

# Einsatz von CCU-Technologien zur Reduktion von Treibhausgasemissionen in Nordrhein-Westfalens Chemieindustrie

Modellentwurf und Technologiealternativen

Ein Ergebnis des Themenfeldes 2 - Produkte und Wertschöpfungsketten - des Forschungsprojektes SCI4climate.NRW

**SCI4climate.NRW** ist ein vom Land Nordrhein-Westfalen unterstütztes Forschungsprojekt zur Entwicklung einer klimaneutralen und zukunftsfähigen Industrie im Jahr 2050. Das Projekt ist innerhalb der Initiative IN4climate.NRW verankert und repräsentiert die Seite der Wissenschaft. Das Projekt erforscht die technologischen, ökologischen, ökonomischen, institutionellen und (infra)-strukturellen Systemherausforderungen für produzierende Unternehmen in Nordrhein-Westfalen. Ein transdisziplinärer Prozess mit den Partnerinnen und Partnern aus der Industrie und Wissenschaft erarbeitet gemeinsam mögliche Pfade und deren Auswirkungen hin zu einer klimaneutralen Industrie.

### **Bibliographische Angaben**

Herausgeber: SCI4climate.NRW  
Veröffentlicht: 31.07.2020  
AutorIn/nen: Christian Zibunas, Raoul Meys, Lehrstuhl für technische Thermodynamik, RWTH Aachen  
André Bardow, Energy & Process Systems Engineering, ETH Zürich, 8092 Zürich, Switzerland, Lehrstuhl für technische Thermodynamik, RWTH Aachen  
Kontakt: christian.zibunas@ltt.rwth-aachen.de  
Bitte zitieren als: SCI4climate.NRW 2020: *Einsatz von CCU-Technologien zur Reduktion von Treibhausgasemissionen in Nordrhein-Westfalens Chemieindustrie, Modellentwurf und Technologiealternativen, Aachen*

## Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis.....	3
1 Zielsetzung - Forschungsvorhaben im Forschungsintervall 1.....	4
2 Betrachtungsrahmen - Status quo der Chemieindustrie in Nordrhein-Westfalen .....	4
3 Sachbilanz - Mathematische Modellierung.....	5
4 Verfügbarkeit CO <sub>2</sub> -Quellen und Bedarfe an CO <sub>2</sub> für CCU basierte Chemieindustrie.....	6
5 Reduktionspotential für Treibhausgase durch CCU in Nordrhein-Westfalens Chemieindustrie	7
6 Bedarf an erneuerbaren Energien zur erfolgreichen Minderung von Treibhausgasen mittels CCU	9

## Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Produktionsstandorte und Produktionsvolumen der betrachteten Chemikalien und Kunststoffe in Nordrhein-Westfalen .....	5
Abbildung 2: CO <sub>2</sub> -Quellen und CO <sub>2</sub> -Bedarfe für eine CCU-basierte Chemieindustrie in Nordrhein-Westfalen .....	6
Abbildung 3: Treibhausgasemission der Chemieindustrie über den gesamten Lebenszyklus (cradle to grave) für die gesamte Jahresproduktion der betrachteten Chemikalien und Kunststoffe in Nordrhein-Westfalen .....	9
Abbildung 4: Treibhausgasemission der Chemieindustrie über den gesamten Lebenszyklus (cradle to grave) für die gesamte Jahresproduktion der betrachteten Chemikalien und Kunststoffe in Nordrhein-Westfalen in Abhängigkeit der verfügbaren Menge an Elektrizität zur Verwendung in CCU-Technologien für unterschiedliche spezifische Emissionen des Stromsektors, Elektrizitätsbedarf für eine vollständige Verwendung von CCU-Technologien und Potential für zukünftig verfügbare erneuerbare Energie in Nordrhein-Westfalen sowie Technologiealternativen zur Minderung von Treibhausgasemissionen durch Elektrifizierung abseits der Produktion von Chemikalien und Kunststoffen. ....	11

## 1 Zielsetzung - Forschungsvorhaben im Forschungsintervall 1

Ziel des Forschungsintervalls 1 ist die Modellierung der chemischen Industrie in Nordrhein-Westfalen und die Analyse möglicher Technologiealternativen zur Reduktion von Treibhausgasen bei der Herstellung von Chemikalien und Kunststoffen. Als mögliche Alternative zur konventionellen Produktion werden Technologien zur Umsetzung von Carbon Capture and Utilization (CCU) in der Chemieindustrie analysiert. Neben der Analyse des Reduktionspotentials für Treibhausgasemissionen durch CCU, werden Verfügbarkeiten von CO<sub>2</sub> und erneuerbaren Energien zur Umsetzung von CCU in Nordrhein-Westfalens Chemieindustrie betrachtet.

