fluidized Bed Combustion, Toronto, 2005a.

T. Pröll, R. Rauch, C. Aichernig, H. Hofbauer; Fluidized bed steam gasification of solid biomass – Performance characteristics of an 8 MWth combined heat and power plant; International Journal of Chemical Reactor Engineering, 2007a, 5(A54).

T. Pröll, R. Rauch, C. Aichernig, H. Hofbauer; Performance characteristics of an 8 MWth combined heat and power plant based on dual fluidized bed steam gasification of solid biomass; in 12th International Conference on Fluidization – New Horizons in Fluidization Engineering, Vancouver, 2007b.

T. Pröll, I. G. Siefert, A. Friedl, H. Hofbauer; Removal of NH3 from Biomass Gasification Producer Gas by Water Condensing in an Organic Solvent Scrubber; Industrial & Engineering Chemistry Research, 2005b, 44(5), 1576-1584.

G. Pulletz, W. Böhme; Wasserstoff in der Mobilität, Präsentiert bei "Energiegespräche", Austrian Energy Agency, 30.09.2003, 2003.

M. Ragwitz, M. Wietschel, U. Hasenauer, O. Fakolade; Introduction of alternative transport fuels in the European energy market: Techno-economic barriers and perspectives, Work package D: Hydrogen, Fraunhofer Institut Systemtechnik und Innovationsforschung, 2003.

A. B. Rao, E. S. Rubin; A Technical, Economic, and Environmental Assessment of Amine-Based CO2 Capture Technology for Power Plant Greenhouse Gas Control; Environmen. Sci. Technol., 2002, 36(20), 4467-4475.

R. Rauch; Indirectly heated gasifiers - the case of the Guessing reactor; in 1st European Summer School on Renewable Motor Fuels. Birkenfeld, Deutschland, 2005.

R. Rauch, H. Hofbauer, K. Bosch, I. Siefert, C. Aichernig, H. Tremmel, K. Voigtlaender, R. Koch, R. Lehner; Steam Gasification of Biomass at CHP Plant Guessing - Status of the Demonstration Plant; in 2nd World Conference on Biomass for Energy, Industry and Climate Protection, Rom, 2004.

R. Rautenbach; Membranverfahren : Grundlagen der Modul- und Anlagenauslegung. Chemische Technik/Verfahrenstechnik. Berlin; New York: Springer, 1997.

J. Rechberger, P. Prenninger; Zukünftige Antriebssysteme und deren Potentiale bis 2050; in Präsentation zum Projekt ALTANKRA, 15.01.2008, 2008.

K. Reisinger; Energetische Verwertungsmöglichkeiten von biogenen Reststoffen verschiedener Industriebranchen sowie aus kommunalen Sammelsystemen; Dissertation, Technisch-naturwissenschaftliche Fakultät, Technische Universität Wien, 1997.

N. Ren, J. Li, B. Li, Y. Wang, S. Liu; Biohydrogen production from molasses by anaerobic fermentation with a pilot-scale bioreactor system; International Journal of Hydrogen Energy, 2006, 31(15), 2147-2157.

K. Ripfel-Nitsche, H. Hofbauer, R. Rauch, M. Goritschnig, R. Koch, R. Lehner, M. Koch, A. Kiennemann, S. Oleksiak; BTL - Biomass to Liquid (Fischer Tropsch Process at the Biomass Basifier in Güssing); in 15th European Biomass Conference & Exhibition, Berlin, 2007.

M. Rudloff; 30 MW Carbo-V® Biomass Gasifier for Municipal CHP; in 14th European Conference on Biomass for Energy, Industry and Climate Protection, Paris, 2005.

B. Sakintuna, F. Lamari-Darkrim, M. Hirscher; Metal hydride materials for solid hydrogen storage: A review; International Journal of Hydrogen Energy, 2007, 32(9), 1121-1140.

R. Schmersahl, J. Mumme, V. Scholz; Farm-Based Biogas Production, Processing, and Use in Polymer Electrolyte Membrane (PEM) Fuel Cells; Industrial & Engineering Chemistry Research, 2007, 46(26), 8946-8950.

A. Schmidt, A. Zschetzsche, W. Hantsch-Linhart; Analysen von biogenen Brennstoffen, TU Wien, Institut für Verfahrenstechnik, Brennstofftechnik und Umwelttechnik im Auftrag des Bundesministeriums für Wissenschaft und Forschung, 1993.

M. Seemann, S. Biollaz, C. Aichernig, R. Rauch, H. Hofbauer, R. Koch; Methanation of bio-syngas in a bench scale reactor using a slip stream of the FICFB gasifier in Güssing; in 2nd World Conference on Biomass for Energy, Industry and Climate Protection, Rom, 2004.

M. Seemann, S. Biollaz, S. Stucki, M. Schaub, C. Aichernig, R. Rauch, H. Hofbauer, R. Koch; Methanation of BioSyngas and Simultaneous Low-Temperature Reforming: Fist Results of Long Duration Tests at the FICFB Gasifier in Güssing; in 14th European Biomass Conference, Paris, 2005.

M. C. Seemann, T. J. Schildhauer, S. M. A. Biollaz, S. Stucki, A. Wokaun; The regenerative effect of catalyst fluidization under methanation conditions; Applied Catalysis A: General, 2006, 313(1), 14-21.

Y. Shin, W. Park, J. Chang, J. Park; Evaluation of the high temperature electrolysis of steam to produce hydrogen; International Journal of Hydrogen Energy, 2007, 32(10-11), 1486-1491.

A. Siddle, K. Pointon, R. Judd, S. Jones; Fuel processing for fuel cells - a status review and assessment of prospects, Advantica Ltd., 2003.

D. Simbeck, E. Chang; Hydrogen Supply: Cost Estimate for Hydrogen Pathways - Scoping Analysis, National Renewable Energy Laboratory, U.S. Department of Energy, NREL/SR-540-32525, 2002.

SimTech; IPSEpro Advanced Power Plant Library (APP_Lib), Dokumentation zur Software, 2003a.

SimTech; IPSEpro Model Development Kit (MDK), Dokumentation zur Software, 2003b.

SimTech; IPSEpro Process Simulation Environment (PSE), Dokumentation zur Software, 2003c.

SimTech; IPSEpro PSEconomy, Dokumentation zur Software, 2005.

R. Solmaz, G. Kardas; Hydrogen evolution and corrosion performance of NiZn coatings; Energy Conversion and Management, 2007, 48(2), 583-591.

P. L. Spath, M. K. Mann; Life Cycle Assessment of Renewable Hydrogen Production via Wind/Electrolysis - Milestone Completion Report, National Renewable Energy Laboratory, U.S. Department of Energy, 2004.

Strategiekreis Wasserstoff; Strategiepapier zum Forschungsbedarf in der Wasserstoff-Energietechnologie, Strategiekreis Wasserstoff des Bundesministeriums für Wirtschaft und Arbeit, München, 2005.

K. Suksankraisorn, S. Patumsawad, B. Fungtammasan; Combustion studies of high moisture content waste in a fluidised bed; Waste Management, 2003, 23(5), 433-439.

T. Take, K. Tsurutani, M. Umeda; Hydrogen production by methanol-water solution electrolysis; Journal of Power Sources, 2007, 164(1), 9-16.

Y. Tao, Y. Chen, Y. Wu, Y. He, Z. Zhou; High hydrogen yield from a two-step process of dark- and photo-fermentation of sucrose; International Journal of Hydrogen Energy, 2007, 32(2), 200-206.

K. A. Thyo, H. Wenzel; Life Cycle Assessment of Biogas from Maize silage and from Manure, Xergi A/S, 2007.

F. A. Tobiesen, H. F. Svendsen, T. Mejdell; Modeling of Blast Furnace CO2 Capture Using Amine Absorbents; Industrial & Engineering Chemistry Research, 2007, 46(23), 7811-7819.

A. A. Tsygankov, A. S. Fedorov, T. V. Laurinavichene, I. N. Gogotov, K. K. Rao, D. O. Hall; Actual and potential rates of hydrogen photoproduction by continuous culture of the purple non-sulphur bacterium Rhodobacter capsulatus; Applied Microbiology and Biotechnology, 1998, 49(1), 102-107.

E. W. J. van Niel, P. A. M. Claassen, A. J. M. Stams; Substrate and product inhibition of hydrogen production by the extreme thermophile, Caldicellulosiruptor saccharolyticus; Biotechnology and Bioengineering, 2003, 81(3), 255-262.

A. Vogel, M. Bolhar-Nordenkampf, M. Kaltschmitt, H. Hofbauer, R. Berger, A. Kather, M. Kübel, B. Staiger, L. Wiese; Analyse und Evaluierung der thermo-chemischen Vergasung von Biomasse. Nachwachsende Rohstoffe, Band 29: Fachagentur Nachwachsende Rohstoffe e.V., 2006.

C. Voss; Applications of Pressure Swing Adsorption Technology; Adsorption, 2005, 11, 527-529.

A. Vrachnos, G. Kontogeorgis, E. Voutsas; Thermodynamic Modeling of Acidic Gas Solubility in Aqueous Solutions of MEA, MDEA and MEA-MDEA Blends; Industrial & Engineering Chemistry, 2006, 45(14), 5148-5154.

Z. D. Wei, M. B. Ji, S. G. Chen, Y. Liu, C. X. Sun, G. Z. Yin, P. K. Shen, S. H. Chan; Water electrolysis on carbon electrodes enhanced by surfactant; Electrochimica Acta, 2007, 52(9), 3323-3329.

P. Weiland; Notwendigkeit der Biogasaufbereitung, Ansprüche einzelner Nutzungsrouten und Stand der Technik; in Gülzower Fachgespräch: Workshop "Aufbereitung von Biogas" 17./18. Juni 2003, FAL Braunschweig, Fachagentur Nachwachsende Rohstoffe e.V., Gülzow, 7-23, 2003.

K. Willquist, P. A. M. Claassen, E. W. J. van Niel; Evaluation of the influence of CO2 on hydrogen production by Caldicellulosiruptor saccharolyticus; International Journal of Hydrogen Energy, 2009, 34(11), 4718-4726.

R. Winter; Biokraftstoffe im Verkehrssektor 2009, Umweltbundesamt und Bundesministerium für Land- und Forstwirtschaft, Umwelt und Wasserwirtschaft, 2009.

B. Wolf; Wasserstoff aus Biomasse; BWK, 2002, 54(12), 57-63.

B. Xie, J. Cheng, J. Zhou, W. Song, J. Liu, K. Cen; Production of hydrogen and methane from potatoes by two-phase anaerobic fermentation; Bioresource Technology, 2008, 99(13), 5942-5946.

J. Xu, G. F. Froment; Methane steam reforming, methanation and water-gas shift: I. Intrinsic kinetics; AIChE Journal, 1989, 35(1), 88-96.

X. Yu, S. Zhang, L. Wang, Q. Jiang, S. Li, Z. Tao; Hydrogen production from steam reforming of kerosene over Ni-La and Ni-La-K/cordierite catalysts; Fuel, 2006, 85(12-13), 1708-1713.

M. Zanfir, A. Gavriilidis; Catalytic combustion assisted methane steam reforming in a catalytic plate reactor; Chemical Engineering Science, 2003, 58(17), 3947-3960.

H. Zhu, A. Stadnyk, M. Béland, P. Seto; Co-production of hydrogen and methane from potato waste using a two-stage anaerobic digestion process; Bioresource Technology, 2008, 99(11), 5078-5084.

11 Anhang

11.1 Verwendete *Connections* für die entwickelten Modelle innerhalb der *BG_Lib*

In der verwendeten Bibliothek *BG_Lib* gibt es *Connection*-Modelle für reine Wasser- bzw. Dampfströme, Gasmischungen, organische Substanzen sowie inorganische Feststoffe, wie der Veröffentlichung von Pröll et al. entnommen werden kann (Pröll et al., 2008). Die innerhalb dieser Bibliothek neu entwickelten Modelle verwenden jedoch nur die Gasströme sowie die reinen Wasser-/Dampfströme. Zum besseren Verständnis der vorliegenden Arbeit sind die wichtigsten Eigenschaften dieser beiden *Connection*-Modelle nachfolgend aufgelistet. Weitere Details können der oben genannten Publikation entnommen werden.

11.1.1 *Connection*-Modell *c_st_g_*

Das *Connection*-Modell *c_st_g_* beschreibt Gasströme innerhalb der Modellbibliothek *BG_Lib*. In Tabelle 11.1 sind die wichtigsten in diesem *Connection*-Modell verwendeten Variablen und *Globals* angegeben. Zum Verständis für die vorliegende Arbeit ist es ausreichend, den Aufbau des *Connection*-Modells anhand der in Tabelle 11.1 gegebenen Werte zu kennen. Die genaue Art der Ermittlung der einzelen Variablen wird daher hier nicht näher ausgeführt. Prinzipiell werden die meisten Variablen, wie beispielsweise die spezifische Enthalpie, über externe Funktionen bzw. einer Kombination aus Zusammenhängen zwischen den Variablen und Daten aus externen Funktionen ermittelt. Die Energie des Gasstromes wird über den unteren Heizwert des Gasstromes bestimmt. Weitere Details können der Literatur entnommen werden (Pröll et al., 2008).

Tabelle 11.1: Wichtigste Variablen und *Globals* der *Connection c_st_g_*

Bezeichnung	Beschreibung	Typ	Einheit
p	Druck	Variable	bar
t	Temperatur	Variable	°C
h	Spezifische Enthalpie (nur der Anteil der fühlbaren Wärme)	Variable	kJ/kg
v	Spezifisches Volumen	Variable	m^3/kg
massflow	Massenstrom des Gasanteils des Stroms	Variable	kg/h
Mass_total	Massenstrom des Gesamtstroms inklusive Staub-, Asche- und Teeranteil	Variable	kg/h
nvolflow	Normvolumenstrom des Gasanteils	Variable	Nm^3/h
Energy	Summe aus Wärme-, Druck- und chemischer Energie des Stromes basierend auf dem unteren Heizwert	Variable	kW
dust_content	Staubanteil des Gasstromes	Variable	g/Nm^3
h_dust	Enthalpie des Staubanteils	Variable	kJ/kg
char_content	Ascheanteil des Gasstromes		g/Nm^3
h_char	Enthalpie des Ascheanteils	Variable	kJ/kg
tar_content	Teeranteil des Gasstromes		g/Nm^3
h_tar	Enthalpie des Teeranteils	Variable	kJ/kg
Gas	Zugeordnetes *Global*-Modell vom Typ g_cmp_gas_	*Global*	-
Dust	Zugeordnetes *Global*-Modell vom Typ g_cmp_sol_ (optional)	*Global*	-
Char	Zugeordnetes *Global*-Modell vom Typ g_cmp_org_ (optional)	*Global*	-
Tar	Zugeordnetes *Global*-Modell vom Typ g_cmp_org_ (optional)	*Global*	-

11.1.2 *Connection*-Modell *c_st_w_*

Das *Connection*-Modell *c_st_w_* beschreibt reine Wasserströme innerhalb der Modellbibliothek *BG_Lib*. Dabei kann das Wasser sowohl flüssig als auch teilweise bzw. zur Gänze dampfförmig vorliegen. In Tabelle 11.2 sind die wichtigsten in diesem *Connection*-Modell verwendeten Variablen angegeben. Diesem *Connection*-Modell ist kein *Global*-Modell zugeordnet. Zum Verständis für die vorliegende Arbeit ist es wieder ausreichend, den Aufbau des *Connection*-Modells anhand der in Tabelle 11.2 gegebenen Werte zu kennen. Auch hier werden die meisten Variablen über externe Funktionen bzw. einer Kombination aus Zusammenhängen zwischen den Variablen und Daten aus externen Funktionen ermittelt. Weitere Details können wiederum Pröll et al. entnommen werden (Pröll et al., 2008).

