

Anhang zur Leistungsbeschreibung – Ressourcenstudie: Entwicklung eines Analysewerkzeugs zur Bewertung von Power-to-X- und Biomass-to-X-Routen

Relevante Ergebnisse der Vorstudie sowie Konkretisierung des methodischen und technischen Rahmens (Modellierung, Bilanzierung, Datenstruktur und Ergebnisdarstellung)

Inhaltsverzeichnis

Abkürzungsverzeichnis	2
Glossar	3
1. Zweck und Verbindlichkeit des Anhangs	4
2. Auswahl der Intermediate	5
3. Modulportfolio - Überblick über PtX- und BtX-Routen	6
3.1 Routen zur Herstellung von Methanol	8
3.2 Routen zur Herstellung von Olefinen und Aromaten	8
3.3 Routen zur Herstellung von Wasserstoff, Methan und Ammoniak	9
3.4 Konkretisierung des Untersuchungsraums und Modulportfolio	10
3.4.1 Vertiefte Abbildung der Strombereitstellung	12
3.4.2 Vertiefte Abbildung der Biomassebereitstellung	12
4. Ressourcenindikatoren und Indikatorspezifische Berechnungslogik	12
4.1 Energie	12
4.2 Wasser	13
4.3 Land	13
4.4 Raw Material Consumption / Material Footprint	14
4.5 Total Material Requirement	14
4.6 Abiotic Depletion Potential	14
4.7 Optionaler Indikator: Global Warming Potential (GWP)	14
5. Mathematische Grundlage der modularen Bilanzierungslogik	15
5.1 Grundnotation	15
5.2 Direkter Ressourcenbeitrag eines Moduls	15
5.3 Kumuliertes Ressourcenprofil bei einem oder mehreren Inputs	15
5.4 Mengenbezogener Übertragungsfaktor	16
5.5 Behandlung von Wirkungsgraden, Erträgen und Ausbeuten	16
5.6 Anlagen- und Infrastrukturbeiträge	17
5.7 Module mit mehreren Outputs	17
6. Ergebnisdarstellung	18
6.1 Diagramm A – kumuliertes Ressourcenprofil	18
6.2 Diagramm B – modulspezifische Sensitivität	19
6.3 Zusammenspiel der beiden Diagramme	20
6.4 Mindestanforderungen an die hinterlegte Datentabelle	22

Abkürzungsverzeichnis

Abkürzung	Bedeutung
ADP	Abiotic Depletion Potential
AEL	Alkalische Elektrolyse (Alkaline Electrolysis)
AG	Auftraggeber
AN	Auftragnehmer
AP	Arbeitspaket
ATR	Autotherme Reformierung (Autothermal Reforming)
BtX	Biomass-to-X
BTX	Benzol, Toluol, Xylol
C ₂ /C ₃ /C ₄	Kohlenwasserstofffraktionen mit zwei, drei bzw. vier Kohlenstoffatomen
CED	Cumulative Energy Demand
CF	Umrechnungs- bzw. Charakterisierungsfaktor
CO	Kohlenmonoxid
CO ₂	Kohlenstoffdioxid
D	Deliverables
DAC	Direct Air Capture
ETB	Ethanol-to-Butadiene
ETP	Ethene-to-Propene
FT	Fischer-Tropsch
GWP	Global Warming Potential
H ₂	Wasserstoff
ID	Identifikator / Identifikationsnummer
KEA	Kumulierter Energieaufwand
KUP	Kurzumtriebsanlage
LPG	Liquefied Petroleum Gas (Flüssiggas)
M	Monat (Projektmonat)
MeOH	Methanol
MTA	Methanol-to-Aromatics
MTO	Methanol-to-Olefins
MTP	Methanol-to-Propylene
MS	Meilenstein
N ₂	Stickstoff
NH ₃	Ammoniak
NT/HT	Niedertemperatur / Hochtemperatur (im Kontext DAC)
O ₂	Sauerstoff
PEM	Proton Exchange Membrane (Protonenaustauschmembran)
PSA/VPsA	Pressure Swing Adsorption / Vacuum Pressure Swing Adsorption
PtX	Power-to-X
PV	Photovoltaik
RMC/MF	Raw Material Consumption / Material Footprint
RWGS	Reverse Water-Gas Shift
SMR	Steam Methane Reforming (Dampfreformierung von Methan)
SNG	Synthetic Natural Gas
SOEC	Solid Oxide Electrolysis Cell (Festoxid-Elektrolysezelle)
TMR	Total Material Requirement
TRL	Technology Readiness Level (Technologiereifegrad)
WGS	Water-Gas Shift

Glossar

Analysewerkzeug

Das Analysewerkzeug bezeichnet das von der AG eigenständig nutzbare Gesamtsystem aus Moduldatenbank, Berechnungsmodell, Bedien- und Konfigurationsebene sowie Ergebnis-, Dashboard- und Exportfunktionen.

Beispielkonfiguration

Eine Beispielkonfiguration bezeichnet eine im Rahmen des Auftrags gezielt ausgewählte Konfiguration, anhand derer Funktionsfähigkeit, Datenkonsistenz, Ergebnisdarstellung und fachliche Plausibilität des Analysewerkzeugs überprüft werden. Umfang und Auswahl der durch den AN zu bearbeitenden Beispielkonfigurationen werden in der Leistungsbeschreibung festgelegt; aus der hier beschriebenen Szenariofunktion ergibt sich keine Verpflichtung zu einer umfassenden Szenarioanalyse durch den AN.