Der nachfolgende Ergebnisbericht beschreibt die Arbeitsschritte zur mathematischen Modellierung aller betrachteten Technologien zur Herstellung der Chemikalien und Kunststoffe sowie die Analyse des Reduktionspotentials für Treibhausgasemissionen durch die Verwendung von CCU-Technologien. Zudem werden Ressourcenbedarfe für die Verwendung von CCU-Technologien diskutiert.

## 2 Betrachtungsrahmen - Status quo der Chemieindustrie in Nordrhein-Westfalen

Zur Analyse der Treibhausgasemissionen der Chemieindustrie in Nordrhein-Westfalen wird zunächst der Betrachtungsrahmen aller relevanten Produkte der Chemieindustrie definiert. Die relevanten Produkte werden basierend auf dem Produktionsvolumen in Nordrhein-Westfalen und dem Anteil an den Treibhausgasemissionen Nordrhein-Westfalens Chemieindustrie festgelegt.

Abbildung 1 zeigt die geographische Anordnung der Produktionsstätten für Chemikalien mit den zugehörigen Produktionsvolumen in Nordrhein-Westfalen.

Für die Herstellung dieser Produkte werden konventionelle Referenztechnologien modelliert. Zusätzlich zu den konventionellen Referenztechnologien werden CCU-Technologien modelliert. Diese CCU-basierten Technologien, umfassen die Herstellung von Methan und Methanol auf Basis von CO<sub>2</sub> sowie die Herstellung von Benzol, Ethylen, Propylen, Toluol und Xylol über CO<sub>2</sub>-basiertes Methanol.

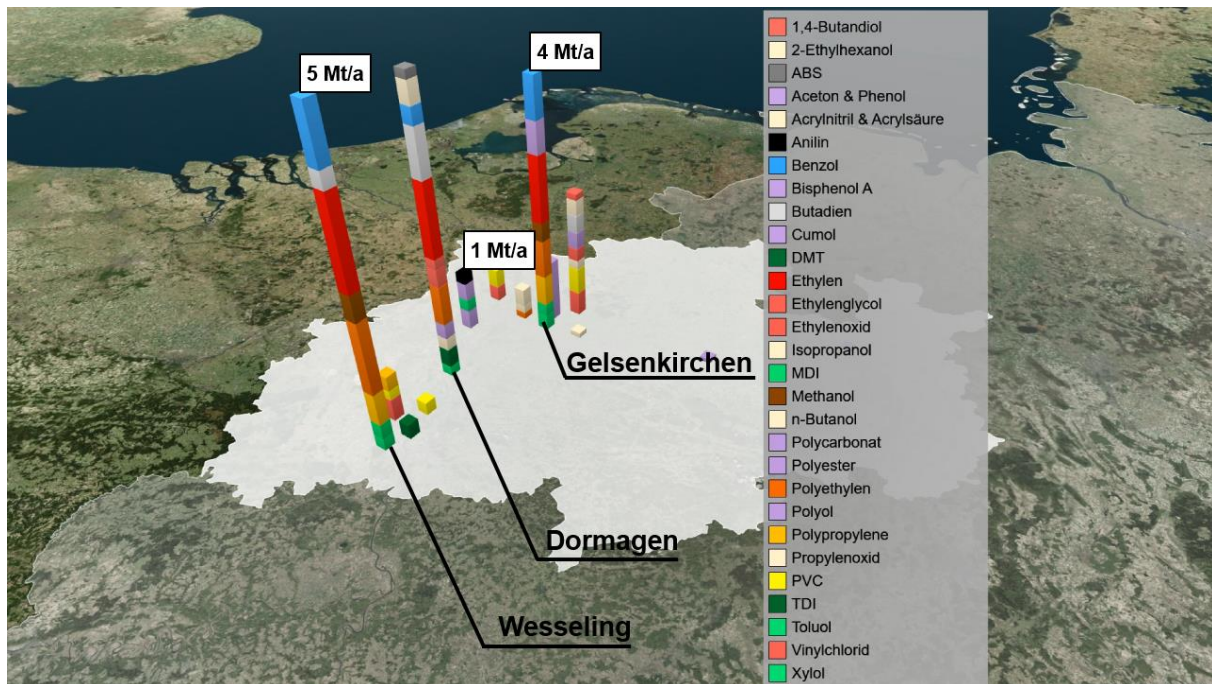


Abbildung 1: Produktionsstandorte und Produktionsvolumen der betrachteten Chemikalien und Kunststoffe in Nordrhein-Westfalen