Tabelle 11.2: Wichtigste Variablen der *Connection c_st_w_*

Bezeichnung	Beschreibung	Typ	Einheit
p	Druck	Variable	bar
t	Temperatur	Variable	°C
h	Spezifische Enthalpie (nur der Anteil der fühlbaren Wärme)	Variable	kJ/kg
v	Spezifisches Volumen	Variable	m^3/kg
x_steam	Dampfgehalt	Variable	kg/kg
massflow	Massenstrom des Gasanteils des Stroms	Variable	kg/h
optvolflow	Betriebsvolumenstrom des Gasanteils bei Betriebstemperatur und -druck	Variable	Nm^3/h
Energy	Summe aus Wärme-, Druck- und chemischer Energie des Stromes	Variable	kW

11.2 Verwendete *Globals* für die entwickelten Modelle innerhalb der *BG_Lib*

11.2.1 *Global*-Modell *g_cmp_gas_*

Die wichtigsten Variablen des *Global*-Modells *g_cmp_gas_* sind in Tabelle 11.3 aufgelistet. Darüber hinaus existieren für alle Gasbestandteile auch Variablen für die Massenanteile der Komponenten, die aus Gründen der Übersichtlichkeit jedoch nicht angeführt wurden. Randbedingung in diesem *Global* ist, dass die Summe der Molenanteile aller Komponenten gleich 1 sein muss. Die Molmasse der Gasmischung ergibt sich als Summe der Molmassen der Einzelkomponenten gewichtet mit ihren Molanteilen. Weitere Details zu diesem *Global*-Modell können der Literatur (Pröll et al., 2008) entnommen werden.

Tabelle 11.3: Wichtigste Variablen des *Global*-Modells *g_cmp_gas _*

Bezeichnung	Beschreibung	Typ	Einheit
yAr	Molanteil von Argon	Variable	mol/mol
yC2H4	Molanteil von Ethen	Variable	mol/mol
yC2H6	Molanteil von Ethan	Variable	mol/mol
yC3H8	Molanteil von Propan	Variable	mol/mol
yCH4	Molanteil von Methan	Variable	mol/mol
yCO	Molanteil von Kohlenmonoxid	Variable	mol/mol
yCO2	Molanteil von Kohlendioxid	Variable	mol/mol

Tabelle 11.3: Wichtigste Variablen des *Global-Modells g_cmp_gas _* (Fortsetzung)

Bezeichnung	Beschreibung	Typ	Einheit
yH2	Molanteil von Wasserstoff	Variable	mol/mol
yH2O	Molanteil von Wasser	Variable	mol/mol
yH2S	Molanteil von Schwefelwasserstoff	Variable	mol/mol
yHCl	Molanteil von Chlorwasserstoff	Variable	mol/mol
yHCN	Molanteil von Cyanwasserstoff	Variable	mol/mol
yN2	Molanteil von Stickstoff	Variable	mol/mol
yN2O	Molanteil von Distickstoffmonoxid	Variable	mol/mol
yNH3	Molanteil von Ammoniak	Variable	mol/mol
yNO	Molanteil von Stickstoffmonoxid	Variable	mol/mol
yO2	Molanteil von Sauerstoff	Variable	mol/mol
ySO2	Molanteil von Schwefeldioxid	Variable	mol/mol
M	Molmasse der Gasmischung	Variable	kg/kmol
LHV	Unterer Heizwert der Gasmischung	Variable	MJ/Nm³
HHV	Oberer Heizwert der Gasmischung	Variable	MJ/Nm³

11.2.2 *Global*-Modell *g_cmp_org_*

In Tabelle 11.4 sind die wichtigsten Variablen des *Global*-Modells *g_cmp_org_* aufgelistet. Der *Switch ModelSubstance* bietet die Möglichkeit, eine von mehreren vordefinierten Modellsubstanzen auszuwählen. Durch diese Auswahl wird festgelegt, welche thermodynamischen Daten den Berechnungen zugrundegelegt werden. Für den *Switch hvSource* stehen die Optionen zur Verfügung, dass der Heizwert nach Boie bzw. für einen vordefinierten Teermix berechnet oder vom User eingegeben wird. Als Randbedingung muss die Summe der Massenanteile für C, H, O, N, S und Cl gleich 1 sein. Genauere Details zu diesem *Global*-Modell können Pröll et al. entnommen werden (Pröll et al., 2008).

Tabelle 11.4: Wichtigste Variablen des *Global*-Modells *g_cmp_org _*

Bezeichnung	Beschreibung	Typ	Einheit
ModelSubstance	Switch zur Auswahl einer Modellsubstanz	Switch	-
wC	Massenanteil C	Variable	kg/kg
wH	Massenanteil H	Variable	kg/kg
wO	Massenanteil O	Variable	kg/kg
wN	Massenanteil N	Variable	kg/kg
wS	Massenanteil S	Variable	kg/kg
wCl	Massenanteil Cl	Variable	kg/kg

Tabelle 11.4: Wichtigste Variablen des *Global-Modells g_cmp_org _* (Fortsetzung)

Bezeichnung	Beschreibung	Typ	Einheit
hvSource	Switch zur Auswahl einer Methode für die Berechnung des Heizwertes	Switch	-
lhv	Unterer Heizwert der organischen Mischung	Variable	kJ/kg
hhv	Oberer Heizwert der organischen Mischung	Variable	kJ/kg

11.2.3 *Global*-Modell *g_cmp_sol_*

Das *Global*-Modell *g_cmp_sol_* besteht hauptsächlich aus den in Tabelle 11.5 aufgelisteten Variablen. Als Randbedingung muss in diesem *Global*-Modell die Summe der Massenanteile aller beinhalteten Substanzen gleich 1 sein. Die Dichte wird über die Summe der gewichteten Dichten der einzelnen Komponenten ermittelt. Weitere Details zu diesem *Global*-Modell sind der Literatur zu entnehmen (Pröll et al., 2008).

Tabelle 11.5: Wichtibste Variablen des *Global*-Modells *g_cmp_sol _*

Bezeichnung	Beschreibung	Typ	Einheit
wAsh	Massenanteil Asche	Variable	kg/kg
wK2O	Massenanteil K_2O	Variable	kg/kg
wMgO	Massenanteil MgO	Variable	kg/kg
wCaO	Massenanteil CaO	Variable	kg/kg
wSiO2	Massenanteil SiO_2	Variable	kg/kg
wOlivine	Massenanteil Olivin	Variable	kg/kg
wCaCO3	Massenanteil $CaCO_3$	Variable	kg/kg
wDolomite	Massenanteil Dolomit	Variable	kg/kg
wCaSO4	Massenanteil $CaSO_4$	Variable	kg/kg
wCaOH2	Massenanteil $CaOH_2$	Variable	kg/kg
roh	Dichte der Feststoffmischung	Variable	kg/m^3

11.3 Daten zum Kraftstoffverbrauch von Fahrzeugen

Kraftstoffverbrauch der betrachteten Wasserstofffahrzeuge:

- H_2 VKM-Fahrzeug heute: 0,0140 kg H_2 pro km (EUCAR et al., 2007)
- H_2 BZ-Fahrzeug heute: 0,0078 kg H_2 pro km (EUCAR et al., 2007)
- H_2 VKM-Fahrzeug 2050: 0,0115 kg H_2 pro km (nach Rechberger et al., 2008)
- H_2 BZ-Fahrzeug 2050: 0,0058 kg H_2 pro km (nach Rechberger et al., 2008)

Kraftstoffverbrauch von konventionellen PKWs:

- Diesel PKW heute: 0,0426 kg Diesel pro km (EUCAR et al., 2007)
- Benzin PKW heute: 0,0521 kg Benzin pro km (EUCAR et al., 2007)
- Diesel PKW 2050: 0,0371 kg Diesel pro km (nach Rechberger et al., 2008)
- Benzin PKW 2050: 0,0427 kg Benzin pro km (nach Rechberger et al., 2008)

Kraftstoffverbrauch von konventionellen LKWs:

- Diesel LKW heute: 0,37636 l Diesel pro km (nach Simbeck et al., 2002)
- Diesel LKW 2050: 0,32743 l Diesel pro km (nach Rechberger et al., 2008)

11.4 Kostendaten

11.4.1 Verwendete Investitionskosten

Tabelle 11.6: Verwendete Investitionskosten

Apparatur	Einheit	Investitionskosten
Dampfreformierungsanlage, Größenordnung Schwechat (abgeschätzt nach Simbeck et al., 2002)	EUR/(kg/s)	16.546.154
Dampfreformierungsanlage, Größenordnung 780 kg/d H_2 (abgeschätzt nach DWV, 2003)	EUR	2.004.046
Dampfreformierungsanlage, Größenordnung 570 kg/d H_2 (abgeschätzt nach DWV, 2003)	EUR	1.930.101
Dampfturbine (30 bar auf 2,5 bar), Größenordnung 25 t/h Dampf (abgeschätzt nach perönlicher Information der Fa. Rauscher & Patig GmbH)	EUR	649.268
Dampfturbine (30 bar auf 2,5 bar), Größenordnung 1 t/h Dampf (abgeschätzt nach perönlicher Information der Fa. Rauscher & Patig GmbH)	EUR	415.371
Dampfturbine (30 bar auf 2,5 bar), Größenordnung 0,55 t/h Dampf (abgeschätzt nach perönlicher Information der Fa. Rauscher & Patig GmbH)	EUR	381.964
Alkalische Elektrolyseanlage, Größenordnung 485 Nm^3/h H_2 (abgeschätzt nach DWV, 2003)	EUR	2.588.933
Alkalische Elektrolyseanlage, Größenordnung 60 Nm^3/h H_2 (abgeschätzt nach DWV, 2003)	EUR	373.436
Vergaseranlage, Größenordnung Güssing ohne Gasmotor (abgeschätzt nach Aichernig, 2006 und persönlicher Information der Fa. Jenbacher)	EUR	9.340.000
Biogasanlage ohne biologische Entschwefelungskolonne, Größenordnung 3.000 m^3 für Fermenter und Nachgärbehälter (nach Institut für Energetik und Umwelt et al., 2006)	EUR	2.040.000
Biologische Entschwefelungskolonne (abgeschätzt nach Hornbachner et al., 2005)	EUR	50.000
Gekoppelte Dunkel- und Photofermentation, Größenordnung 60 kg/h H_2 (Ljunggren et al., 2010)	EUR	7.848.000
PSA-Anlage, Größenordnung 60 kg/h H_2 (abgeschätzt nach Amos, 2004)	EUR	374.761
PSA-Anlage, Größenordnung 600 kg/d H_2 (abgeschätzt nach Amos, 2004)	EUR	164.369

Tabelle 11.6: Verwendete Investitionskosten (Fortsetzung)

Apparatur	Einheit	Investitionskosten
Hydrolyseapparate und Dunkelfermenter, Größenordnung wie für 60 kg/h H_2 bei gekoppelter Dunkel- und Photofermentation (Ljunggren et al., 2010)	EUR	7.356.100
Biogasfermenter inklusive Technik, Größenordnung 2.000 m³ Fermenter (abgeschätzt nach Institut für Energetik und Umwelt et al., 2006)	EUR	240.000
Gasmotor Größenordnung 1 MW elektrisch (Annahme)	EUR	550.000
Gaskessel (Annahme, bezogen auf thermische Kesselleistung)	EUR/kW	200
Aminwäscher Größenordnung 5.000 t/a CO_2 (abgeschätzt nach Rao et al., 2002)	EUR	175.819
Membrananlage zur CO_2-Abtrennung, Größenordnung 180 Nm³/h CH_4 (abgeschätzt nach Miltner, 2010)	EUR	850.500
Membrananlage zur CO_2-Abtrennung, Größenordnung 130 Nm³/h CH_4 (abgeschätzt nach Miltner, 2010)	EUR	702.000
Membrananlage zur CO_2-Abtrennung, Größenordnung 180 Nm³/h CH_4 ohne Adsorptionskolonne (abgeschätzt nach Miltner, 2010)	EUR	823.500
Membrananlage zur CO_2-Abtrennung, Größenordnung 130 Nm³/h CH_4 Adsorptionskolonne (abgeschätzt nach Miltner, 2010)	EUR	679.500
H_2 Kompressor von 30 bar auf 217 bar, Größenordnung 100.000 kg/d H_2 (abgeschätzt nach Simbeck et al., 2002)	EUR/kWel	1.358
H_2 Kompressor von 1 bar bzw. 30 bar auf 217 bar, Größenordnung 1.000 kg/d H_2 (abgeschätzt nach Simbeck et al., 2002)	EUR/kWel	2.038
H_2 Kompressor von 30 bar auf 217 bar, Größenordnung 470 kg/d H_2 (abgeschätzt nach Simbeck et al., 2002)	EUR/kWel	2.370
H_2 Kompressor von 217 bar auf 450 bar, Größenordnung 470 kg/d H_2 (abgeschätzt nach Simbeck et al., 2002)	EUR/kWel	2.370
H_2 Kompressor von 217 bar auf 880 bar, Größenordnung 100.000 kg/d H_2 (abgeschätzt nach Simbeck et al., 2002)	EUR/kWel	2.370
CH_4 Kompressor von 5 bar auf 32 bar, Größenordnung 150 Nm³/h CH_4 (abgeschätzt nach Miltner, 2010)	EUR	380.000

Tabelle 11.6: Verwendete Investitionskosten (Fortsetzung)