Berechnungsmodell

Das Berechnungsmodell bezeichnet den innerhalb des Analysewerkzeugs implementierten Berechnungskern auf Basis der prozessschrittbezogenen Bilanzierungslogik.

Modul

Ein Modul bildet einen technisch abgrenzbaren Prozessschritt mit definierten Input- und Outputströmen, Parametern und Ressourcenbeiträgen ab.

Route/Pfad

Eine Route/Pfad bildet eine Prozesskette ab. Dabei werden technisch zulässige Module verknüpft, durch die ein betrachtetes Intermediat erzeugt wird. Es wird keine einzelne Route/Pfad als technologischer Standard oder allgemein verbindlicher Referenzpfad definiert.

Referenzkonfiguration

Eine Referenzkonfiguration bezeichnet die Berechnung einer konkreten Route, bei der die variablen Parameter der beteiligten Module auf den jeweils fachlich festgelegten Default- beziehungsweise Referenzwerten liegen. Sie bildet insbesondere den Ausgangspunkt für Sensitivitätsberechnungen. Der Referenzwert eines Parameters muss nicht in der mathematischen Mitte seines zulässigen Wertebereichs liegen.

Sensitivitätsanalyse

Eine Sensitivitätsanalyse untersucht die Wirkung veränderter technischer oder standortbezogener Parameter innerhalb einer unveränderten Modul- und Routenkonfiguration. Art und Reihenfolge der eingesetzten Module bleiben unverändert; verändert ein Parameter die erforderliche Menge eines vorgelagerten Inputs, ist diese Mengenänderung vollständig zu berücksichtigen.

Szenarioanalyse

Ein Szenario bezeichnet für die spätere Nutzung des Analysewerkzeugs eine technisch plausible Modulzusammenstellung beziehungsweise Route mit einer festgelegten Parametrisierung. Der Vergleich unterschiedlicher Szenarien dient dazu, die ressourcenseitigen Auswirkungen unterschiedlicher technologischer oder standortbezogener Konfigurationen zu untersuchen.

1. Zweck und Verbindlichkeit des Anhangs

Dieser Anhang ist Bestandteil der Leistungsbeschreibung für die „Ressourcenstudie: Entwicklung eines Analysewerkzeugs zur Bewertung von Power-to-X- und Biomass-to-X-Routen“. Er enthält die für den Auftrag relevanten Ergebnisse einer im Auftrag des PtX Lab Lausitz durchgeführten Vorstudie zur Identifikation chemischer Intermediate und technisch möglicher PtX- und BtX-Routen. Die Vorstudie diente der Identifikation und Strukturierung des Untersuchungsraums; eine umfassende Ressourcenbilanzierung und die Entwicklung des Analysewerkzeugs waren nicht Gegenstand der Vorstudie.

Der Anhang konkretisiert die methodischen und technischen Anforderungen der Leistungsbeschreibung und unterscheidet zwischen verbindliche Anforderungen und beispielhafte Umsetzungsanregungen. Die nicht verbindlichen Umsetzungsanregungen sind im Weiteren deutlich gekennzeichnet und dienen der Unterstützung eines gemeinsamen Verständnisses zwischen AN und AG. Für die nicht verbindlichen Umsetzungsanregungen können die Bieter fachlich gleichwertige oder bessere Alternativen vorschlagen. Diese sind im Umsetzungskonzept nachvollziehbar darzustellen und zu begründen.

Der Anhang soll insbesondere verdeutlichen,

- welche Intermediate und grundlegenden Routen den fachlichen Ausgangspunkt des Vorhabens bilden,
- wie Prozessschritte zu technisch abgrenzbaren und wiederverwendbaren Modulen zusammenzufassen sind,
- wie Ressourcenbeiträge vorgelagerter Intermediate in nachgelagerte Prozessschritte eingehen,
- wie direkte und vorgelagerte Ressourcenbeiträge voneinander zu unterscheiden und kumuliert fortzuschreiben sind,
- wie mehrere Input- und Outputströme sowie Mehrproduktprozesse bilanziell zu behandeln sind,
- wie Sensitivitäten gegenüber modulspezifischen technischen und standortbezogenen Parametern abzubilden sind und
- welche Mindestanforderungen an Datenstruktur, Berechnungslogik, Dashboard und funktionale Ausgestaltung des Analysewerkzeugs gelten.

2. Auswahl der Intermediate

Die Vorstudie hat sechs Intermediate identifiziert. Diese sind Wasserstoff, Methan, Methanol, Ammoniak, Olefine und Aromaten. Diese Auswahl ist **bindend**.

Synthesegas, Ethanol und CO₂ sind in den Routen als relevante Zwischen-, Neben- oder Inputströme enthalten, werden jedoch nicht als eigenständige Intermediate behandelt. Insbesondere Synthesegas ist kein einheitlich definiertes Produkt; seine Zusammensetzung ist von Rohstoff und nachfolgenden Umwandlungsschritten abhängig. Die entsprechenden Stoffströme sind gleichwohl als Inputs, Zwischenprodukte oder Konvergenzpunkte in der prozessschrittbezogenen Bilanzierung zu berücksichtigen.