### 3 Sachbilanz - Mathematische Modellierung

Ziel der Modellierung ist die Quantifizierung der Änderung der Umweltwirkungen bei einem Technologiewechsel von konventionell- zu CCU-basierter Produktion von Chemikalien und Kunststoffen. Da die Chemieindustrie ein vielverzweigtes Netz aus Produktflüssen ist, deren Technologien sich stark gegenseitig beeinflussen, können Technologiewechsels immer Auswirkungen auf weitere Produktionsrouten der Chemieindustrie haben. Durch die starken Interdependenzen zwischen den Produktionsrouten ist die Bewertung von Technologiealternativen nur in einem gesamtheitlichen Modell der Chemieindustrie möglich.

Die mathematische Modellierung zur Abbildung der gesamten Chemieindustrie in Nordrhein-Westfalen basiert auf dem Technology Choice Model (TCM). Das TCM orientiert sich an der generellen LCA-Schreibweise in Matrizen. Diese Matrizen enthalten quantitative Informationen über die modellierten Technologien in Form von Massen- und Energiebilanzen. Diese Bilanzen beschreiben Energie- und Rohstoffbedarfe sowie Emissionen an die Umwelt der analysierten Technologien.

Zur Abbildung der Umweltauswirkungen der Chemieindustrie müssen zunächst die Massen und Energiebedarfe aller relevanten Technologien aufgestellt werden. Ist je Chemikalie nur eine Produktionstechnologie modelliert, können die Umweltwirkungen direkt in Abhängigkeit des Produktionsvolumens berechnet werden.

Sind mehrere Technologiealternativen modelliert, kann mittels einer Optimierung die der Zielfunktion entsprechend beste Technologie ausgewählt werden.

Für eine detaillierte Beschreibung der Modellierung sowie Optimierung wird auf Kätelhön et al. (2016) verwiesen [Kätelhön et al. 2016, *Environmental Science and Technology, Stochastic Technology Choice Model for Consequential Life Cycle*].

## 4 Verfügbarkeit CO<sub>2</sub>-Quellen und Bedarfe an CO<sub>2</sub> für CCU basierte Chemieindustrie

Zur Analyse der Umsetzbarkeit einer CCU-basierten Chemieindustrie wird zunächst die Verfügbarkeit von CO<sub>2</sub>-Quellen innerhalb Nordrhein-Westfalens geprüft und anschließend mit der benötigten Menge an CO<sub>2</sub> in der Chemieindustrie verglichen.

Abbildung 2 zeigt die Standorte und Emissionsmengen von CO<sub>2</sub>-Quellen in Nordrhein-Westfalen sowie die Bedarfe an CO<sub>2</sub> für eine CCU-basierte Chemieindustrie. Für die geographische Lage der CO<sub>2</sub>-Bedarfe wird angenommen, dass CCU-Technologien nur an bestehenden Produktionsstandorten der Chemieindustrie eingesetzt werden und dort das aktuelle Produktportfolio CCU-basiert produzieren. Somit fallen CO<sub>2</sub>-Bedarfe vorrangig im Westen von Nordrhein-Westfalen an. In lokaler Nähe zu den CO<sub>2</sub>-Bedarfen finden sich CO<sub>2</sub>-Quellen des Strom- und Wärmesektors sowie der Stahlindustrie. CO<sub>2</sub>-Quelle der Chemieindustrie können nur bedingt für einen Vergleich von CO<sub>2</sub>-Quellen und -Senken berücksichtigt werden, da ein Teil der gezeigten Emissionen auf Grund von Technologiewechsels hin zu CCU-basierter Produktion entfallen würden. CO<sub>2</sub>-Quellen des Zementsektors treten vergleichsweise in großen Entfernungen zu den Bedarfsstandorten auf und zeigen zudem vergleichsweise kleine Volumina an CO<sub>2</sub>-Emissionen gegenüber den Bedarfen der Chemiestandorte.