Apparatur	Einheit	Investitionskosten
Druckspeicher 217 bar, Größenordnung 100.000 kg/d H_2 (abgeschätzt nach Simbeck et al., 2002)	EUR/gallon (phys. Vol.)	13,58
Druckspeicher 450 bar, Größenordnung 470 kg/d H_2 (abgeschätzt nach Simbeck et al., 2002)	EUR/gallon (phys. Vol.)	78,79
Druckspeicher 880 bar, Größenordnung 470 kg/d H_2 (abgeschätzt nach Simbeck et al., 2002)	EUR/gallon (phys. Vol.)	157,58
H_2 Abfüllstation für LKW-Druckflaschen mit 217 bar, Größenordnung 470 bzw. 1.000 kg/d H_2 (abgeschätzt nach Simbeck et al., 2002)	EUR	10.188
H_2 Abfüllstation für LKW-Druckflaschen mit 217 bar, Größenordnung 100.000 kg/d H_2 (abgeschätzt nach Simbeck et al., 2002)	EUR	20.376
LKW für Druckflaschentransport (abgeschätzt nach Simbeck et al., 2002)	EUR	61.129
Druckflaschen für Transport bei 217 bar inklusive benötigtem Unterbau (abgeschätzt nach Simbeck et al., 2002)	EUR	108.674
Zapfautomat für H_2 PKW-Tankstelle (abgeschätzt nach Simbeck et al., 2002)	EUR	10.188

11.4.2 Verwendete Betriebskosten

Tabelle 11.7: Verwendete Betriebskosten

Bezeichnung	Einheit	Betriebskosten
Erdgas für Abnahme in Größenordnung Dampfreformierung Schwechat (Annahme)	EUR/t	340
Maissilage aus Fahrsilo (abgeschätzt nach Institut für Energetik und Umwelt et al., 2006)	EUR/t (Frischmasse)	38
Kartoffelschalen inkl. Transport (nach Ljunggren et al., 2010)	EUR/t (Trockenmasse)	31,06
Grünschnitt und Biotonnenabfälle (Annahme)	EUR/t	0,0
Körnermais (nach Hellmayr, 2007)	EUR/kg (Frischmasse)	0,16
Holzhackschnitzel inkl. Transport (nach Hofbauer et al., 2006)	EUR/t (Frischmasse)	70
Transport Rohstoffe (Annahme)	EUR/(t*km)	0,30

Tabelle 11.7: Verwendete Betriebskosten (Fortsetzung)

Bezeichnung	Einheit	Betriebskosten
Enzyme, Nährstoffe, CaOH für Dunkelfermenter in der Menge für 60 kg/h H_2 Produktion in der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation (Ljunggren et al., 2010)	EUR/a	57.600
Plastikrohre für Photofermenter in der Menge für 60 kg/h H_2 Produktion in der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation (nach Ljunggren et al., 2010)	EUR/a	3.873.600
Prozesswasser (nach Rao et al., 2002)	EUR/m³	0,14
Monoethanolamin (nach Haslbeck et al., 2002)	EUR/kg	0,90
Sauerstoff für biologische Entschwefelungskolonne (abgeschätzt nach Miltner, 2010)	EUR/Nm³	0,10
Fe2O3 für Schwefeladsorber der Membrantrennanlage für CO_2 (Annahme, dass eine Füllung 6 Monate genutzt wird) (abgeschätzt nach Miltner, 2010)	EUR/Füllung	9.887
Prozessdampf 10 bar für Regenerierung MEA-Absorption (abgeschätzt nach Ljunggren et al., 2010)	EUR/MJ	0,0059
Prozessdampf 4 bar für Bereitstellung von Prozesswärme (abgeschätzt nach Ljunggren et al., 2010)	EUR/MJ	0,0037
Betriebskosten für die Biomassevergasungsanlage in der Größenordnung Güssing (abgeschätzt nach Hofbauer et al., 2006)	EUR/a	300.000
Kosten Strom für üblichen Strommix (abgeschätzt nach Angaben der Fa. Wien Energie)	EUR/kWh	0,07
Kosten für Ökostrom (abgeschätzt nach Angaben der Fa. Wien Energie)	EUR/kWh	0,08
Grundgebühr für Ökostrom (abgeschätzt nach Angaben der Fa. Wien Energie)	EUR/a	12,0
Personalkosten für Betriebspersonal mit Arbeitszeit von 1.800 h/a (Annahme)	EUR/h	20,0
Personalkosten für LKW-Fahrer und Tankstellenpersonal mit Arbeitszeit von 1.800 h/a (Annahme)	EUR/h	15,0
Kosten für Nutzung des Erdgasnetzes: Entnahmekosten (nach Energie-Control, 2008)	EUR/kWh	0,0004
Kosten für Nutzung des Erdgasnetzes: Entnahmekosten Leistungspreis (nach Energie-Control, 2008)	EUR/(kWh/h)	3,79
Kosten für Nutzung des Erdgasnetzes: Einspeisung (nach Energie-Control, 2008)	EUR/a	487.105
Kosten für Nutzung des Erdgasnetzes: Messentgelt (nach Energie-Control, 2008)	EUR/kWh	0,000044
Kosten für Nutzung des Erdgasnetzes: Messentgelt (nach Energie-Control, 2008)	EUR/kWh	0,000044

Tabelle 11.7: Verwendete Betriebskosten (Fortsetzung)

Bezeichnung	Einheit	Betriebskosten
Kosten Diesel für LKW (Annahme nach aktuellen Tankstellenpreisen)	EUR/l	1,17
Gestehungskosten Benzin an der Tankstelle (Annahme basierend auf persönlicher Kommunikation mit OMV)	EUR/kWh	0,05
Gestehungskosten Diesel an der Tankstelle (Annahme basierend auf persönlicher Kommunikation mit OMV)	EUR/kWh	0,059

11.4.3 Verwendete Erlöse

Tabelle 11.8: Verwendete Erlöse

Bezeichnung	Einheit	Betriebskosten
Stromerlös aus Biomassevergasungsanlage (nach BMWA, 2006 für 2-5 MW Stromproduktion)	EUR/kWh	0,15
Stromerlös aus Biogasanlage (nach BMWA, 2006 für <100 kW Stromproduktion)	EUR/kWh	0,17
Stromerlös aus Biogasanlage (nach BMWA, 2006 für 500-1.000 kW Stromproduktion)	EUR/kWh	0,12
Stromerlös aus Biogasanlage (nach BMWA, 2006 für >1.000 kW Stromproduktion)	EUR/kWh	0,11
Stromerlös aus Erdgasreformierungsanlage (Annahme)	EUR/kWh	0,03
Stromerlös aus Erdgasreformierungsanlage (Annahme)	EUR/kWh	0,03

11.5 Eingabedaten für die Simulation der gewählten Anlagenvarianten

In diesem Kapitel sind die wichtigsten Eingabedaten für die durchgeführten Simulationen der gewählten Anlagenvarianten aufgelistet. Angaben, die für das Ergebnis der Simulation nicht relevant sind, wie Druckverluste in Wärmetauschern, Wirkungsgrade in Pumpen und Motoren oder Zustände der Heiz- und Kühlmedien, sind nicht angeführt. Sollten diese im Allgemeinen nicht angegebenen Werte in einzelen Fällen für das Ergebnis relevant sein, so sind sie an den entsprechenden Stellen auch angeführt.

11.5.1 Dampfreformierung von Erdgas

Die verwendete Zusammensetzung des Erdgases ist in Tabelle 4.2 (siehe Kapitel 4.1) angegeben.

Tabelle 11.9: Eingabedaten für die Simulation der Dampfreformierung von Erdgas

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Temperatur Erdgas	°C	20
Dichte Erdgas	kg/Nm³	0,755
Temperatur Verbrennungsluft	°C	20
Temperatur Prozesswasser Dampfkreislauf	°C	10
Druck Prozesswasser Dampfkreislauf	bar	3
Prozessparameter		
Temperatur Erdgas Eintritt Entschwefelung	°C	370
Druckverlust Entschwefelung	bar	0
H2S_removal Entschwefelung	%	99
H2_to_S Entschwefelung	mol/mol	10
Temperatur Erdgas Eintritt Dampfreformer	°C	580
Druck Erdgas Eintritt Dampfreformer	bar	30
Temperatur Dampf Eintritt Dampfreformer	°C	580
Druck Dampf Eintritt Dampfreformer	bar	30
temperature Dampfreformer	°C	880
delta_p_reformer Dampfreformer	bar	9
H2O_C_relation Dampfreformer	mol/mol	3,3
delta_p_air_comb Dampfreformer	bar	0
delta_p_comb Dampfreformer	bar	0
lambda_comb Dampfreformer	kg/kg	1,05
C2H6_to_CO Dampfreformer	%	99,9
C3H8_to_CO Dampfreformer	%	99,99999
CH4_to_CO2 Dampfreformer	%	13
CH4_CO2_to_CO Dampfreformer	%	-0,1
CH4_3CO2_to_CO Dampfreformer	%	-0,7
CO_to_CO2 Dampfreformer	%	9

Tabelle 11.9: Eingabedaten für die Simulation der Dampfreformierung von Erdgas (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
Prozessparameter		
CH4_toCOEqu Dampfreformer	-	0,998
Temperatur Eintritt Shiftreaktor	°C	330
pressure_drop Shiftreaktor	bar	0
FracEqu Shiftreaktor	-	0,9
Temperatur Gas Eintritt Kondensator	°C	320
Temperatur Gas Austritt Kondensator	°C	40
pressure_drop PSA	bar	0
p_desorb PSA	bar	1
H2_exit_wet PSA	vol%	99,999
H2_recovery PSA	%	81
H2_flushing	%	10
Massenstrom erzeugter Wasserstoffstrom	kg/s	0,82394
Temperatur Rauchgas Austritt Dampfreformer	°C	920
Temperatur Rauchgas Austritt Anlage	°C	140
Isentroper Wirkungsgrad Dampfturbine	-	0,7818
Druck Dampf Austritt Dampfturbine	bar	2,5

11.5.2 Alkalische Elektrolyse

Tabelle 11.10: Eingabedaten für die Simulation der kleinen Elektrolyseanlage

Parameter	Einheit	Wert
Massenstrom eintretendes Wasser	kg/s	0,01667
pressure Elektrolyse	bar	25
temperature Elektrolyse	°C	80
sec_energy_m3 Elektrolyse	kWh/Nm³	4,8
H2_purity Elektrolyse	vol%, trocken	99,9995
O2_purity Elektrolyse	vol%, trocken	99,9
Massenstrom erzeugter Wasserstoffstrom	kg/s	0,0014983

Tabelle 11.11: Eingabedaten für die Simulation der großen Elektrolyseanlage

Parameter	Einheit	Wert
Massenstrom eintretendes Wasser	kg/s	0,13472
pressure Elektrolyse	bar	33
temperature Elektrolyse	°C	80
sec_energy_m3 Elektrolyse	kWh/Nm³	4,8
H2_purity Elektrolyse	vol%, trocken	99,9995
O2_purity Elektrolyse	vol%, trocken	99,9
Massenstrom erzeugter Wasserstoffstrom	kg/s	0,012112

11.5.3 Dampfreformierung von Biogas

11.5.3.1 Maissilage als Rohstoff

Tabelle 11.12: Zusammensetzung des Rohstoffs Maissilage (D'Jesús et al., 2006; Thyo et al., 2007)

Parameter	Einheit	Wert
C	gew%, trocken	43,4
H	gew%, trocken	6,17
O	gew%, trocken	46,7
N	gew%, trocken	1,02
S	gew%, trocken	0,93
Cl	gew%, trocken	0,13
Asche	gew%, trocken	1,65
Wasser	gew%, roh	71,0
Unterer Heizwert	MJ/kg, trocken	14,5

Tabelle 11.13: Eingabedaten für die Simulation der Biogasanlage mit Maissilage

Parameter	Einheit	Wert
Temperatur Substratstrom	°C	15
Druck Substratstrom	bar	1,06
Temperatur Wasser zu Maischebehälter	°C	5
Druck Wasser zu Maischebehälter	bar	2
Temperatur Sauerstoff zu biologischer Entschwefelung	°C	20
Druck Sauerstoff zu biologischer Entschwefelung	bar	1,013
operating_p Maischebehälter	bar	1,05
operating_t Maischebehälter	°C	32,2
q_demand Maischebehälter	kW	0
Massenstrom Austritt Maischebehälter	kg/s	1,58
Feststoffgehalt Austritt Maischebehälter	kg/kg	0,1
operating_p Biogasfermenter	bar	1,005
operating_t Biogasfermenter	°C	35
prod_CH4 Biogasfermenter	-	0,55
residual_S Biogasfermenter	-	0,85
q_demand Biogasfermenter	kW	0
operating_p Nachgärbehälter	bar	1,004
operating_t Nachgärbehälter	°C	35
prod_CO2 Nachgärbehälter	-	0,01
residual_S Nachgärbehälter	-	0,85
q_demand Nachgärbehälter	kW	0
CH_4-Gehalt Biogas Austritt Nachgärbehälter	vol%, roh	53
Gasausbeute pro t Frischmasse Substrat Austritt Nachgärbehälter	Nm^3/t	190

Tabelle 11.13: Eingabedaten für die Simulation der Biogasanlage mit Maissilage (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
trickling_density biologische Entschwefelungskolonne	$m^3/(m^2/h)$	2
area biologische Entschwefelungskolonne	m^2	8
H_2S-Gehalt Biogas Austritt biologische Entschwefelungskolonne	ppmv, roh	50
O_2-Gehalt Biogas Austritt biologische Entschwefelungskolonne	vol%, roh	1

Tabelle 11.14: Eingabedaten für die Simulation der on-site Reformierung von Biogas aus Maissilage

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Temperatur Verbrennungsluft	°C	20
Temperatur Prozesswasser Dampfkreislauf	°C	10
Druck Prozesswasser Dampfkreislauf	bar	3
Prozessparameter		
Temperatur Gas Eintritt Entschwefelung	°C	379
Druckverlust Entschwefelung	bar	0
H2S_removal Entschwefelung	%	99
H2_to_S Entschwefelung	mol/mol	10
Temperatur Gas Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Gas Eintritt Dampfreformer	bar	30
Temperatur Dampf Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Dampf Eintritt Dampfreformer	bar	30
temperature Dampfreformer	°C	880
delta_p_reformer Dampfreformer	bar	9
H2O_C_relation Dampfreformer	mol/mol	3,3
delta_p_air_comb Dampfreformer	bar	0
delta_p_comb Dampfreformer	bar	0
lambda_comb Dampfreformer	kg/kg	1,05
C2H6_to_CO Dampfreformer	%	90
C3H8_to_CO Dampfreformer	%	90
CH4_to_CO2 Dampfreformer	%	1
CH4_CO2_to_CO Dampfreformer	%	5
CH4_3CO2_to_CO Dampfreformer	%	3
CO_to_CO2 Dampfreformer	%	7
CH4_toCOEqu Dampfreformer	-	0,6
Temperatur Eintritt Shiftreaktor	°C	330
pressure_drop Shiftreaktor	bar	0
FracEqu Shiftreaktor	-	0,75
Temperatur Gas Eintritt Kondensator	°C	320
Temperatur Gas Austritt Kondensator	°C	40
pressure_drop PSA	bar	0
p_desorb PSA	bar	1
H2_exit_wet PSA	vol%	99,999
H2_recovery PSA	%	74