3. Modulportfolio - Überblick über PtX- und BtX-Routen

Die Vorstudie hat technisch relevante BtX- und PtX-Routen für Chemie- und Kraftstoffindustrie strukturiert. Die nachfolgenden Darstellungen zeigen den aus der Vorstudie abgeleiteten fachlichen Ausgangspunkt (vgl. Kapitel 3.1 bis 3.3). Die dargestellten Routen und TRL-Angaben dienen der fachlichen Einordnung und Orientierung des Untersuchungsraums. Kapitel 3.4 enthält das Modulportfolio. Die dort aufgeführten Modulgruppen bilden **den verbindlichen fachlichen Abdeckungs- und Prüfraum**; die genannten Einzeltechnologien und Verfahrensvarianten **dienen der Orientierung**.

Für die aus der Vorstudie übernommenen Grafiken gilt folgende Legende:

Darstellung	Bedeutung
Orange	ausgewählte Intermediate
Dunkelgrün	Biomassen
Hellgrau	PtX-Inputs
Dunkelblau	primärer Umwandlungsprozess
Hellblau	Dampfreformierung
Hellgrün	sonstige Intermediate
Braun	zusätzlicher Wasserstoff
Gelb	finaler Umwandlungsprozess
Ovale	Anfangs- und Endpunkte der Routen
Rauten	Zwischenprodukte
Kästen	Umwandlungsprozesse

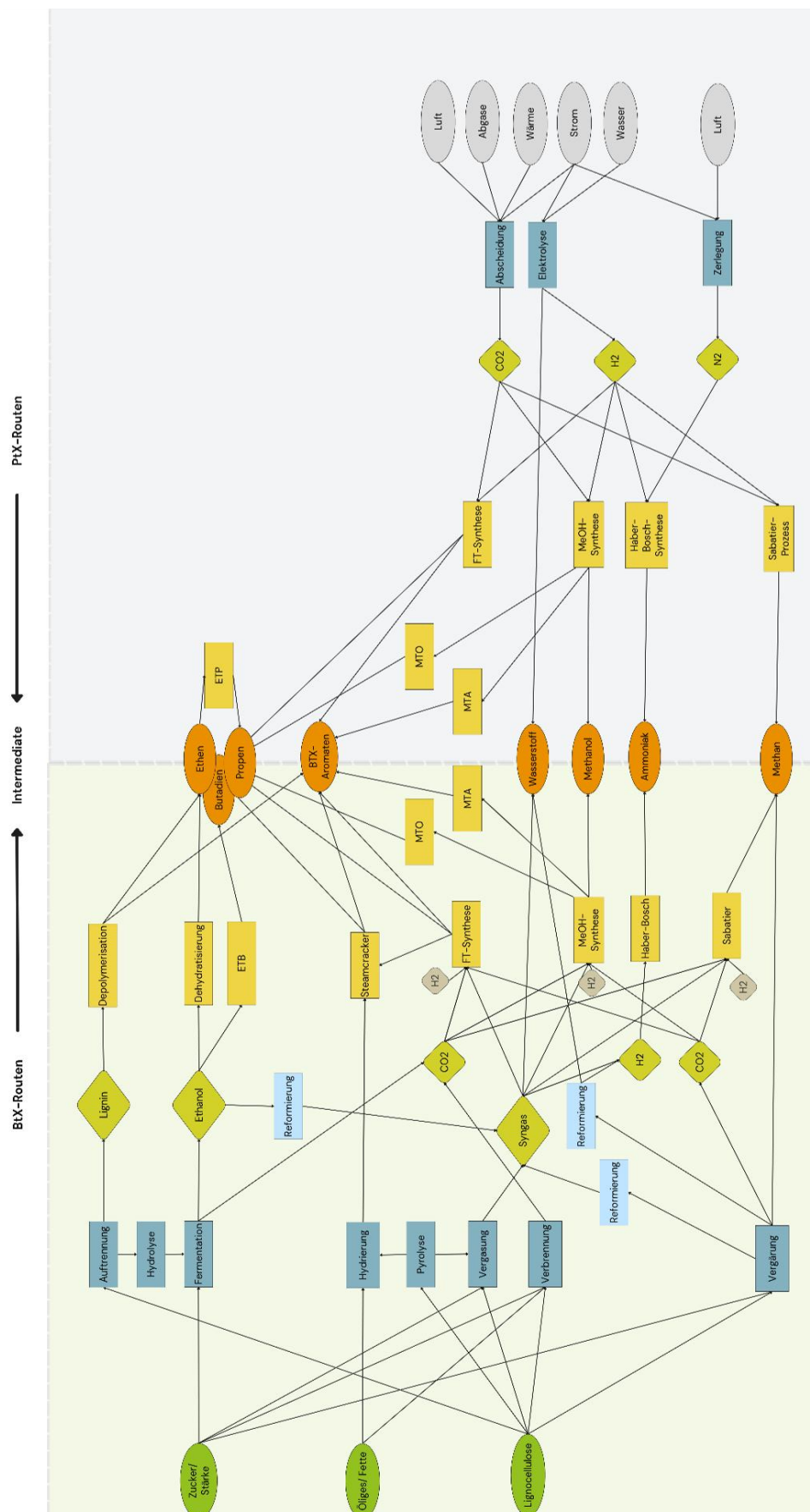


Abbildung 1: Übersicht über technisch fortgeschrittene BtX- und PtX-Routen zur Produktion chemischer Intermediate (Quelle: ifeu; aus der Vorstudie übernommen).