Weiterhin sollte berücksichtigt werden, dass Reduktionsmaßnahmen für CO<sub>2</sub>-Emissionen in den gezeigten Industriesektoren zu einer Verminderung potenzieller Quellen führen können. Da die gezeigten Emissionsquellen kumuliert 200Mt/a an CO<sub>2</sub> emittieren, der Bedarf an CO<sub>2</sub> jedoch nur knapp 50Mt/a beträgt, sind selbst bei einem Rückgang der CO<sub>2</sub> Emissionen um 75% noch genug CO<sub>2</sub>-Quellen vorhanden. Zudem können CO<sub>2</sub> Bedarfe selbst nach vollständiger Vermeidung aller bestehenden CO<sub>2</sub>-Quellen, über die Abscheidung von CO<sub>2</sub> aus der Luft mittels Direct Air Capture gedeckt werden.

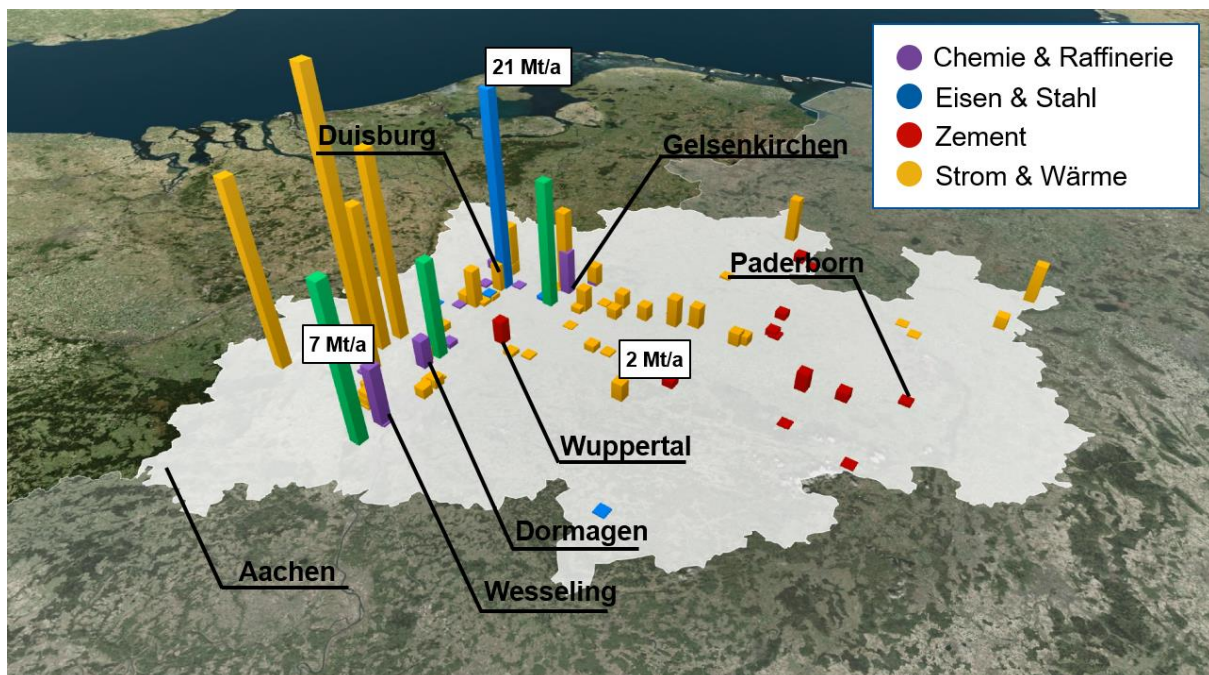


Abbildung 2: CO<sub>2</sub>-Quellen und CO<sub>2</sub>-Bedarfe für eine CCU-basierte Chemieindustrie in Nordrhein-Westfalen

## 5 Reduktionspotential für Treibhausgase durch CCU in Nordrhein-Westfalens Chemieindustrie

Alternativ zur konventionellen Produktion von Chemikalien auf Basis von fossilen Ressourcen, können die gleichen Chemikalien mittels CCU-Technologien basierend auf  $\text{CO}_2$  und  $\text{H}_2$  produziert werden. Ziel der nachfolgenden Analyse ist es, das Potential zur Vermeidung von Treibhausgasen durch die Verwendung von CCU-Technologien zu quantifizieren. Das Potential wird basierend auf einer ökologischen Optimierung der Chemieindustrie berechnet und wird in abhängig der Emissionen für die Bereitstellung der Ausgangsstoffe  $\text{CO}_2$  und  $\text{H}_2$  dargestellt.