Tabelle 11.14: Eingabedaten für die Simulation der on-site Reformierung von Biogas aus Maissilage (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
Prozessparameter		
H2_flushing PSA	%	10
Temperatur Rauchgas Austritt Dampfreformer	°C	920
Temperatur Rauchgas Austritt Anlage	°C	140
Isentroper Wirkungsgrad Dampfturbine	-	0,7816
Druck Dampf Austritt Dampfturbine	bar	2,5

Tabelle 11.15: Eingabedaten für die Simulation der CO_2-Abtrennung und on-site Reformierung von Biogas aus Maissilage

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Temperatur Verbrennungsluft	°C	20
Temperatur Prozesswasser Dampfkreislauf	°C	10
Druck Prozesswasser Dampfkreislauf	bar	3
Prozessparameter		
Druck nach erster Stufe Kompressor Membrananlage	bar	6
Druck nach zweiter Stufe Kompressor Membrananlage	bar	9
Temperatur nach zweiter Stufe Kompressor Membrananlage	°C	110
Temperatur Gas Austritt Kondensator Membrananlage	°C	10
Temperatur Gas Austritt Wiederaufwärmung Membrananlage	°C	35
delta_p_gas Membranmodule	bar	4
delta_p_CO2 Membranmodule	bar	5
CO2_loss Membranmodule	vol%	2
CH4_loss Membranmodule	vol%	4,5
H_2O-Gehalt Austritt Retentat Membranmodule	ppmv	5
O_2-Gehalt Austritt Retentat Membranmodule	vol%	0,4
Temperatur Gas Eintritt Entschwefelung	°C	370
Druckverlust Entschwefelung	bar	0
H2S_removal Entschwefelung	%	99
H2_to_S Entschwefelung	mol/mol	10
Temperatur Gas Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Gas Eintritt Dampfreformer	bar	30
Temperatur Dampf Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Dampf Eintritt Dampfreformer	bar	30
temperature Dampfreformer	°C	880
delta_p_reformer Dampfreformer	bar	9
H2O_C_relation Dampfreformer	mol/mol	3,3
delta_p_air_comb Dampfreformer	bar	0
delta_p_comb Dampfreformer	bar	0

Tabelle 11.15: Eingabedaten für die Simulation der CO2-Abtrennung und on-site Reformierung von Biogas aus Maissilage (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
Prozessparameter		
lambda_comb Dampfreformer	kg/kg	1,05
C2H6_to_CO Dampfreformer	%	90
C3H8_to_CO Dampfreformer	%	90
CH4_to_CO2 Dampfreformer	%	7
CH4_CO2_to_CO Dampfreformer	%	-0,8
CH4_3CO2_to_CO Dampfreformer	%	-2,0
CO_to_CO2 Dampfreformer	%	4
CH4_toCOEqu Dampfreformer	-	0,8
Temperatur Eintritt Shiftreaktor	°C	330
pressure_drop Shiftreaktor	bar	0
FracEqu Shiftreaktor	-	0,75
Temperatur Gas Eintritt Kondensator	°C	320
Temperatur Gas Austritt Kondensator	°C	40
pressure_drop PSA	bar	0
p_desorb PSA	bar	1
H2_exit_wet PSA	vol%	99,999
H2_recovery PSA	%	74
H2_flushing PSA	%	10
Temperatur Rauchgas Austritt Dampfreformer	°C	920
Temperatur Rauchgas Austritt Anlage	°C	140
Isentroper Wirkungsgrad Dampfturbine	-	0,7816
Druck Dampf Austritt Dampfturbine	bar	2,5

Tabelle 11.16: Eingabedaten für die Simulation der zentralen Reformierung von Biogas aus Maissilage

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Temperatur Verbrennungsluft	°C	20
Temperatur Prozesswasser Dampfkreislauf	°C	10
Druck Prozesswasser Dampfkreislauf	bar	3
Prozessparameter		
Druck nach erster Stufe Kompressor Membrananlage	bar	6
Druck nach zweiter Stufe Kompressor Membrananlage	bar	9
Temperatur nach zweiter Stufe Kompressor Membrananlage	°C	110
Temperatur Gas Austritt Kondensator Membrananlage	°C	10
Temperatur Gas Austritt Wiederaufwärmung Membrananlage	°C	35
delta_p Entschwefelung Membrananlage	bar	0
H2S_removal Entschwefelung Membrananlage	%	99

Tabelle 11.16: Eingabedaten für die Simulation der zentralen Reformierung von Biogas aus Maissilage (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
Prozessparameter		
delta_p_gas Membranmodule	bar	4
delta_p_CO2 Membranmodule	bar	5
CO2_loss Membranmodule	vol%	2
CH4_loss Membranmodule	vol%	4,5
H_2O-*Gehalt* Austritt Retentat Membranmodule	ppmv	5
O_2-*Gehalt* Austritt Retentat Membranmodule	vol%	0,4
Druck Austritt Hochdruckkompressor	bar	32
Temperatur Gas aus Erdgasnetz	°C	30
Druck Gas aus Erdgasnetz	bar	30
Temperatur Gas Eintritt Entschwefelung	°C	370
Druckverlust Entschwefelung	bar	0
H2S_removal Entschwefelung	%	99
H2_to_S Entschwefelung	mol/mol	10
Temperatur Gas Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Gas Eintritt Dampfreformer	bar	30
Temperatur Dampf Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Dampf Eintritt Dampfreformer	bar	30
temperature Dampfreformer	°C	880
delta_p_reformer Dampfreformer	bar	9
H2O_C_relation Dampfreformer	mol/mol	3,3
delta_p_air_comb Dampfreformer	bar	0
delta_p_comb Dampfreformer	bar	0
lambda_comb Dampfreformer	kg/kg	1,05
C2H6_to_CO Dampfreformer	%	90
C3H8_to_CO Dampfreformer	%	90
CH4_to_CO2 Dampfreformer	%	14
CH4_CO2_to_CO Dampfreformer	%	-0,10
CH4_3CO2_to_CO Dampfreformer	%	-0,70
CO_to_CO2 Dampfreformer	%	9
CH4_toCOEqu Dampfreformer	-	0,998
Temperatur Eintritt Shiftreaktor	°C	330
pressure_drop Shiftreaktor	bar	0
FracEqu Shiftreaktor	-	0,9
Temperatur Gas Eintritt Kondensator	°C	320
Temperatur Gas Austritt Kondensator	°C	40
pressure_drop PSA	bar	0
p_desorb PSA	bar	1
H2_exit_wet PSA	vol%	99,999
H2_recovery PSA	%	81
H2_flushing PSA	%	10
Temperatur Rauchgas Austritt Dampfreformer	°C	920
Temperatur Rauchgas Austritt Anlage	°C	140
Isentroper Wirkungsgrad Dampfturbine	-	0,7818
Druck Dampf Austritt Dampfturbine	bar	2,5

11.5.3.2 Kartoffelschalen als Rohstoff

Tabelle 11.17: Zusammensetzung des Rohstoffs Kartoffelschalen (Antal et al., 2000; Suksankraisorn et al., 2003; Claassen et al., 2004; Institut für Energetik und Umwelt et al., 2006)

Parameter	Einheit	Wert
C	gew%, trocken	44,1
H	gew%, trocken	5,7
O	gew%, trocken	37,8
N	gew%, trocken	2,8
S	gew%, trocken	0,3
Cl	gew%, trocken	0,0
Asche	gew%, trocken	9,3
Wasser	gew%, roh	89,0
Unterer Heizwert	MJ/kg, trocken	13,8

Tabelle 11.18: Eingabedaten für die Simulation der Biogasanlage mit Kartoffelschalen

Parameter	Einheit	Wert
Temperatur Substratstrom	°C	15
Druck Substratstrom	bar	1,06
Temperatur Wasser zu Maischebehälter	°C	5
Druck Wasser zu Maischebehälter	bar	2
Massenstrom Wasser zu Maischebehälter	kg/s	0
Temperatur Sauerstoff zu biologischer Entschwefelung	°C	20
Druck Sauerstoff zu biologischer Entschwefelung	bar	1,013
operating_p Maischebehälter	bar	1,05
operating_t Maischebehälter	°C	32,2
q_demand Maischebehälter	kW	0
Massenstrom Austritt Maischebehälter	kg/s	2,1
operating_p Biogasfermenter	bar	1,005
operating_t Biogasfermenter	°C	35
prod_CH4 Biogasfermenter	-	0,45
residual_S Biogasfermenter	-	0,85
q_demand Biogasfermenter	kW	0
operating_p Nachgärbehälter	bar	1,004
operating_t Nachgärbehälter	°C	35
prod_CO2 Nachgärbehälter	-	0,1
residual_S Nachgärbehälter	-	0,85
q_demand Nachgärbehälter	kW	0
CH_4-Gehalt Biogas Austritt Nachgärbehälter	vol%, roh	51,4
Gasausbeute pro t Frischmasse Substrat Austritt Nachgärbehälter	Nm^3/t	67,7
trickling_density biologische Entschwefelungs-kolonne	$m^3/(m^2/h)$	2

Tabelle 11.18: Eingabedaten für die Simulation der Biogasanlage mit Kartoffelschalen (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
area biologische Entschwefelungskolonne	m^2	8
H_2S-Gehalt Biogas Austritt biologische Entschwefelungskolonne	ppmv, roh	50
O_2-Gehalt Biogas Austritt biologische Entschwefelungskolonne	vol%, roh	1

Tabelle 11.19: Eingabedaten für die Simulation der on-site Reformierung von Biogas aus Kartoffelschalen

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Temperatur Verbrennungsluft	°C	20
Temperatur Prozesswasser Dampfkreislauf	°C	10
Druck Prozesswasser Dampfkreislauf	bar	3
Prozessparameter		
Temperatur Gas Eintritt Entschwefelung	°C	379
Druckverlust Entschwefelung	bar	0
H2S_removal Entschwefelung	%	99
H2_to_S Entschwefelung	mol/mol	10
Temperatur Gas Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Gas Eintritt Dampfreformer	bar	30
Temperatur Dampf Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Dampf Eintritt Dampfreformer	bar	30
temperature Dampfreformer	°C	880
delta_p_reformer Dampfreformer	bar	9
H2O_C_relation Dampfreformer	mol/mol	3,3
delta_p_air_comb Dampfreformer	bar	0
delta_p_comb Dampfreformer	bar	0
lambda_comb Dampfreformer	kg/kg	1,05
C2H6_to_CO Dampfreformer	%	90
C3H8_to_CO Dampfreformer	%	90
CH4_to_CO2 Dampfreformer	%	0,1
CH4_CO2_to_CO Dampfreformer	%	8
CH4_3CO2_to_CO Dampfreformer	%	11
CO_to_CO2 Dampfreformer	%	24
CH4_toCOEqu Dampfreformer	-	0,59
Temperatur Eintritt Shiftreaktor	°C	330
pressure_drop Shiftreaktor	bar	0
FracEqu Shiftreaktor	-	0,75
Temperatur Gas Eintritt Kondensator	°C	320
Temperatur Gas Austritt Kondensator	°C	40
pressure_drop PSA	bar	0
p_desorb PSA	bar	1
H2_exit_wet PSA	vol%	99,999
H2_recovery PSA	%	74
H2_flushing PSA	%	10

Tabelle 11.19: Eingabedaten für die Simulation der on-site Reformierung von Biogas aus Kartoffelschalen (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
Prozessparameter		
Temperatur Rauchgas Austritt Dampfreformer	°C	920
Temperatur Rauchgas Austritt Anlage	°C	140
Isentroper Wirkungsgrad Dampfturbine	-	0,7816
Druck Dampf Austritt Dampfturbine	bar	2,5

Tabelle 11.20: Eingabedaten für die Simulation der CO_2-Abtrennung und on-site Reformierung von Biogas aus Kartoffelschalen

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Temperatur Verbrennungsluft	°C	20
Temperatur Prozesswasser Dampfkreislauf	°C	10
Druck Prozesswasser Dampfkreislauf	bar	3
Prozessparameter		
Druck nach erster Stufe Kompressor Membrananlage	bar	6
Druck nach zweiter Stufe Kompressor Membrananlage	bar	9
Temperatur nach zweiter Stufe Kompressor Membrananlage	°C	110
Temperatur Gas Austritt Kondensator Membrananlage	°C	10
Temperatur Gas Austritt Wiederaufwärmung Membrananlage	°C	35
delta_p_gas Membranmodule	bar	4
delta_p_CO2 Membranmodule	bar	5
CO2_loss Membranmodule	vol%	2
CH4_loss Membranmodule	vol%	4,5
H_2O-Gehalt Austritt Retentat Membranmodule	ppmv	5
O_2-Gehalt Austritt Retentat Membranmodule	vol%	0,4
Temperatur Gas Eintritt Entschwefelung	°C	370
Druckverlust Entschwefelung	bar	0
H2S_removal Entschwefelung	%	99
H2_to_S Entschwefelung	mol/mol	10
Temperatur Gas Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Gas Eintritt Dampfreformer	bar	30
Temperatur Dampf Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Dampf Eintritt Dampfreformer	bar	30
temperature Dampfreformer	°C	880
delta_p_reformer Dampfreformer	bar	9
H2O_C_relation Dampfreformer	mol/mol	3,3
delta_p_air_comb Dampfreformer	bar	0
delta_p_comb Dampfreformer	bar	0
lambda_comb Dampfreformer	kg/kg	1,05

Tabelle 11.20: Eingabedaten für die Simulation der CO2-Abtrennung und on-site Reformierung von Biogas aus Kartoffelschalen (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
Prozessparameter		
C2H6_to_CO Dampfreformer	%	90
C3H8_to_CO Dampfreformer	%	90
CH4_to_CO2 Dampfreformer	%	7
CH4_CO2_to_CO Dampfreformer	%	-0,8
CH4_3CO2_to_CO Dampfreformer	%	-2,0
CO_to_CO2 Dampfreformer	%	4
CH4_toCOEqu Dampfreformer	-	0,8
Temperatur Eintritt Shiftreaktor	°C	330
pressure_drop Shiftreaktor	bar	0
FracEqu Shiftreaktor	-	0,75
Temperatur Gas Eintritt Kondensator	°C	320
Temperatur Gas Austritt Kondensator	°C	40
pressure_drop PSA	bar	0
p_desorb PSA	bar	1
H2_exit_wet PSA	vol%	99,999
H2_recovery PSA	%	74
H2_flushing PSA	%	10
Temperatur Rauchgas Austritt Dampfreformer	°C	920
Temperatur Rauchgas Austritt Anlage	°C	140
Isentroper Wirkungsgrad Dampfturbine	-	0,7816
Druck Dampf Austritt Dampfturbine	bar	2,5

Tabelle 11.21: Eingabedaten für die Simulation der zentralen Reformierung von Biogas aus Kartoffelschalen