3.1 Routen zur Herstellung von Methanol

Methanol kann sowohl über BtX- als auch über PtX-Routen bereitgestellt werden. BtX-Routen umfassen unter anderem Vergärungs-, Fermentations-, Vergasungs- und Verbrennungspfade mit anschließender Methanolsynthese. PtX-Routen beruhen auf der Bereitstellung von CO₂ und Wasserstoff und können über eine direkte Methanolsynthese oder über Synthesegas geführt werden.

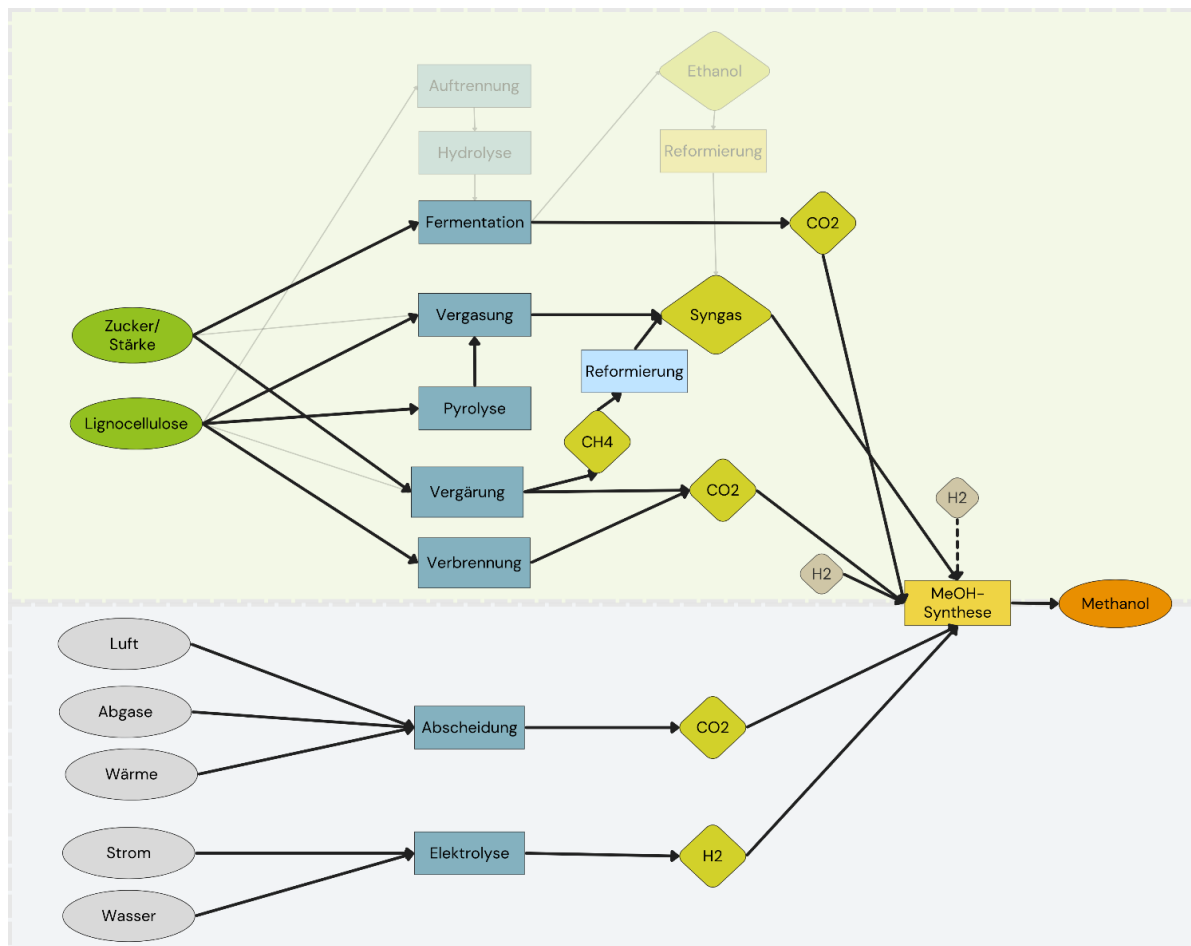


Abbildung 2: BtX- und PtX-Routen zur Herstellung von Methanol (Quelle: ifeu; aus der Vorstudie übernommen).

Tabelle 1: BtX- und PtX-Routen zur Herstellung von Methanol.

Pfad	Ausgangsstoff	Route	TRL gesamt
BtX	Zucker/Stärke	Vergärung → Methan → Methanolsynthese über Synthesegas	8–9
BtX	Zucker/Stärke	Vergärung → CO ₂ → direkte Methanolsynthese unter Einbindung von H ₂	7–8
BtX	Zucker/Stärke	Fermentation → CO ₂ → direkte Methanolsynthese unter Einbindung von H ₂	7–8
BtX	Lignocellulose	Pyrolyse/Vergasung → Synthesegas → Methanolsynthese	6
BtX	Lignocellulose	Verbrennung → CO ₂ → direkte Methanolsynthese unter Einbindung von H ₂	6–7
PtX	Abgase	CO ₂ -Abscheidung → Methanolsynthese (über Synthesegas oder direkt) unter Einbindung von H ₂	7
PtX	Luft (DAC)	CO ₂ -Abscheidung → Methanolsynthese (über Synthesegas oder direkt) unter Einbindung von H ₂	6

3.2 Routen zur Herstellung von Olefinen und Aromaten

Olefine und Aromaten können über mehrere Plattform- und Konversionsschritte erreicht werden. Relevante Routen führen unter anderem über Methanol und MTO/MTA, über Fischer-Tropsch-Synthesen sowie – bei biogenen Ölen und Fetten – über Hydrierung und Steamcracking. Zusätzlich bestehen biogene Routen über Ethanol zu Ethen beziehungsweise Butadien.