Für die Bereitstellung des  $\text{CO}_2$  wird der mögliche Bereich der bei der Bereitstellung anfallenden Emissionen durch einen besten und einen schlechtesten Fall abgebildet. Im besten Fall wird das  $\text{CO}_2$  über eine industrielle Punktquelle abgebildet, die ausschließlich  $\text{CO}_2$  emittiert. Für die nachfolgende Verwendung in CCU-Technologien muss das reine  $\text{CO}_2$  der Punktquelle lediglich verdichtet werden. Die Verdichtung ist durch einen geringen Energieaufwand zu realisieren und verursacht somit nur geringe indirekte Emissionen. Im Gegensatz dazu bildet die Abscheidung von  $\text{CO}_2$  aus der Luft den schlechtesten Fall ab. Auf Grund der geringen Konzentration an  $\text{CO}_2$  in der Luft ist zusätzlich zur Verdichtung des  $\text{CO}_2$  ein Energieaufwand zur Abscheidung des  $\text{CO}_2$  aus der Luft notwendig. Die Summe der Energieaufwände führt zu höheren indirekten Emissionen.

Für die Bereitstellung des  $\text{H}_2$  wird angenommen, dass  $\text{H}_2$  mittels des Elektrolyseverfahrens hergestellt wird, dessen Emissionen bei festem Wirkungsgrad des Elektrolyseurs einzig durch die Emissionen des Stromnetzes diktiert werden. Somit werden durch eine Minderung der spezifischen Emissionen pro Kilowattstunde Elektrizität auch die Emissionen zur Bereitstellung des  $\text{H}_2$  reduziert.

Im Folgenden wird das Reduktionspotential für eine CCU-basierte Chemieindustrie für die zwei oben beschriebenen Fälle an  $\text{CO}_2$ -Quellen und in Abhängigkeit der spezifischen Emissionen des Stromsektors dargestellt. Die Abbildung 3 zeigt entsprechend die Treibhausgasemissionen der Chemieindustrie aufgetragen über den spezifischen Emissionen des Stromsektors für unterschiedliche Verläufe je  $\text{CO}_2$ -Quelle.

Für die fossil-basierte Produktion der Chemikalien, in schwarz, ist eine geringe Abhängigkeit der Treibhausgasemissionen gegenüber den spezifischen Emissionen des Stromsektors zu erkennen. Diese geringe Abhängigkeit wird durch den geringen Bedarf an Elektrizität für die konventionelle fossile Produktion begründet. Zudem sind die Treibhausgasemissionen der fossil-basierten konventionellen Chemieindustrie unabhängig von der Bereitstellung von  $\text{CO}_2$ , da in der fossilen Produktion für den gewählten Betrachtungsrahmen kein  $\text{CO}_2$  verwendet wird.

Die blauen Linien repräsentieren das optimale Produktionssystem der Chemieindustrie mit minimalen Treibhausgasemissionen, wobei sowohl konventionelle fossil-basierte als auch CCU-basierte Technologien im optimalen Produktionssystem enthalten sein können. Für spezifische Emissionen des Stromsektors zwischen 600 bis ca. 200 g/kWh gleichen die Treibhausgasemissionen des optimalen Produktionssystems denen der fossil-basierten Produktion. Im optimalen System werden somit ausschließlich konventionelle Technologien verwendet und es ist kein Reduktionspotential für Treibhausgasemissionen durch den Einsatz CCU-basierter Technologien möglich.

Unterhalb von ca. 200 g/kWh sinken die Treibhausgasemissionen des optimalen Systems im Vergleich zur konventionellen Produktion. Bei weiter sinkenden spezifischen Emissionen des Stromsektors wird die Reduktion von Treibhausgasen durch den Einsatz von CCU-basierten Technologien ermöglicht.



Durch den Einsatz von CCU-basierten Technologien ist eine Differenz des Reduktionspotential für die zwei Fälle der CO<sub>2</sub> Bereitstellung zu erkennen. Die Differenz des Reduktionspotential ist abhängig von der verwendeten Menge an CO<sub>2</sub> und den Emissionen je Kilowattstunde Elektrizität zum Betreiben der Verdichtung und der Abscheidung des CO<sub>2</sub> aus der Luft. Durch den geringeren Energiebedarf für CO<sub>2</sub> aus industriellen Punktquellen kann ein höheres Reduktionspotential erzielt werden, sodass die Verwendung industrieller Punktquellen priorisiert werden sollte.