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Temperatur Verbrennungsluft	°C	20
Temperatur Prozesswasser Dampfkreislauf	°C	10
Druck Prozesswasser Dampfkreislauf	bar	3
Prozessparameter		
Druck nach erster Stufe Kompressor Membrananlage	bar	6
Druck nach zweiter Stufe Kompressor Membrananlage	bar	9
Temperatur nach zweiter Stufe Kompressor Membrananlage	°C	110
Temperatur Gas Austritt Kondensator Membrananlage	°C	10
Temperatur Gas Austritt Wiederaufwärmung Membrananlage	°C	35
delta_p Entschwefelung Membrananlage	bar	0
H2S_removal Entschwefelung Membrananlage	%	99
delta_p_gas Membranmodule	bar	4

Tabelle 11.21: Eingabedaten für die Simulation der zentralen Reformierung von Biogas aus Kartoffelschalen (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
Prozessparameter		
delta_p_CO2 Membranmodule	bar	5
CO2_loss Membranmodule	vol%	2
CH4_loss Membranmodule	vol%	4,5
H_2O-Gehalt Austritt Retentat Membranmodule	ppmv	5
O_2-Gehalt Austritt Retentat Membranmodule	vol%	0,4
Druck Austritt Hochdruckkompressor	bar	32
Temperatur Gas aus Erdgasnetz	°C	30
Druck Gas aus Erdgasnetz	bar	30
Temperatur Gas Eintritt Entschwefelung	°C	370
Druckverlust Entschwefelung	bar	0
H2S_removal Entschwefelung	%	99
H2_to_S Entschwefelung	mol/mol	10
Temperatur Gas Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Gas Eintritt Dampfreformer	bar	30
Temperatur Dampf Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Dampf Eintritt Dampfreformer	bar	30
temperature Dampfreformer	°C	880
delta_p_reformer Dampfreformer	bar	9
H2O_C_relation Dampfreformer	mol/mol	3,3
delta_p_air_comb Dampfreformer	bar	0
delta_p_comb Dampfreformer	bar	0
lambda_comb Dampfreformer	kg/kg	1,05
C2H6_to_CO Dampfreformer	%	90
C3H8_to_CO Dampfreformer	%	90
CH4_to_CO2 Dampfreformer	%	14
CH4_CO2_to_CO Dampfreformer	%	-0,10
CH4_3CO2_to_CO Dampfreformer	%	-0,70
CO_to_CO2 Dampfreformer	%	9
CH4_toCOEqu Dampfreformer	-	0,998
Temperatur Eintritt Shiftreaktor	°C	330
pressure_drop Shiftreaktor	bar	0
FracEqu Shiftreaktor	-	0,9
Temperatur Gas Eintritt Kondensator	°C	320
Temperatur Gas Austritt Kondensator	°C	40
pressure_drop PSA	bar	0
p_desorb PSA	bar	1
H2_exit_wet PSA	vol%	99,999
H2_recovery PSA	%	81
H2_flushing PSA	%	10
Temperatur Rauchgas Austritt Dampfreformer	°C	920
Temperatur Rauchgas Austritt Anlage	°C	140
Isentroper Wirkungsgrad Dampfturbine	-	0,7818
Druck Dampf Austritt Dampfturbine	bar	2,5

11.5.3.3 Grünschnitt als Rohstoff

Tabelle 11.22: Zusammensetzung des Rohstoffs Grünschnitt (Schmidt et al., 1993; Hartmann et al., 2000)

Parameter	Einheit	Wert
C	gew%, trocken	41,68
H	gew%, trocken	5,74
O	gew%, trocken	37,21
N	gew%, trocken	1,67
S	gew%, trocken	0,22
Cl	gew%, trocken	0,98
Asche	gew%, trocken	12,5
Wasser	gew%, roh	88,0
Unterer Heizwert	MJ/kg, trocken	17,2

Tabelle 11.23: Eingabedaten für die Simulation der Biogasanlage mit Grünschnitt

Parameter	Einheit	Wert
Temperatur Substratstrom	°C	15
Druck Substratstrom	bar	1,06
Temperatur Wasser zu Maischebehälter	°C	5
Druck Wasser zu Maischebehälter	bar	2
Temperatur Sauerstoff zu biologischer Entschwefelung	°C	20
Druck Sauerstoff zu biologischer Entschwefelung	bar	1,013
operating_p Maischebehälter	bar	1,05
operating_t Maischebehälter	°C	32,2
q_demand Maischebehälter	kW	0
Massenstrom Austritt Maischebehälter	kg/s	1,59
Feststoffgehalt Austritt Maischebehälter	kg/kg	0,09
operating_p Biogasfermenter	bar	1,005
operating_t Biogasfermenter	°C	35
prod_CH4 Biogasfermenter	-	0,45
residual_S Biogasfermenter	-	0,85
q_demand Biogasfermenter	kW	0
operating_p Nachgärbehälter	bar	1,004
operating_t Nachgärbehälter	°C	35
prod_CO2 Nachgärbehälter	-	0,04
residual_S Nachgärbehälter	-	0,85
q_demand Nachgärbehälter	kW	0
CH_4-Gehalt Biogas Austritt Nachgärbehälter	vol%, roh	60
Gasausbeute pro t Frischmasse Substrat Austritt Nachgärbehälter	Nm^3/t	615
trickling_density biologische Entschwefelungs-kolonne	$m^3/(m^2/h)$	2

Tabelle 11.23: Eingabedaten für die Simulation der Biogasanlage mit Grünschnitt (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
area biologische Entschwefelungskolonne	m^2	8
H_2S-Gehalt Biogas Austritt biologische Entschwefelungskolonne	ppmv, roh	50
O_2-Gehalt Biogas Austritt biologische Entschwefelungskolonne	vol%, roh	1

Tabelle 11.24: Eingabedaten für die Simulation der on-site Reformierung von Biogas aus Grünschnitt

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Temperatur Verbrennungsluft	°C	20
Temperatur Prozesswasser Dampfkreislauf	°C	10
Druck Prozesswasser Dampfkreislauf	bar	3
Prozessparameter		
Temperatur Gas Eintritt Entschwefelung	°C	379
Druckverlust Entschwefelung	bar	0
H2S_removal Entschwefelung	%	99
H2_to_S Entschwefelung	mol/mol	10
Temperatur Gas Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Gas Eintritt Dampfreformer	bar	30
Temperatur Dampf Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Dampf Eintritt Dampfreformer	bar	30
temperature Dampfreformer	°C	880
delta_p_reformer Dampfreformer	bar	9
H2O_C_relation Dampfreformer	mol/mol	3,3
delta_p_air_comb Dampfreformer	bar	0
delta_p_comb Dampfreformer	bar	0
lambda_comb Dampfreformer	kg/kg	1,05
C2H6_to_CO Dampfreformer	%	90
C3H8_to_CO Dampfreformer	%	90
CH4_to_CO2 Dampfreformer	%	1
CH4_CO2_to_CO Dampfreformer	%	3
CH4_3CO2_to_CO Dampfreformer	%	0,01
CO_to_CO2 Dampfreformer	%	4
CH4_toCOEqu Dampfreformer	-	0,66
Temperatur Eintritt Shiftreaktor	°C	330
pressure_drop Shiftreaktor	bar	0
FracEqu Shiftreaktor	-	0,75
Temperatur Gas Eintritt Kondensator	°C	320
Temperatur Gas Austritt Kondensator	°C	40
pressure_drop PSA	bar	0
p_desorb PSA	bar	1
H2_exit_wet PSA	vol%	99,999
H2_recovery PSA	%	74
H2_flushing PSA	%	10
Temperatur Rauchgas Austritt Dampfreformer	°C	920

Tabelle 11.24: Eingabedaten für die Simulation der on-site Reformierung von Biogas aus Grünschnitt (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
Prozessparameter		
Temperatur Rauchgas Austritt Anlage	°C	140
Isentroper Wirkungsgrad Dampfturbine	-	0,7816
Druck Dampf Austritt Dampfturbine	bar	2,5

Tabelle 11.25: Eingabedaten für die Simulation der CO_2-Abtrennung und on-site Reformierung von Biogas aus Grünschnitt

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Temperatur Verbrennungsluft	°C	20
Temperatur Prozesswasser Dampfkreislauf	°C	10
Druck Prozesswasser Dampfkreislauf	bar	3
Prozessparameter		
Druck nach erster Stufe Kompressor Membrananlage	bar	6
Druck nach zweiter Stufe Kompressor Membrananlage	bar	9
Temperatur nach zweiter Stufe Kompressor Membrananlage	°C	110
Temperatur Gas Austritt Kondensator Membrananlage	°C	10
Temperatur Gas Austritt Wiederaufwärmung Membrananlage	°C	35
delta_p_gas Membranmodule	bar	4
delta_p_CO2 Membranmodule	bar	5
CO2_loss Membranmodule	vol%	2
CH4_loss Membranmodule	vol%	4,5
H_2O-Gehalt Austritt Retentat Membranmodule	ppmv	5
O_2-Gehalt Austritt Retentat Membranmodule	vol%	0,4
Temperatur Gas Eintritt Entschwefelung	°C	370
Druckverlust Entschwefelung	bar	0
H2S_removal Entschwefelung	%	99
H2_to_S Entschwefelung	mol/mol	10
Temperatur Gas Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Gas Eintritt Dampfreformer	bar	30
Temperatur Dampf Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Dampf Eintritt Dampfreformer	bar	30
temperature Dampfreformer	°C	880
delta_p_reformer Dampfreformer	bar	9
H2O_C_relation Dampfreformer	mol/mol	3,3
delta_p_air_comb Dampfreformer	bar	0
delta_p_comb Dampfreformer	bar	0
lambda_comb Dampfreformer	kg/kg	1,05
C2H6_to_CO Dampfreformer	%	90

Tabelle 11.25: Eingabedaten für die Simulation der CO2-Abtrennung und on-site Reformierung von Biogas aus Grünschnitt (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
Prozessparameter		
C3H8_to_CO Dampfreformer	%	90
CH4_to_CO2 Dampfreformer	%	7
CH4_CO2_to_CO Dampfreformer	%	-0,8
CH4_3CO2_to_CO Dampfreformer	%	-2,0
CO_to_CO2 Dampfreformer	%	4
CH4_toCOEqu Dampfreformer	-	0,8
Temperatur Eintritt Shiftreaktor	°C	330
pressure_drop Shiftreaktor	bar	0
FracEqu Shiftreaktor	-	0,75
Temperatur Gas Eintritt Kondensator	°C	320
Temperatur Gas Austritt Kondensator	°C	40
pressure_drop PSA	bar	0
p_desorb PSA	bar	1
H2_exit_wet PSA	vol%	99,999
H2_recovery PSA	%	74
H2_flushing PSA	%	10
Temperatur Rauchgas Austritt Dampfreformer	°C	920
Temperatur Rauchgas Austritt Anlage	°C	140
Isentroper Wirkungsgrad Dampfturbine	-	0,7816
Druck Dampf Austritt Dampfturbine	bar	2,5

Tabelle 11.26: Eingabedaten für die Simulation der zentralen Reformierung von Biogas aus Grünschnitt

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Temperatur Verbrennungsluft	°C	20
Temperatur Prozesswasser Dampfkreislauf	°C	10
Druck Prozesswasser Dampfkreislauf	bar	3
Prozessparameter		
Druck nach erster Stufe Kompressor Membrananlage	bar	6
Druck nach zweiter Stufe Kompressor Membrananlage	bar	9
Temperatur nach zweiter Stufe Kompressor Membrananlage	°C	110
Temperatur Gas Austritt Kondensator Membrananlage	°C	10
Temperatur Gas Austritt Wiederaufwärmung Membrananlage	°C	35
delta_p Entschwefelung Membrananlage	bar	0
H2S_removal Entschwefelung Membrananlage	%	99
delta_p_gas Membranmodule	bar	4
delta_p_CO2 Membranmodule	bar	5

Tabelle 11.26: Eingabedaten für die Simulation der zentralen Reformierung von Biogas aus Grünschnitt (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
Prozessparameter		
CO2_loss Membranmodule	vol%	2
CH4_loss Membranmodule	vol%	4,5
H_2O-Gehalt Austritt Retentat Membranmodule	ppmv	5
O_2-Gehalt Austritt Retentat Membranmodule	vol%	0,4
Druck Austritt Hochdruckkompressor	bar	32
Temperatur Gas aus Erdgasnetz	°C	30
Druck Gas aus Erdgasnetz	bar	30
Temperatur Gas Eintritt Entschwefelung	°C	370
Druckverlust Entschwefelung	bar	0
H2S_removal Entschwefelung	%	99
H2_to_S Entschwefelung	mol/mol	10
Temperatur Gas Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Gas Eintritt Dampfreformer	bar	30
Temperatur Dampf Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Dampf Eintritt Dampfreformer	bar	30
temperature Dampfreformer	°C	880
delta_p_reformer Dampfreformer	bar	9
H2O_C_relation Dampfreformer	mol/mol	3,3
delta_p_air_comb Dampfreformer	bar	0
delta_p_comb Dampfreformer	bar	0
lambda_comb Dampfreformer	kg/kg	1,05
C2H6_to_CO Dampfreformer	%	90
C3H8_to_CO Dampfreformer	%	90
CH4_to_CO2 Dampfreformer	%	14
CH4_CO2_to_CO Dampfreformer	%	-0,10
CH4_3CO2_to_CO Dampfreformer	%	-0,70
CO_to_CO2 Dampfreformer	%	9
CH4_toCOEqu Dampfreformer	-	0,998
Temperatur Eintritt Shiftreaktor	°C	330
pressure_drop Shiftreaktor	bar	0
FracEqu Shiftreaktor	-	0,9
Temperatur Gas Eintritt Kondensator	°C	320
Temperatur Gas Austritt Kondensator	°C	40
pressure_drop PSA	bar	0
p_desorb PSA	bar	1
H2_exit_wet PSA	vol%	99,999
H2_recovery PSA	%	81
H2_flushing PSA	%	10
Temperatur Rauchgas Austritt Dampfreformer	°C	920
Temperatur Rauchgas Austritt Anlage	°C	140
Isentroper Wirkungsgrad Dampfturbine	-	0,7818
Druck Dampf Austritt Dampfturbine	bar	2,5

11.5.3.4 Biotonnenabfälle als Rohstoff

Tabelle 11.27: Zusammensetzung des Rohstoffs Biotonnenabfälle (Reisinger, 1997; Institut für Energetik und Umwelt et al., 2006)

Parameter	Einheit	Wert
C	gew%, trocken	30,22
H	gew%, trocken	3,71
O	gew%, trocken	25,6
N	gew%, trocken	0,43
S	gew%, trocken	0,03
Cl	gew%, trocken	0,01
Asche	gew%, trocken	40,0
Wasser	gew%, roh	60,0
Unterer Heizwert	MJ/kg, trocken	15,9