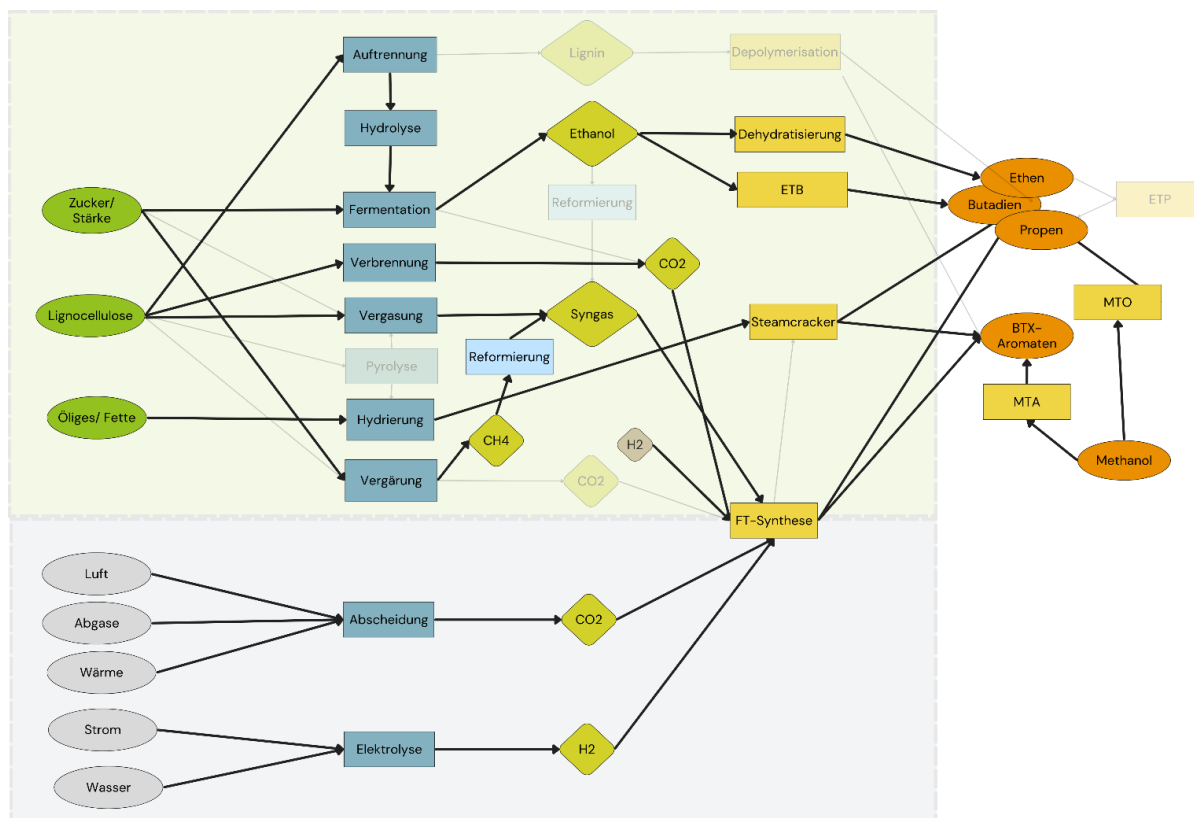


Abbildung 3: BtX- und PtX-Routen zur Herstellung von Olefinen und Aromaten (Quelle: ifeu; aus der Vorstudie übernommen).

Tabelle 2: BtX- und PtX-Routen zur Herstellung von Olefinen und Aromaten.

Pfad	Ausgangsstoff	Route	Intermediat	TRL gesamt
BtX	Zucker/Stärke	Vergärung → Methan → Methanol → MTO/MTA	Olefine/Aromaten	7–8
BtX	Zucker/Stärke	Vergärung → Methan → Fischer-Tropsch	Olefine/Aromaten	7–8
BtX	Zucker/Stärke	Vergärung → CO ₂ → Methanol → MTO/MTA	Olefine/Aromaten	7
BtX	Zucker/Stärke	Fermentation → Ethanol → Dehydratisierung	Ethen	9
BtX	Zucker/Stärke	Fermentation → Ethanol → ETB	Butadien	7
BtX	Zucker/Stärke	Fermentation → CO ₂ → Methanol → MTO/MTA	Olefine/Aromaten	4–6
BtX	Lignocellulose	(Pyrolyse)/Vergasung → Methanol → MTO/MTA	Olefine/Aromaten	6–7
BtX	Lignocellulose	(Pyrolyse)/Vergasung → Fischer-Tropsch	Olefine/Aromaten	6–7
BtX	Lignocellulose	Verbrennung → CO ₂ → Methanol → MTO/MTA	Olefine/Aromaten	7
BtX	Lignocellulose	Verbrennung → CO ₂ → Fischer-Tropsch	Olefine/Aromaten	6–7
BtX	Lignocellulose	Hydrolyse/Fermentation → Ethanol → Dehydratisierung	Ethen	8–9
BtX	Lignocellulose	Hydrolyse/Fermentation → Ethanol → ETB	Butadien	7
BtX	Öle/Fette	Hydrierung → Naphtha → Steamcracking	Olefine/Aromaten	9
PtX	Abgase	CO ₂ -Abscheidung → Methanol → MTO/MTA	Olefine/Aromaten	7–8
PtX	Abgase	CO ₂ -Abscheidung → Synthesegas → Fischer-Tropsch	Olefine/Aromaten	6–7
PtX	Luft (DAC)	CO ₂ -Abscheidung → Methanol → MTO/MTA	Olefine/Aromaten	6
PtX	Luft (DAC)	CO ₂ -Abscheidung → Synthesegas → Fischer-Tropsch	Olefine/Aromaten	6