Zusätzlich können bei sinkenden spezifischen Emissionen des Stromsektors zunehmend mehr CCU-basierte Technologien Reduktionen gegenüber den fossilbasierten Technologien erzielen, wodurch der Bedarf an Elektrizität für die H<sub>2</sub>-Bereitstellung ansteigt. Durch die steigende Verwendung von Elektrizität führen Reduktionen der spezifischen Emissionen des Stromsektors zu zunehmend stärker sinkenden Emissionen für das optimale Produktionssystem, sodass die Kurve der Treibhausgasemissionen mit sinkenden spezifischen Emissionen des Stromsektors zunehmend steiler abfällt.

Insgesamt könnten maximal 50 Megatonnen (=85%) an CO<sub>2</sub>-äquivalenten Treibhausgasemissionen eingespart werden. Diese maximale Einsparung erfordert einen Stromsektor mit spezifischen Emissionen von 0 g/kWh, den heute selbst die besten erneuerbaren Energien nicht erreichen, aufgrund von Emissionen in den Vorketten. Für eine weiterführende Betrachtung des Vermeidungspotentials für Treibhausgasemissionen durch CCU ist daher zusätzlich eine detaillierte Betrachtung des Stromsektors im Zusammenspiel mit der Chemieindustrie anzustreben.

Nichtsdestotrotz ist in Abbildung 3 zu erkennen, dass für spezifische Emissionen des Stromsektors unterhalb von 100 g/kWh ein deutliches Reduktionspotential durch die Verwendung von CCU-Technologien vorhanden ist. Da das Reduktionspotential nur bei ausreichend niedrigen Emissionen des Stromsektors gewährleistet werden kann, wird im folgenden Abschnitt der Einfluss der Verfügbarkeit an Elektrizität auf das Reduktionspotential analysiert.