Tabelle 11.28: Eingabedaten für die Simulation der Biogasanlage mit Biotonnenabfällen

Parameter	Einheit	Wert
Temperatur Substratstrom	°C	15
Druck Substratstrom	bar	1,06
Temperatur Wasser zu Maischebehälter	°C	5
Druck Wasser zu Maischebehälter	bar	2
Temperatur Sauerstoff zu biologischer Entschwefelung	°C	20
Druck Sauerstoff zu biologischer Entschwefelung	bar	1,013
operating_p Maischebehälter	bar	1,05
operating_t Maischebehälter	°C	32,2
q_demand Maischebehälter	kW	0
Massenstrom Austritt Maischebehälter	kg/s	2,53
Feststoffgehalt Austritt Maischebehälter	kg/kg	0,10
operating_p Biogasfermenter	bar	1,005
operating_t Biogasfermenter	°C	35
prod_CH4 Biogasfermenter	-	0,45
residual_S Biogasfermenter	-	0,85
q_demand Biogasfermenter	kW	0
operating_p Nachgärbehälter	bar	1,004
operating_t Nachgärbehälter	°C	35
prod_CO2 Nachgärbehälter	-	0,14
residual_S Nachgärbehälter	-	0,85
q_demand Nachgärbehälter	kW	0
CH_4-Gehalt Biogas Austritt Nachgärbehälter	vol%, roh	61,5
Gasausbeute pro t Frischmasse Substrat Austritt Nachgärbehälter	Nm^3/t	100
trickling_density biologische Entschwefelungs-kolonne	$m^3/(m^2/h)$	2

Tabelle 11.28: Eingabedaten für die Simulation der Biogasanlage mit Biotonnenabfällen (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
area biologische Entschwefelungskolonne	m^2	8
H_2S-Gehalt Biogas Austritt biologische Entschwefelungskolonne	ppmv, roh	50
O_2-Gehalt Biogas Austritt biologische Entschwefelungskolonne	vol%, roh	1

Tabelle 11.29: Eingabedaten für die Simulation der on-site Reformierung von Biogas aus Biotonnenabfällen

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Temperatur Verbrennungsluft	°C	20
Temperatur Prozesswasser Dampfkreislauf	°C	10
Druck Prozesswasser Dampfkreislauf	bar	3
Prozessparameter		
Temperatur Gas Eintritt Entschwefelung	°C	379
Druckverlust Entschwefelung	bar	0
H2S_removal Entschwefelung	%	99
H2_to_S Entschwefelung	mol/mol	10
Temperatur Gas Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Gas Eintritt Dampfreformer	bar	30
Temperatur Dampf Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Dampf Eintritt Dampfreformer	bar	30
temperature Dampfreformer	°C	880
delta_p_reformer Dampfreformer	bar	9
H2O_C_relation Dampfreformer	mol/mol	3,3
delta_p_air_comb Dampfreformer	bar	0
delta_p_comb Dampfreformer	bar	0
lambda_comb Dampfreformer	kg/kg	1,05
C2H6_to_CO Dampfreformer	%	90
C3H8_to_CO Dampfreformer	%	90
CH4_to_CO2 Dampfreformer	%	1
CH4_CO2_to_CO Dampfreformer	%	3
CH4_3CO2_to_CO Dampfreformer	%	0,01
CO_to_CO2 Dampfreformer	%	4
CH4_toCOEqu Dampfreformer	-	0,66
Temperatur Eintritt Shiftreaktor	°C	330
pressure_drop Shiftreaktor	bar	0
FracEqu Shiftreaktor	-	0,75
Temperatur Gas Eintritt Kondensator	°C	320
Temperatur Gas Austritt Kondensator	°C	40
pressure_drop PSA	bar	0
p_desorb PSA	bar	1
H2_exit_wet PSA	vol%	99,999
H2_recovery PSA	%	74
H2_flushing PSA	%	10

Tabelle 11.29: Eingabedaten für die Simulation der on-site Reformierung von Biogas aus Biotonnenabfällen (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
Prozessparameter		
Temperatur Rauchgas Austritt Dampfreformer	°C	920
Temperatur Rauchgas Austritt Anlage	°C	140
Isentroper Wirkungsgrad Dampfturbine	-	0,7816
Druck Dampf Austritt Dampfturbine	bar	2,5

Tabelle 11.30: Eingabedaten für die Simulation der CO_2-Abtrennung und on-site Reformierung von Biogas aus Biotonnenabfällen

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Temperatur Verbrennungsluft	°C	20
Temperatur Prozesswasser Dampfkreislauf	°C	10
Druck Prozesswasser Dampfkreislauf	bar	3
Prozessparameter		
Druck nach erster Stufe Kompressor Membrananlage	bar	6
Druck nach zweiter Stufe Kompressor Membrananlage	bar	9
Temperatur nach zweiter Stufe Kompressor Membrananlage	°C	110
Temperatur Gas Austritt Kondensator Membrananlage	°C	10
Temperatur Gas Austritt Wiederaufwärmung Membrananlage	°C	35
delta_p_gas Membranmodule	bar	4
delta_p_CO2 Membranmodule	bar	5
CO2_loss Membranmodule	vol%	2
CH4_loss Membranmodule	vol%	4,5
H_2O-Gehalt Austritt Retentat Membranmodule	ppmv	5
O_2-Gehalt Austritt Retentat Membranmodule	vol%	0,4
Temperatur Gas Eintritt Entschwefelung	°C	370
Druckverlust Entschwefelung	bar	0
H2S_removal Entschwefelung	%	99
H2_to_S Entschwefelung	mol/mol	10
Temperatur Gas Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Gas Eintritt Dampfreformer	bar	30
Temperatur Dampf Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Dampf Eintritt Dampfreformer	bar	30
temperature Dampfreformer	°C	880
delta_p_reformer Dampfreformer	bar	9
H2O_C_relation Dampfreformer	mol/mol	3,3
delta_p_air_comb Dampfreformer	bar	0
delta_p_comb Dampfreformer	bar	0
lambda_comb Dampfreformer	kg/kg	1,05

Tabelle 11.30: Eingabedaten für die Simulation der CO2-Abtrennung und on-site Reformierung von Biogas aus Biotonnenabfällen (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
Prozessparameter		
C2H6_to_CO Dampfreformer	%	90
C3H8_to_CO Dampfreformer	%	90
CH4_to_CO2 Dampfreformer	%	7
CH4_CO2_to_CO Dampfreformer	%	-0,8
CH4_3CO2_to_CO Dampfreformer	%	-2,0
CO_to_CO2 Dampfreformer	%	4
CH4_toCOEqu Dampfreformer	-	0,8
Temperatur Eintritt Shiftreaktor	°C	330
pressure_drop Shiftreaktor	bar	0
FracEqu Shiftreaktor	-	0,75
Temperatur Gas Eintritt Kondensator	°C	320
Temperatur Gas Austritt Kondensator	°C	40
pressure_drop PSA	bar	0
p_desorb PSA	bar	1
H2_exit_we" PSA	vol%	99,999
H2_recovery PSA	%	74
H2_flushing PSA	%	10
Temperatur Rauchgas Austritt Dampfreformer	°C	920
Temperatur Rauchgas Austritt Anlage	°C	140
Isentroper Wirkungsgrad Dampfturbine	-	0,7816
Druck Dampf Austritt Dampfturbine	bar	2,5

Tabelle 11.31: Eingabedaten für die Simulation der zentralen Reformierung von Biogas aus Biotonnenabfällen

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Temperatur Verbrennungsluft	°C	20
Temperatur Prozesswasser Dampfkreislauf	°C	10
Druck Prozesswasser Dampfkreislauf	bar	3
Prozessparameter		
Druck nach erster Stufe Kompressor Membrananlage	bar	6
Druck nach zweiter Stufe Kompressor Membrananlage	bar	9
Temperatur nach zweiter Stufe Kompressor Membrananlage	°C	110
Temperatur Gas Austritt Kondensator Membrananlage	°C	10
Temperatur Gas Austritt Wiederaufwärmung Membrananlage	°C	35
delta_p Entschwefelung Membrananlage	bar	0
H2S_removal Entschwefelung Membrananlage	%	99
delta_p_gas Membranmodule	bar	4

Tabelle 11.31: Eingabedaten für die Simulation der zentralen Reformierung von Biogas aus Biotonnenabfällen (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
Prozessparameter		
delta_p_CO2 Membranmodule	bar	5
CO2_loss Membranmodule	vol%	2
CH4_loss Membranmodule	vol%	4,5
H_2O-Gehalt Austritt Retentat Membranmodule	ppmv	5
O_2-Gehalt Austritt Retentat Membranmodule	vol%	0,4
Druck Austritt Hochdruckkompressor	bar	32
Temperatur Gas aus Erdgasnetz	°C	30
Druck Gas aus Erdgasnetz	bar	30
Temperatur Gas Eintritt Entschwefelung	°C	370
Druckverlust Entschwefelung	bar	0
H2S_removal Entschwefelung	%	99
H2_to_S Entschwefelung	mol/mol	10
Temperatur Gas Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Gas Eintritt Dampfreformer	bar	30
Temperatur Dampf Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Dampf Eintritt Dampfreformer	bar	30
temperature Dampfreformer	°C	880
delta_p_reformer Dampfreformer	bar	9
H2O_C_relation Dampfreformer	mol/mol	3,3
delta_p_air_comb Dampfreformer	bar	0
delta_p_comb Dampfreformer	bar	0
lambda_comb Dampfreformer	kg/kg	1,05
C2H6_to_CO Dampfreformer	%	90
C3H8_to_CO Dampfreformer	%	90
CH4_to_CO2 Dampfreformer	%	14
CH4_CO2_to_CO Dampfreformer	%	-0,10
CH4_3CO2_to_CO Dampfreformer	%	-0,70
CO_to_CO2 Dampfreformer	%	9
CH4_toCOEqu Dampfreformer	-	0,998
Temperatur Eintritt Shiftreaktor	°C	330
pressure_drop Shiftreaktor	bar	0
FracEqu Shiftreaktor	-	0,9
Temperatur Gas Eintritt Kondensator	°C	320
Temperatur Gas Austritt Kondensator	°C	40
pressure_drop PSA	bar	0
p_desorb PSA	bar	1
H2_exit_wet PSA	vol%	99,999
H2_recovery PSA	%	81
H2_flushing PSA	%	10
Temperatur Rauchgas Austritt Dampfreformer	°C	920
Temperatur Rauchgas Austritt Anlage	°C	140
Isentroper Wirkungsgrad Dampfturbine	-	0,7818
Druck Dampf Austritt Dampfturbine	bar	2,5

11.5.4 Dampfreformierung von Vergasergas

Die Zusammensetzung und der Heizwert des Rohstoffs Holzhackschnitzel können der Tabelle 4.11 (siehe Kapitel 4.4) entnommen werden. Der Großteil der Eingabedaten für die Simulation der Vergasungsanlage basiert auf veröffentlichten Literaturdaten (Hofbauer et al., 2002; Hofbauer, 2005b; Pröll et al., 2005b; Pröll et al., 2007a; Pröll et al., 2007b).

Tabelle 11.32: Eingabedaten für die Simulation der Biomassevergsungsanlage

Parameter	Einheit	Wert
Temperatur Biomassestrom	°C	5
Druck Biomassestrom	bar	1
Dichte Biomassestrom	kg/m³	300
Thermische Leistung Vergaser	kW	7.771
Energieverlust Vergaser	kW	50
Druck Gas Austritt Vergaser	bar	0,98
Temperatur Gas Austritt Vergaser	°C	850
Staubgehalt Gas Austritt Vergaser	g/Nm³	22,7
Aschegehalt Gas Austritt Vergaser	g/Nm³	7,3
Teergehalt Gas Austritt Vergaser	g/Nm³	3,5
C_2H_4-Gehalt Gas Austritt Vergaser	vol%, trocken	2,0
C_2H_6-Gehalt Gas Austritt Vergaser	vol%, trocken	0,3
C_3H_8-Gehalt Gas Austritt Vergaser	vol%, trocken	0,6
CH_4-Gehalt Gas Austritt Vergaser	vol%, trocken	10,5
CO-Gehalt Gas Austritt Vergaser	vol%, trocken	25,0
HCN-Gehalt Gas Austritt Vergaser	vol%, trocken	0
N_2-Gehalt Gas Austritt Vergaser	vol%, trocken	1,6
N_2O-Gehalt Gas Austritt Vergaser	vol%, trocken	0
NO-Gehalt Gas Austritt Vergaser	vol%, trocken	0
O_2-Gehalt Gas Austritt Vergaser	vol%, trocken	0
SO_2-Gehalt Gas Austritt Vergaser	vol%, trocken	0
C-Gehalt im Teer Gas Austritt Vergaser	gew%	94
H-Gehalt im Teer Gas Austritt Vergaser	gew%	6
Temperatur Gas Austritt Gaskühlung	°C	153
Temperatur Gas Austritt Staubabscheidung	°C	148
Staubgehalt Gas Austritt Staubabscheidung	g/Nm³	0,004
Aschegehalt Gas Austritt Staubabscheidung	g/Nm³	0,001
Teergehalt Gas Austritt Staubabscheidung	g/Nm³	4,1
Druck Gas Austritt Teerwäscher 1	bar	0,936
Temperatur Gas Austritt Teerwäscher 1	°C	40
Teergehalt Gas Austritt Teerwäscher 1	g/Nm³	0,01
Druck Gas Austritt Verdichter	bar	1,08
Temperatur Austritt Verdichter	°C	62
NH_3-Gahalt Gas Austritt Verdichter	vol%, trocken	0,04
O_2-Gehalt Gas Austritt Verdichter	vol%, trocken	$1{,}0*10^{-6}$
Teerabscheidewirkungsgrad Teerwäscher 2	%	99
Temperatur Gas Austritt Teerwäscher 2	°C	40

Tabelle 11.32: Eingabedaten für die Simulation der Biomassevergsungsanlage (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
Volumenstrom Gas zu Verbrennungsreaktor	Nm^3/h	239
Druck Gas Eintritt Verbrennungsreaktor	bar	1,1654
Lambda Verbrennungsreaktor	kg/kg	1,05
Wärmeverlust Verbrennungsreaktor	kW	160
Druck Gas Austritt Verbrennungsreaktor	bar	0,98
Temperatur Gas Austritt Verbrennungsreaktor	°C	950

Tabelle 11.33: Eingabedaten für die Simulation der on-site Reformierung von Vergasergas