3.3 Routen zur Herstellung von Wasserstoff, Methan und Ammoniak

Wasserstoff, Methan und Ammoniak bilden sowohl eigenständige Intermediate als auch zentrale Vorprodukte weiterer Synthesen. BtX-Routen umfassen unter anderem Vergärung, Vergasung, Reformierung und die Nutzung biogenen CO₂. PtX-Routen basieren insbesondere auf Elektrolyse, CO₂-Abscheidung, Sabatier-Prozess und Haber-Bosch-Synthese.

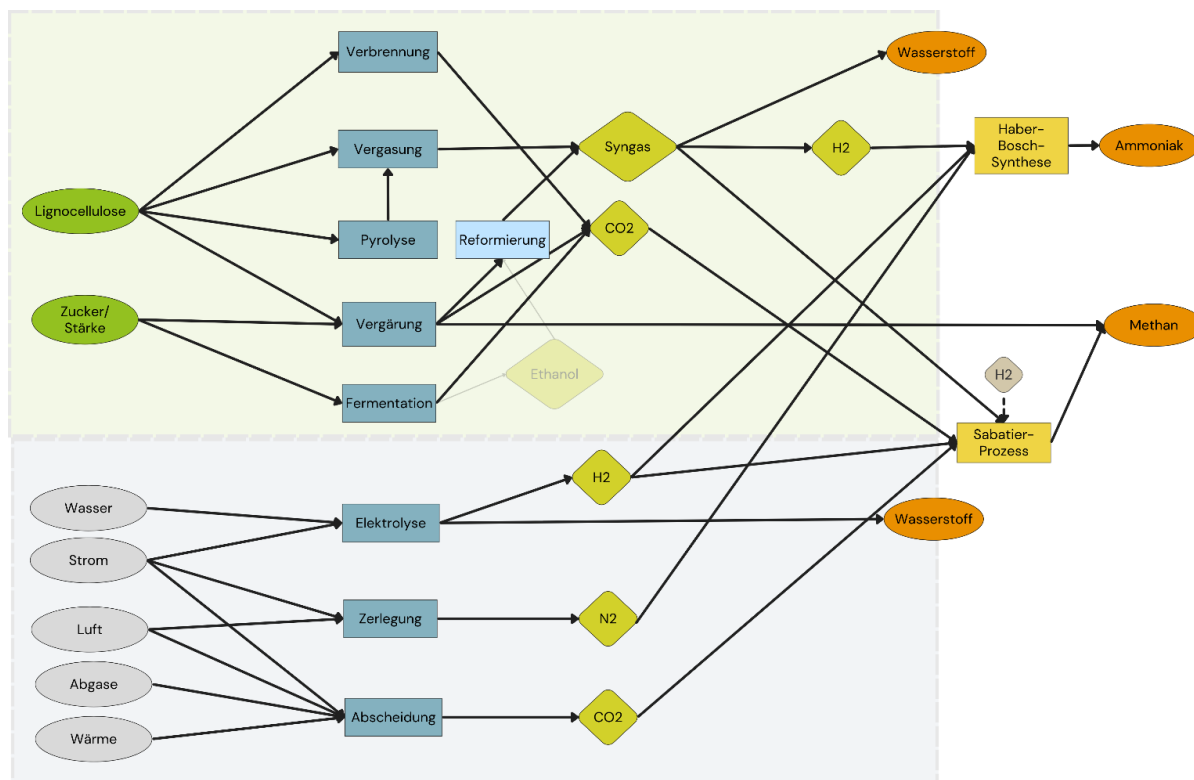


Abbildung 4: BtX- und PtX-Routen zur Herstellung von Wasserstoff, Methan und Ammoniak (Quelle: ifeu; aus der Vorstudie übernommen).

Tabelle 3: BtX- und PtX-Routen zur Herstellung von Wasserstoff, Methan und Ammoniak.