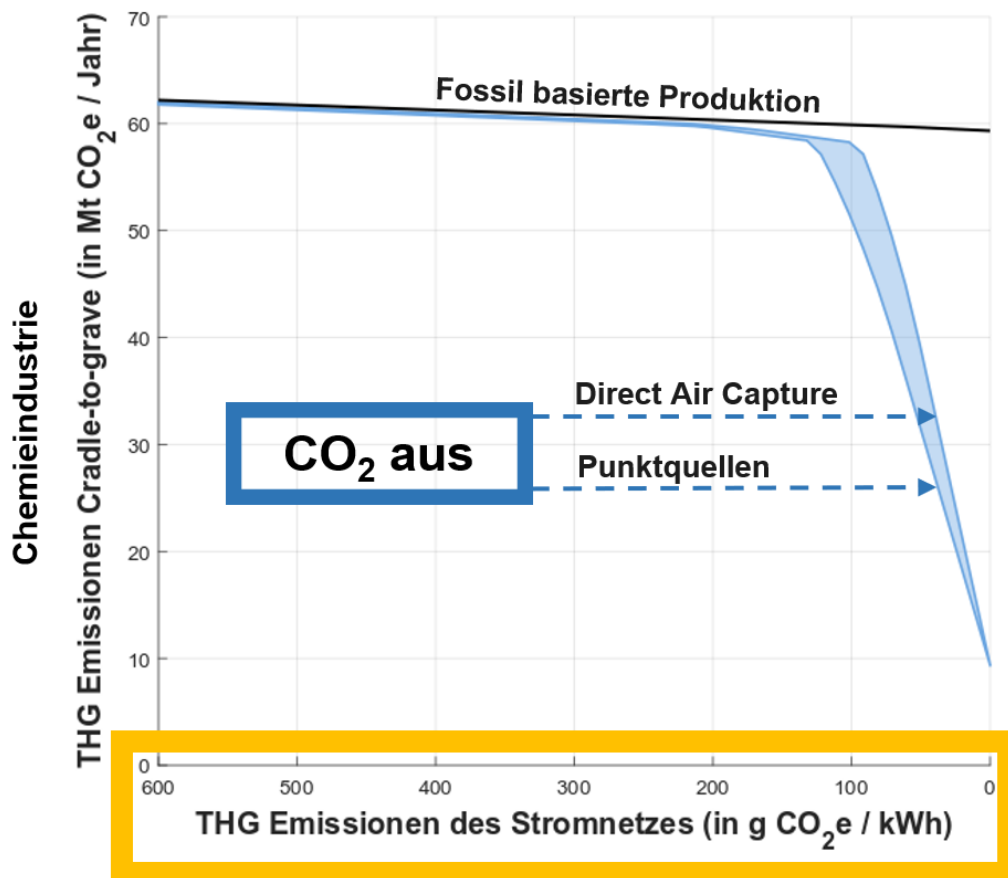


Abbildung 3: Treibhausgasemission der Chemieindustrie über den gesamten Lebenszyklus (cradle to grave) für die gesamte Jahresproduktion der betrachteten Chemikalien und Kunststoffe in Nordrhein-Westfalen

## 6 Bedarf an erneuerbaren Energien zur erfolgreichen Minderung von Treibhausgasen mittels CCU

Abbildung 4 zeigt das Reduktionspotential für Treibhausgasemissionen in Abhängigkeit der zusätzlich für die Chemieindustrie verfügbaren Menge an Elektrizität für verschiedene Linien an spezifischen Emissionen des Stromsektors in g/kWh.

Für konstante spezifische Emissionen des Stromsektors sinken die Treibhausgasemissionen der Chemieindustrie nichtlinear mit steigender Menge an Elektrizität, wobei das Reduktionspotential analog zu Abbildung 3 für Linien unterschiedlicher Emissionen des Stromsektors variiert. Der nichtlineare Verlauf der Treibhausgasemissionen resultiert aus den unterschiedlichen Wirkungsgraden der CCU-Technologien bei der Verwendung von Elektrizität zur Verminderung von Treibhausgasen.

Zusätzliche Elektrizität wird zunächst für die Technologie verwendet, die am effizientesten Treibhausgasemissionen vermeidet, bis die Nachfrage der produzierten Chemikalie vollständig durch die CCU-Technologie gedeckt wird. Danach wird die zusätzliche Elektrizität für die nächsteffiziente Technologie verwendet. Zusätzliche Elektrizität wird somit schrittweise für CCU-Technologien mit abnehmender Effizienz verwendet. Infolgedessen sinkt die Reduktion an Treibhausgasen je Kilowattstunde Elektrizität bis keine zusätzlichen Reduktionen an Treibhausgasemissionen durch die Implementierung von CCU-Technologien erzielt werden können.

Für Emissionen des Stromsektor von <50 g/kWh werden auf diese Weise alle CCU-Technologien implementiert. Der Bedarf an Elektrizität zur vollständigen Implementierung der CCU-Technologien in Nordrhein-Westfalen beträgt 440 TWh/a. Das Potential zum Ausbau für erneuerbare Energien in Nordrhein-Westfalen wird hingegen auf 150 TWh/a geschätzt. Somit sollten vor allem zuerst die effizientesten CCU-Technologien zur Reduktion von Treibhausgasen eingesetzt werden. Für das Ranking der CCU-Technologien nach ihrer Effizienz wird auf die Supporting Informations von Kätelhön et al. verwiesen [**Kätelhön et al. 2019, PNAS, Climate change mitigation potential of carbon capture and utilization in the chemical industry**].

Neben CCU-Technologien bieten andere Technologien ebenfalls die Möglichkeit durch den Einsatz von erneuerbarer Elektrizität Treibhausgasemissionen signifikant zu reduzieren. In Abbildung 4 sind vier Beispiele für Elektrifizierungsoptionen abseits von CCU gezeigt. Die gezeigte Elektrifizierungsoptionen können bei gleicher Menge an Elektrizität mehr Emissionen vermeiden. Daher sollten bei begrenzter Verfügbarkeit an Elektrizität zunächst diese Elektrifizierungsoptionen umgesetzt werden, um möglichst hohe Reduktionen an Treibhausgasemissionen zu erzielen. Für die ökologische Bewertung weiterer Elektrifizierungstechnologien wird auf Sternberg et al. verwiesen [**Sternberg et al. 2015, Energy and Environmental Science, Power to What? Environmental assessment of energy storage systems**].