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Temperatur Verbrennungsluft	°C	20
Temperatur Prozesswasser Dampfkreislauf	°C	10
Druck Prozesswasser Dampfkreislauf	bar	3
Prozessparameter		
Temperatur Gas Eintritt Entschwefelung	°C	370
Druckverlust Entschwefelung	bar	0
H2S_removal Entschwefelung	%	99
HCl_removal Entschwefelung	%	98
Temperatur Gas Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Gas Eintritt Dampfreformer	bar	30
Temperatur Dampf Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Dampf Eintritt Dampfreformer	bar	30
temperature Dampfreformer	°C	880
delta_p_reformer Dampfreformer	bar	9
H2O_C_relation Dampfreformer	mol/mol	3,7
delta_p_air_comb Dampfreformer	bar	0
delta_p_comb Dampfreformer	bar	0
lambda_comb Dampfreformer	kg/kg	1,05
CH4_to_CO Dampfreformer	%	88,5
C2H4_to_CO Dampfreformer	%	99
C2H6_to_CO Dampfreformer	%	99
C3H8_to_CO Dampfreformer	%	99
CH4_to_CO2 Dampfreformer	%	0,001
CH4_CO2_to_CO Dampfreformer	%	-0,001
CH4_3CO2_to_CO Dampfreformer	%	-0,0001
CO_to_H2_CO2 Dampfreformer	%	20
Temperatur Eintritt Shiftreaktor	°C	330
pressure_drop Shiftreaktor	bar	0
FracEqu Shiftreaktor	-	0,75
Temperatur Gas Eintritt Kondensator	°C	320
Temperatur Gas Austritt Kondensator	°C	40
pressure_drop PSA	bar	0
p_desorb PSA	bar	1
H2_exit_wet PSA	vol%	99,999
H2_recovery PSA	%	74

Tabelle 11.33: Eingabedaten für die Simulation der on-site Reformierung von Vergasergas (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
Prozessparameter		
H2_flushing PSA	%	10
Temperatur Rauchgas Austritt Dampfreformer	°C	920
Temperatur Rauchgas Austritt Anlage	°C	140
Isentroper Wirkungsgrad Dampfturbine	-	0,7816
Druck Dampf Austritt Dampfturbine	bar	2,5

Tabelle 11.34: Eingabedaten für die Simulation der CO_2-Abtrennung und on-site Reformierung von Vergasergas

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Temperatur Verbrennungsluft	°C	20
Temperatur Prozesswasser Dampfkreislauf	°C	10
Druck Prozesswasser Dampfkreislauf	bar	3
Prozessparameter		
delta_p Aminwäscher	bar	0,26
temperature_diff Aminwäscher	°C	15
rem_eff_CO2 Aminwäscher	-	0,9
rem_eff_SO2 Aminwäscher	-	0,995
rem_eff_HCl Aminwäscher	-	0,95
w_MEA Aminwäscher	kg/kg	0,3
CO2_loading_in Aminwäscher	mol/mol	0,22
CO2_loading_exit Aminwäscher	mol/mol	0,5
fresh_MEA_CO2 Aminwäscher	kg/kg	0,0015
Temperatur Gas Eintritt Entschwefelung	°C	370
Druckverlust Entschwefelung	bar	0
H2S_removal Entschwefelung	%	99
HCl_removal Entschwefelung	%	98
Temperatur Gas Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Gas Eintritt Dampfreformer	bar	30
Temperatur Dampf Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Dampf Eintritt Dampfreformer	bar	30
temperature Dampfreformer	°C	880
delta_p_reformer Dampfreformer	bar	9
H2O_C_relation Dampfreformer	mol/mol	3,7
delta_p_air_comb Dampfreformer	bar	0
delta_p_comb Dampfreformer	bar	0
lambda_comb Dampfreformer	kg/kg	1,05
CH4_to_CO Dampfreformer	%	88,5
C2H4_to_CO Dampfreformer	%	99
C2H6_to_CO Dampfreformer	%	99
C3H8_to_CO Dampfreformer	%	99
CH4_to_CO2 Dampfreformer	%	0,0001
CH4_CO2_to_CO Dampfreformer	%	-0,005

Tabelle 11.34: Eingabedaten für die Simulation der CO2-Abtrennung und on-site Reformierung von Vergasergas (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
Prozessparameter		
CH4_3CO2_to_CO Dampfreformer	%	-0,001
CO_to_H2_CO2 Dampfreformer	%	33
Temperatur Eintritt Shiftreaktor	°C	330
pressure_drop Shiftreaktor	bar	0
FracEqu Shiftreaktor	-	0,75
Temperatur Gas Eintritt Kondensator	°C	320
Temperatur Gas Austritt Kondensator	°C	40
pressure_drop PSA	bar	0
p_desorb PSA	bar	1
H2_exit_wet PSA	vol%	99,999
H2_recovery PSA	%	74
H2_flushing PSA	%	10
Temperatur Rauchgas Austritt Dampfreformer	°C	920
Temperatur Rauchgas Austritt Anlage	°C	140
Isentroper Wirkungsgrad Dampfturbine	-	0,7816
Druck Dampf Austritt Dampfturbine	bar	2,5

Tabelle 11.35: Eingabedaten für die Simulation der zentralen Reformierung von Vergasergas

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Temperatur Verbrennungsluft	°C	20
Temperatur Prozesswasser Dampfkreislauf	°C	10
Druck Prozesswasser Dampfkreislauf	bar	3
Prozessparameter		
Tempertaur Gas Eintritt Entschwefelung vor Methanierung	°C	370
delta_p Entschwefelung vor Methanierung	bar	0,01
H2S_removal Entschwefelung vor Methanierung	%	99
HCl_removal Entschwefelung vor Methanierung	%	98
temperature Methanierung	°C	350
pressure_drop Methanierung	bar	0,02
tar_conversion Methanierung	mass%	99,1
C2H4_to_CO Methanierung	%	99
C2H6_to_CO Methanierung	%	99
C3H8_to_CO Methanierung	%	99
CO_to_CH4_3CO2 Methanierung	%	2,5
CO2_to_CH4 Methanierung	%	-5
CH_4-Gehalt Gas Austritt Methanierung	vol%, trocken	41,0
CO-Gehalt Gas Austritt Methanierung	vol%, trocken	0,49
CO_2-Gehalt Gas Austritt Methanierung	vol%, trocken	48,0
Druck nach erster Stufe Kompressor Membrananlage	bar	6

Tabelle 11.35: Eingabedaten für die Simulation der zentralen Reformierung von Vergasergas (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
Prozessparameter		
Druck nach zweiter Stufe Kompressor Membrananlage	bar	9
Temperatur nach zweiter Stufe Kompressor Membrananlage	°C	110
Temperatur Gas Austritt Kondensator Membrananlage	°C	10
Temperatur Gas Austritt Wiederaufwärmung Membrananlage	°C	35
delta_p_gas Membranmodule	bar	4
delta_p_CO2 Membranmodule	bar	5
CO2_loss Membranmodule	vol%	2
CH4_loss Membranmodule	vol%	4,5
O2_separation Membranmodule	%	95
H_2O-Gehalt Austritt Retentat Membranmodule	ppmv	5
Druck Austritt Hochdruckkompressor	bar	32
Temperatur Gas aus Erdgasnetz	°C	30
Druck Gas aus Erdgasnetz	bar	30
Temperatur Gas Eintritt Entschwefelung	°C	370
Druckverlust Entschwefelung	bar	0
H2S_removal Entschwefelung	%	99
H2_to_S Entschwefelung	mol/mol	10
HCl_removal Entschwefelung	%	98
Temperatur Gas Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Gas Eintritt Dampfreformer	bar	30
Temperatur Dampf Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Dampf Eintritt Dampfreformer	bar	30
temperature Dampfreformer	°C	880
delta_p_reformer Dampfreformer	bar	9
H2O_C_relation Dampfreformer	mol/mol	3,3
delta_p_air_comb Dampfreformer	bar	0
delta_p_comb Dampfreformer	bar	0
lambda_comb Dampfreformer	kg/kg	1,05
CH4_to_CO Dampfreformer	%	76,5
C2H4_to_CO Dampfreformer	%	99
C2H6_to_CO Dampfreformer	%	99
C3H8_to_CO Dampfreformer	%	99
CH4_to_CO2 Dampfreformer	%	14
CH4_CO2_to_CO Dampfreformer	%	-0,02
CH4_3CO2_to_CO Dampfreformer	%	-0,00002
CO_to_H2_CO2 Dampfreformer	%	10,5
Temperatur Eintritt Shiftreaktor	°C	330
pressure_drop Shiftreaktor	bar	0
FracEqu Shiftreaktor	-	0,9
Temperatur Gas Eintritt Kondensator	°C	320
Temperatur Gas Austritt Kondensator	°C	40

Tabelle 11.35: Eingabedaten für die Simulation der zentralen Reformierung von Vergasergas (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
Prozessparameter		
pressure_drop PSA	bar	0
p_desorb PSA	bar	1
H2_exit_wet PSA	vol%	99,999
H2_recovery PSA	%	81
H2_flushing PSA	%	10
Temperatur Rauchgas Austritt Dampfreformer	°C	920
Temperatur Rauchgas Austritt Anlage	°C	140
Isentroper Wirkungsgrad Dampfturbine	-	0,7818
Druck Dampf Austritt Dampfturbine	bar	2,5

11.5.5 Gekoppelte Dunkel- und Photofermentation

11.5.5.1 Maiskörner als Rohstoff

Tabelle 11.36: Zusammensetzung des Rohstoffs Maiskorn (Schmidt et al., 1993 bzw. Annahmen)

Parameter	Einheit	Wert
C	gew%, trocken	46,43
H	gew%, trocken	5,435
O	gew%, trocken	40,99
N	gew%, trocken	0,595
S	gew%, trocken	0,045
Cl	gew%, trocken	0,91
Asche	gew%, trocken	5,595
Wasser	gew%, roh	15,0
Glukose und Stärke	gew%, trocken	70,0
Unterer Heizwert	MJ/kg, trocken	17,11

Tabelle 11.37: Eingabedaten für die Simulation der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation von Maiskörnern für 80% Wirkungsgrad in Fermentern, 80% H_2-Recovery in PSA-Anlage

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Temperatur Substratstrom	°C	20
Druck Substratstrom	bar	1
Massenstrom Substratstrom	kg/s	0,3761
glucose_C Substratstrom	kg/kg	0,603083
glucose_H Substratstrom	kg/kg	0,864692
glucose_O Substratstrom	kg/kg	0,909960
Temperatur Verdünnungswasser	°C	35

Tabelle 11.37: Eingabedaten für die Simulation der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation von Maiskörnern für 80% Wirkungsgrad in Fermentern, 80% H2-Recovery in PSA-Anlage (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Druck Verdünnungswasser	bar	1
Massenstrom Verdünnungswasser	kg/s	16,70
Prozessparameter		
pressure Hydrolyse	bar	1
temperature Hydrolyse	°C	60
q_demand Hydrolyse	kW	0
separ_efficiency Feststoffabtrennung	-	0,9
drymatter_residue Feststoffabtrennung	kg/kg	0,7
Temperatur Substrat Eintritt Dunkelfermenter	°C	70
pressure Dunkelfermenter	bar	0,5
temperature Dunkelfermenter	°C	70
glucose_to_acet Dunkelfermenter	%	80
glucose_to_butyr Dunkelfermenter	%	0
q_demand Dunkelfermenter	kW	0
Temperatur Gas Austritt Kondensator nach Dunkelfermenter	°C	15
Druck Gas Austritt Verdichter nach Dunkelfermenter	bar	1
Temperatur Substrat Eintritt Photofermenter	°C	35
pressure Photofermenter	bar	1
temperature Photofermenter	°C	35
acet_to_H2 Photofermenter	%	80
butyr_to_H2 Photofermenter	%	0
q_demand Photofermenter	kW	0
Druck Gas Austritt Verdichter nach Photofermenter	bar	1,2
pressure_drop PSA-Anlage	bar	0
p_desorb PSA-Anlage	bar	0,07
H2_exit_wet PSA-Anlage	vol%	99,999
H2_recovery PSA-Anlage	%	80
H2_flushing PSA-Anlage	%	15

Tabelle 11.38: Geänderte Eingabedaten Simulation der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation von Maiskörner für 80% Wirkungsgrad in Fermentern, 95% H_2-Recovery in PSA-Anlage

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Massenstrom Substratstrom	kg/s	0,3167
Massenstrom Verdünnungswasser	kg/s	14,07
Prozessparameter		
glucose_to_acet Dunkelfermenter	%	80
acet_to_H2 Photofermenter	%	80
H2_recovery PSA-Anlage	%	95
H2_flushing PSA-Anlage	%	3

Tabelle 11.39: Geänderte Eingabedaten Simulation der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation von Maiskörner für 100% Wirkungsgrad in Fermentern, 80% H_2-Recovery in der PSA-Anlage

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Massenstrom Substratstrom	kg/s	0,2612
Massenstrom Verdünnungswasser	kg/s	11,60
Prozessparameter		
glucose_to_acet Dunkelfermenter	%	99,9
acet_to_H2 Photofermenter	%	99,9
H2_recovery PSA-Anlage	%	80
H2_flushing PSA-Anlage	%	15

Tabelle 11.40: Geänderte Eingabedaten Simulation der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation von Maiskörner für 100% Wirkungsgrad in Fermentern, 95% H_2-Recovery in der PSA-Anlage

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Massenstrom Substratstrom	kg/s	0,2200
Massenstrom Verdünnungswasser	kg/s	9,769
Prozessparameter		
glucose_to_acet Dunkelfermenter	%	99,9
acet_to_H2 Photofermenter	%	99,9
H2_recovery PSA-Anlage	%	95
H2_flushing PSA-Anlage	%	3

11.5.5.2 Kartoffelschalen als Rohstoff

Tabelle 11.41: Zusammensetzung des Rohstoffs Kartoffelschalen (Antal et al., 2000; Suksankraisorn et al., 2003; Claassen et al., 2004; Institut für Energetik und Umwelt et al., 2006)

Parameter	Einheit	Wert
C	gew%, trocken	44,1
H	gew%, trocken	5,7
O	gew%, trocken	37,9
N	gew%, trocken	2,8
S	gew%, trocken	0,3
Asche	gew%, trocken	9,3
Wasser	gew%	89,0
Glukose und Stärke	gew%, trocken	51,9
Unterer Heizwert	MJ/kg, trocken	13,8

Tabelle 11.42: Eingabedaten für die Simulation der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation von Kartoffelschalen für 80% Wirkungsgrad in Fermentern, 80% H_2-Recovery in der PSA-Anlage