Pfad	Ausgangsstoff	Route	Intermediat	TRL gesamt
BtX	Zucker/Stärke	Vergärung	Methan	9
BtX	Zucker/Stärke	Vergärung → Methan → Reformierung	Wasserstoff	9
BtX	Zucker/Stärke	Vergärung → Methan → Reformierung/H ₂ -Bereitstellung → Haber-Bosch	Ammoniak	9
BtX	Zucker/Stärke	Vergärung → CO ₂ + H ₂ → Sabatier	Methan	6–7
BtX	Zucker/Stärke	Fermentation → CO ₂ + H ₂ → Sabatier	Methan	6–7
BtX	Lignocellulose	Pyrolyse/Vergasung → Synthesegas → H ₂ -Abtrennung	Wasserstoff	6
BtX	Lignocellulose	Pyrolyse/Vergasung → Synthesegas → Sabatier	Methan	6
BtX	Lignocellulose	Verbrennung → CO ₂ + H ₂ → Sabatier	Methan	8
PtX	Abgase	CO ₂ -Abscheidung + H ₂ → Sabatier	Methan	7
PtX	Luft (DAC)	CO ₂ -Abscheidung + H ₂ → Sabatier	Methan	6–7
PtX	Wasser/Strom	Elektrolyse	Wasserstoff	9
PtX	Wasser/Strom + Luft	Elektrolyse → H ₂ + N ₂ -Bereitstellung → Haber-Bosch	Ammoniak	8

3.4 Konkretisierung des Untersuchungsraums und Modulportfolio

Der in der Vorstudie beschriebene Untersuchungsraum ist im Rahmen der Leistungserbringung auf Grundlage der in der Leistungsbeschreibung vorgesehenen vertieften technischen Recherche zu konkretisieren. Ziel ist der Aufbau eines technologieorientierten Modulportfolios, aus dem sich PtX-, BtX- und kombinierte PtX-/BtX-Routen durch technisch zulässige Verknüpfung einzelner Module erzeugen lassen. Identische Prozessschritte sind als wiederverwendbare Module abzubilden und nicht mehrfach pfadspezifisch. Bereits bestimmte Ressourcenprofile vorgelagerter Intermediate werden nach der im Anhang beschriebenen mengenbezogenen Übertragungslogik in nachgelagerte Module übernommen.

Die Module sind nach ihrer technischen Funktion und ihrer Input-/Outputstruktur abzugrenzen. Technologische Ausführungsvarianten desselben Prozessschritts können innerhalb eines Modultyps parametrisiert werden, solange ihre getrennte Abbildung und ihre unterschiedlichen Ressourcenprofile nachvollziehbar bleiben. Unterscheiden sich Technologien wesentlich in Konversionsprinzip, Input-/Outputstruktur oder Ressourceninanspruchnahme, sind

getrennte Module oder eindeutig getrennte Technologievarianten vorzusehen. Vorgelagerte Material-, Energie- und sonstige Bereitstellungsketten müssen nicht bis auf einzelne industrielle Produktionsprozesse als frei kombinierbare Module aufgelöst werden. Eine weitergehende Auflösung ist vor allem dort nötig, wo die Wahl der Bereitstellungsrouten selbst als variable Entscheidung im Analysewerkzeug untersucht werden soll.

Die in Tabelle 4 aufgeführten Modulgruppen bilden den verbindlichen fachlichen Abdeckungs- und Prüfrahmen des Modulportfolios. Das Analysewerkzeug muss die dort beschriebenen Prozessfunktionen so abbilden können, dass sich die für den Untersuchungsraum relevanten PtX-, BtX- und kombinierten PtX-/BtX-Routen konsistent zusammenstellen lassen. Die in der Spalte „Module beziehungsweise Technologievarianten“ genannten Technologien und Verfahrensvarianten sind Beispiele und Anhaltspunkte, aber keine verbindliche Vorgabe. Daraus folgt keine Pflicht, jede aufgeführte Technologie als eigenes Modul oder eigene Variante umzusetzen. Der AN prüft bei der technischen Konkretisierung, welche Module und Varianten für eine fachlich vollständige und konsistente Abbildung erforderlich sind. Zusätzliche technisch relevante Varianten können ergänzt werden. Einzelne Varianten können fachlich begründet zusammengefasst werden, sofern ihre unterschiedlichen Input-/Outputstrukturen, Parameter und Ressourcenprofile weiterhin sachgerecht und nachvollziehbar abgebildet bleiben.

Tabelle 4: Modulgruppen und orientierende Technologievarianten.