Jedoch bietet die Implementierung von CCU-Technologien die Möglichkeit CO<sub>2</sub>, aus schwer vermeidbaren industriellen Punktquellen zu verwenden und wertschöpfend in chemischen Produkten zu binden. Durch die Interaktion emissionsintensiver Industrien mit der Chemieindustrie können somit ökologische Potentiale ausgeschöpft und gegebenenfalls ökonomische Synergien aufgedeckt werden. Um die Wettbewerbsfähigkeit der Industrie in Nordrhein-Westfalen zu sichern, gilt es für künftige Studien, die ökonomischen Aspekte von CCU zu bewerten.

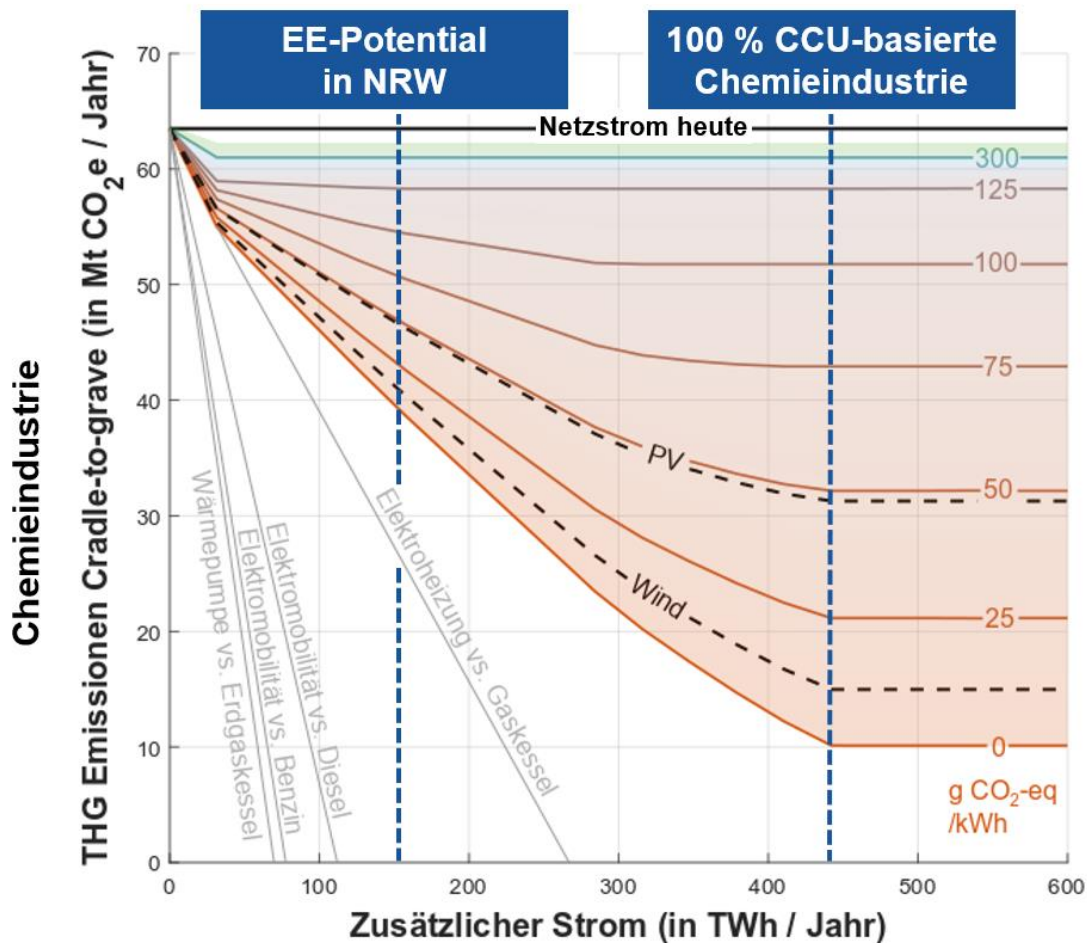


Abbildung 4: Treibhausgasemission der Chemieindustrie über den gesamten Lebenszyklus (cradle to grave) für die gesamte Jahresproduktion der betrachteten Chemikalien und Kunststoffe in Nordrhein-Westfalen in Abhängigkeit der verfügbaren Menge an Elektrizität zur Verwendung in CCU-Technologien für unterschiedliche spezifische Emissionen des Stromsektors, Elektrizitätsbedarf für eine vollständige Verwendung von CCU-Technologien und Potential für zukünftig verfügbare erneuerbare Energie in Nordrhein-Westfalen sowie Technologiealternativen zur Minderung von Treibhausgasemissionen durch Elektrifizierung abseits der Produktion von Chemikalien und Kunststoffen.