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Temperatur Substratstrom	°C	20
Druck Substratstrom	bar	1
Massenstrom Substratstrom	kg/s	3,9198
glucose_C Substratstrom	kg/kg	0,470767
glucose_H Substratstrom	kg/kg	0,611302
glucose_O Substratstrom	kg/kg	0,729676
Temperatur Verdünnungswasser	°C	35
Druck Verdünnungswasser	bar	1
Massenstrom Verdünnungswasser	kg/s	13,3
Prozessparameter		
pressure Hydrolyse	bar	1
temperature Hydrolyse	°C	60
q_demand Hydrolyse	kW	0
separ_efficiency Feststoffabtrennung	-	1
drymatter_residue Feststoffabtrennung	kg/kg	0,4
Temperatur Substrat Eintritt Dunkelfermenter	°C	70
pressure Dunkelfermenter	bar	0,5
temperature Dunkelfermenter	°C	70
glucose_to_acet Dunkelfermenter	%	80
glucose_to_butyr Dunkelfermenter	%	0
q_demand Dunkelfermenter	kW	0
Temperatur Gas Austritt Kondensator nach Dunkelfermenter	°C	15
Druck Gas Austritt Verdichter nach Dunkelfermenter	bar	1
Temperatur Substrat Eintritt Photofermenter	°C	35
pressure Photofermenter	bar	1
temperature Photofermenter	°C	35
acet_to_H2 Photofermenter	%	80
butyr_to_H2 Photofermenter	%	0
q_demand Photofermenter	kW	0
Druck Gas Austritt Verdichter nach Photofermenter	bar	1,2
pressure_drop PSA-Anlage	bar	0
p_desorb PSA-Anlage	bar	0,07
H2_exit_wet PSA-Anlage	vol%	99,999
H2_recovery PSA-Anlage	%	80
H2_flushing PSA-Anlage	%	15

Tabelle 11.43: Geänderte Eingabedaten Simulation der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation von Kartoffelschalen für 80% Wirkungsgrad in Fermentern, 95% H_2-Recovery in der PSA-Anlage

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Massenstrom Substratstrom	kg/s	3,3009
Massenstrom Verdünnungswasser	kg/s	11,2
Prozessparameter		
glucose_to_acet Dunkelfermenter	%	80
acet_to_H2 Photofermenter	%	80
H2_recovery PSA-Anlage	%	95
H2_flushing PSA-Anlage	%	3

Tabelle 11.44: Geänderte Eingabedaten Simulation der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation von Kartoffelschalen für 100% Wirkungsgrad in Fermentern, 80% H_2-Recovery in der PSA-Anlage

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Massenstrom Substratstrom	kg/s	2,7277
Massenstrom Verdünnungswasser	kg/s	9,255
Prozessparameter		
glucose_to_acet Dunkelfermenter	%	99,7
acet_to_H2 Photofermenter	%	99,9
H2_recovery PSA-Anlage	%	80
H2_flushing PSA-Anlage	%	15

Tabelle 11.45: Geänderte Eingabedaten Simulation der gekoppelten Dunkel- und Photofermentation von Kartoffelschalen für 100% Wirkungsgrad in Fermentern, 95% H_2-Recovery in der PSA-Anlage

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Massenstrom Substratstrom	kg/s	2,2970
Massenstrom Verdünnungswasser	kg/s	7,794
Prozessparameter		
glucose_to_acet Dunkelfermenter	%	99,7
acet_to_H2 Photofermenter	%	99,9
H2_recovery PSA-Anlage	%	95
H2_flushing PSA-Anlage	%	3

11.5.6 Gekoppelte Dunkel- und Biogasfermentation

Die Zusammensetzung und der Heizwert des eingesetzten Rohstoffs Kartoffelschalen entsprechen dem Rohstoff, der für die gekoppelte Dunkel- und Photofermentation eingesetzt wurde, und können Tabelle 11.41 in Kapitel 11.5.5.2 entnommen werden.

Tabelle 11.46: Eingabedaten für die Simulation der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation von Kartoffelschalen für 80/70% Wirkungsgrad in den Fermentern und 80% H_2-Recovery in der PSA-Anlage des Dunkelfermenters

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Temperatur Substratstrom	°C	20
Druck Substratstrom	bar	1
Massenstrom Substratstrom	kg/s	3,9198
glucose_C Substratstrom	kg/kg	0,470767
glucose_H Substratstrom	kg/kg	0,611302
glucose_O Substratstrom	kg/kg	0,729676
Temperatur Verdünnungswasser	°C	35
Druck Verdünnungswasser	bar	1
Massenstrom Verdünnungswasser	kg/s	13,3
Prozessparameter		
pressure Hydrolyse	bar	1
temperature Hydrolyse	°C	60
q_demand Hydrolyse	kW	0
separ_efficiency Feststoffabtrennung	-	1
drymatter_residue Feststoffabtrennung	kg/kg	0,4
Temperatur Substrat Eintritt Dunkelfermenter	°C	70
pressure Dunkelfermenter	bar	0,5
temperature Dunkelfermenter	°C	70
glucose_to_acet Dunkelfermenter	%	80
glucose_to_butyr Dunkelfermenter	%	0
glucose_to_biomass Dunkelfermenter	%	15
q_demand Dunkelfermenter	kW	0
Temperatur Gas Austritt Kondensator nach Dunkelfermenter	°C	15
Druck Gas Austritt Verdichter nach Dunkelfermenter	bar	1
Temperatur Gas Eintritt PSA-Anlage	°C	35
pressure_drop PSA-Anlage	bar	0
p_desorb PSA-Anlage	bar	0,35
H2_exit_wet PSA-Anlage	vol%	99,999
H2_recovery PSA-Anlage	%	80
H2_flushing PSA-Anlage	%	15
Temperatur Substrat Eintritt Biogasfermenter	°C	35
pressure Biogasfermenter	bar	1
temperature Biogasfermenter	°C	35

Tabelle 11.46: Eingabedaten für die Simulation der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation von Kartoffelschalen für 80/70% Wirkungsgrad in den Fermentern und 80% H2-Recovery in der PSA-Anlage des Dunkelfermenters (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
Prozessparameter		
prod_CO2 Biogasfermenter	-	0,4
residual_S Biogasfermenter	-	0,95
glucose_to_CH4 Biogasfermenter	%	70
acet_to_CH4 Biogasfermenter	bar	70
butyr_to_CH4 Biogasfermenter	bar	0
other_to_CH4 Biogasfermenter	bar	1,3
q_demand Biogasfermenter	kW	0
CH_4-Gehalt Gas Austritt Biogasfermenter	vol%	0,6039

Tabelle 11.47: Geänderte Eingabedaten für die Simulation der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation von Kartoffelschalen für 80/70% Wirkungsgrad in den Fermentern und 95% H_2-Recovery in der PSA-Anlage des Dunkelfermenters

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Massenstrom Substratstrom	kg/s	3,9198
Massenstrom Verdünnungswasser	kg/s	11,2
Prozessparameter		
glucose_to_acet Dunkelfermenter	%	80
acet_to_CH4 Biogasfermenter	bar	70
H2_recovery PSA-Anlage	%	95
H2_flushing PSA-Anlage	%	3

Tabelle 11.48: Geänderte Eingabedaten für die Simulation der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation von Kartoffelschalen für 100/100% Wirkungsgrad in den Fermentern und 80% H_2-Recovery in der PSA-Anlage des Dunkelfermenters

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Massenstrom Substratstrom	kg/s	3,1643
Massenstrom Verdünnungswasser	kg/s	10,831
Prozessparameter		
glucose_to_acet Dunkelfermenter	%	99,1
acet_to_CH4 Biogasfermenter	bar	100
H2_recovery PSA-Anlage	%	80
H2_flushing PSA-Anlage	%	15

Tabelle 11.49: Geänderte Eingabedaten für die Simulation der gekoppelten Dunkel- und Biogasfermentation von Kartoffelschalen für 100/100% Wirkungsgrad in den Fermentern und 95% H_2-Recovery in der PSA-Anlage des Dunkelfermenters

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Massenstrom Substratstrom	kg/s	3,1643
Massenstrom Verdünnungswasser	kg/s	10,831
Prozessparameter		
glucose_to_acet Dunkelfermenter	%	99,1
acet_to_CH4 Biogasfermenter	bar	100
H2_recovery PSA-Anlage	%	95
H2_flushing PSA-Anlage	%	3

11.5.6.1 Nutzung des Biogases im Gaskessel

Tabelle 11.50: Eingabedaten für die Nutzung des Biogases im Gaskessel

Parameter	Einheit	Wert
lambda Gaskessel	kg/kg	1,05
Temperatur Gas Austritt Gaskessel	°C	1.100

11.5.6.2 Nutzung des Biogases im Gasmotor

Tabelle 11.51: Eingabedaten für die Nutzung des Biogases im Gaskessel

Parameter	Einheit	Wert
lambda Gasmotor	kg/kg	1,52166
eta Gasmotor	-	0,4181
q_cooling_2 Gasmotor	kW	60,478
q_loss Gasmotor	kW	57,44
Temperatur Gas Austritt Gasmotor	°C	451
Druck Gas Austritt Gasmotor	bar	1

11.5.6.3 Nutzung des Biogases in der on-site Reformierungsanlage

Tabelle 11.52: Eingabedaten für die Nutzung des Biogases in der on-site Reformierungsanlage

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Temperatur Sauerstoff biologische Entschwefelungskolonne	°C	20
Druck Sauerstoff biologische Entschwefelungskolonne	bar	1,013

Tabelle 11.52: Eingabedaten für die Nutzung des Biogases in der on-site Reformierungsanlage (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
Eingangsströme		
Temperatur Verbrennungsluft	°C	20
Temperatur Prozesswasser Dampfkreislauf	°C	10
Druck Prozesswasser Dampfkreislauf	bar	3
Prozessparameter		
trickling_density biologische Entschwefelungskolonne	$m^3/(m^2/h)$	2
area biologische Entschwefelungskolonne	m^2	8
H_2S-Gehalt Biogas Austritt biologische Entschwefelungskolonne	ppmv, roh	50
O_2-Gehalt Biogas Austritt biologische Entschwefelungskolonne	vol%, roh	1
Druck nach erster Stufe Kompressor Membrananlage	bar	6
Druck nach zweiter Stufe Kompressor Membrananlage	bar	9
Temperatur nach zweiter Stufe Kompressor Membrananlage	°C	110
Temperatur Gas Austritt Kondensator Membrananlage	°C	10
Temperatur Gas Austritt Wiederaufwärmung Membrananlage	°C	35
delta_p_gas Membranmodule	bar	4
delta_p_CO2 Membranmodule	bar	5
CO2_loss Membranmodule	vol%	2
CH4_loss Membranmodule	vol%	4,5
H_2O-Gehalt Austritt Retentat Membranmodule	ppmv	5
O_2-Gehalt Austritt Retentat Membranmodule	vol%	0,4
Temperatur Gas Eintritt Entschwefelung	°C	370
Druckverlust Entschwefelung	bar	0
H2S_removal Entschwefelung	%	99
H2_to_S Entschwefelung	mol/mol	10
Temperatur Gas Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Gas Eintritt Dampfreformer	bar	30
Temperatur Dampf Eintritt Dampfreformer	°C	540
Druck Dampf Eintritt Dampfreformer	bar	30
temperature Dampfreformer	°C	880
delta_p_reformer Dampfreformer	bar	9
H2O_C_relation Dampfreformer	mol/mol	3,3
delta_p_air_comb Dampfreformer	bar	0
delta_p_comb Dampfreformer	bar	0
lambda_comb Dampfreformer	kg/kg	1,05
C2H6_to_CO Dampfreformer	%	90
C3H8_to_CO Dampfreformer	%	90
CH4_to_CO2 Dampfreformer	%	7
CH4_CO2_to_CO Dampfreformer	%	-0,8
CH4_3CO2_to_CO Dampfreformer	%	-2,0

Tabelle 11.52: Eingabedaten für die Nutzung des Biogases in der on-site Reformierungsanlage (Fortsetzung)

Parameter	Einheit	Wert
Prozessparameter		
CO_to_CO2 Dampfreformer	%	4,0
CH4_toCOEqu Dampfreformer	-	0,8
Temperatur Eintritt Shiftreaktor	°C	330
pressure_drop Shiftreaktor	bar	0
FracEqu Shiftreaktor	-	0,75
Temperatur Gas Eintritt Kondensator	°C	320
Temperatur Gas Austritt Kondensator	°C	40
pressure_drop PSA	bar	0
p_desorb PSA	bar	1
H2_exit_wet PSA	vol%	99,999
H2_recovery PSA	%	74
H2_flushing PSA	%	10
Temperatur Rauchgas Austritt Dampfreformer	°C	920
Temperatur Rauchgas Austritt Anlage	°C	140
Isentroper Wirkungsgrad Dampfturbine	-	0,7816
Druck Dampf Austritt Dampfturbine	bar	2,5

12 Lebenslauf

Dipl.-Ing. Angela Miltner
Leopold-Ernst-Gasse 15/8
1170 Wien

Persönliche Daten:

Geburtsdatum und -ort: 17. Oktober 1974, Maria Anzbach, Österreich

Staatsbürgerschaft: Österreich

Familienstand: verheiratet

Geburtsname: Kerschbaum

Ausbildung:

1989-1994	Höhere Technische Bundeslehr- und Versuchsanstalt St. Pölten, Abteilung für Automatisierungstechnik, Matura mit Auszeichnung bestanden
1995-2002	Diplomstudium Verfahrenstechnik an der Technischen Universität Wien, Diplomprüfung mit Auszeichnung bestanden
seit 2002	Doktoratsstudium der Technischen Wissenschaften auf dem Gebiet der Verfahrenstechnik, Schwerpunkt Thermische Verfahrenstechnik

Berufserfahrung:

seit 04/2003	Projektassistentin am Institut für Verfahrenstechnik, Umwelttechnik und Technische Biowissenschaften der Technischen Universität Wien, Forschungsbereich Thermische Verfahrenstechnik und Simulation

Tätigkeitsbereiche:

10/2008-12/2009	Nationales Projekt „Reduktion fossiler Energieverbräuche durch Prozessoptimierung mit Hilfe der Simulationsbetrachtung „ (Pinch Analyse)
02/2007-03/2008	Nationales Projekt „Nachhaltige Wasserstoffproduktion in Österreich“ (Prozesssimulation, Wirtschafftlichkeitsberechnung)
09/2006-03/2007	Nationales Projekt „Abschätzung der Machbarkeit von ökologischen und ökonomischen Bioethanol-Kleinanlagen“ (Wirtschaftlichkeitsberechnung)
06/2006-01/2007	Firmenprojekt „Schwefelbilanzierung – Westfield“ (Literatursuche, Thermodynamische Berechnungen)
12/2004-06/2006	Nationales Projekt „Neuartiger Mehrzweckkondensator für Biomasse-KWK-Anlagen“ (Prozesssimulation)
12/2003-05/2005	Nationales Projekt „Versuche zur Serienreife einer Brennkammer für ballenförmige Biomassen“ (Anlagenbetrieb)
04/2003-12/2005	EU-Projekt „NESSIE – New Small Scale Innovative Energy Biomass Combustor“ (Anlagenbetrieb und –monitoring, Entwicklung der Regelungstechnik, Prozesssimulation)
04/2003-09/2003	Nationales Projekt „Versuchsanlage zur energetischen Nutzung von ballenförmigen, biogenen Brennstoffen“ (Anlagenbetrieb, Prozesssimulation)