Nr.	Modulgruppe (verbindlich)	Module bzw. Technologievarianten (orientierend)
1	Erneuerbare Strombereitstellung	PV-Freifläche; PV-Dach; Wind onshore; Wind offshore; ggf. weitere vereinbarte erneuerbare Stromquellen
2	Biomassebereitstellung	Ölpflanzen; Restöle/-fette; Zucker-/Stärkepflanzen; entsprechende Reststoffe; Wald-/Forstholz; KUP/Energiegräser; Waldrestholz; Sägenebenprodukte; Stroh; Altholz; Gülle; Bioabfall; Klärschlamm; weitere geeignete organische Reststoffe
3	Biomasseaufbereitung	Zerkleinerung; Trocknung/Feuchteanpassung; Ölgewinnung/Pressung; Ölraffination; Zuckerextraktion; Stärkeaufschluss/Verzuckerung; lignocellulose Vorbehandlung; Hydrolyse
4	Wasserbereitstellung und -aufbereitung	Süßwasserbereitstellung; Prozesswasseraufbereitung; Demineralisierung/Deionisierung; ggf. Meerwasserentsalzung
5	CO₂-Bereitstellung	hochkonzentriertes biogenes CO ₂ z. B. aus Fermentation; CO ₂ -Abtrennung aus Biogas; CO ₂ -Abscheidung aus geeigneten Abgasen; verschiedene Abscheidetechnologien; DAC (NT/HT); Trocknung/Reinigung; Verdichtung
6	Luftzerlegung und Industriegase	kryogene Luftzerlegung; PSA/VPESA; Membrantrennung; N ₂ - und ggf. O ₂ -Bereitstellung
7	Elektrolyse und elektrolytische H₂-Bereitstellung	AEL; PEM; Hochtemperaturelektrolyse/SOEC; weitere hinreichend relevante Elektrolysetechnologien; H ₂ -Reinigung/Trocknung und Verdichtung
8	Biologische Konversion	anaerobe Vergärung; Zucker-/Stärkefermentation zu Ethanol; lignocellulosebasierte Fermentation; Syngasfermentation soweit relevant; biologische Methanisierung
9	Thermochemische Biomassekonversion	Verbrennung; Vergasung; Pyrolyse; katalytische Pyrolyse; ggf. hydrothermale Konversionsverfahren
10	Reforming und Synthesegaserzeugung/-konditionierung	SMR; ATR; partielle Oxidation; Reformierung biogener Flüssigkeiten; WGS; RWGS; CO ₂ -Elektrolyse bzw. Co-Elektrolyse soweit technisch relevant; Gasreinigung; Syngaskonditionierung; H ₂ -Abtrennung
11	Methan-/Biomethanbereitstellung und Methanisierung	Biogasaufbereitung; katalytische CO ₂ -Methanisierung/Sabatier; CO-Methanisierung/SNG; biologische Methanisierung
12	Methanolsynthese	Methanolsynthese aus Synthesegas; direkte CO ₂ -Hydrierung; Rohmethanolaufarbeitung und -reinigung
13	Ammoniaksynthese	H ₂ /N ₂ -Feedkonditionierung; Haber-Bosch; NH ₃ -Abtrennung; Synthesegas-Recycle/Purge
14	Kohlenwasserstoff-/Naphtha-Plattform	Fischer-Tropsch; Hydrierung/Hydrodeoxygenierung von Ölen und Fetten; Bioöl-/Biocrude-Upgrading; Hydrocracking/Hydroisomerisierung; Fraktionierung zu LPG/Naphtha bzw. weiteren Kohlenwasserstofffraktionen
15	Olefinsynthese	Ethanoldehydratisierung zu Ethen; ETB; MTO; MTP; Steamcracking; elektrifiziertes Steamcracking; Propandehydrierung; C ₄ -Dehydrierung; Olefinmetathese; relevante FT-/Syngas-to-Olefins-Routen; ggf. weitere ausreichend reife Routen
16	Aromatensynthese	MTA; katalytisches Reforming erneuerbaren Naphthas; Aromatengewinnung aus Pyrolysebenzin; C ₃ /C ₄ -Aromatisierung; katalytische Biomassepyrolyse; ligninbasierte Aromatenrouten; ggf. Ethanol-/Syngas-to-Aromatics
17	Produktaufarbeitung und Trennung	Destillation; Gas-/Flüssigtrennung; C ₂ -/C ₃ -/C ₄ -Fraktionierung; Butadienextraktion; Pyrolysebenzinhydrierung; Aromatenextraktion; BTX-Fraktionierung und weitere produktspezifische Trennschritte
18	Transport, Konditionierung und Speicherung	Transport fester Biomasse; Flüssigtransport; Gastransport/Pipeline; CO ₂ - und H ₂ -Transport soweit relevant; Kompression; Verflüssigung; Zwischenlagerung bzw. Pufferung

3.4.1 Vertiefte Abbildung der Strombereitstellung

Da die Strombereitstellung insbesondere für PtX-Routen einen wesentlichen Einfluss auf die Ressourceninanspruchnahme besitzt, sind die zugrunde gelegten erneuerbaren Stromerzeugungstechnologien mit jeweils eigenständigen bzw. eindeutig unterscheidbaren Ressourcenprofilen zu hinterlegen.

Für Photovoltaik sind mindestens Freiflächen- und Dachkonfigurationen so zu unterscheiden, dass Unterschiede der physischen bzw. zeitbezogenen Flächeninanspruchnahme sachgerecht abgebildet werden können. Für Windenergie sind mindestens Onshore- und Offshore-Konfigurationen getrennt zu berücksichtigen.

Für eine aussagekräftige Sensitivitätsanalyse der Module sind in der Parametrisierung der Strombereitstellung insbesondere technischer Stromertrag beziehungsweise Vollaststunden, geografischer Bezug, Lebensdauer, Flächeninanspruchnahme, Süßwasserverbrauch und die über geeignete Hintergrunddaten bestimmten infrastrukturellen und rohstoffbezogenen Ressourcenbeiträge zu hinterlegen.

3.4.2 Vertiefte Abbildung der Biomassebereitstellung

Für BtX-Routen ist die Biomassebereitstellung aufgrund ihres unmittelbaren Einflusses insbesondere auf Flächen- und Wasserinanspruchnahme differenzierter als eine reine Einteilung in übergeordnete Biomasseklassen abzubilden.

Für die zu untersuchenden Routen sind daher innerhalb der Gruppen

- öl- und fetthaltige Biomassen,
- zucker- und stärkehaltige Biomassen,
- lignocellulosehaltige Biomassen sowie
- nasse organische Rest- und Abfallstoffe

jeweils repräsentative konkrete Biomassen bzw. Feedstocks auszuwählen und zu parametrisieren.

Als orientierende Beispiele kommen Ölpflanzen wie Raps, Sonnenblume oder Soja, Zucker- und Stärkepflanzen wie Zuckerrübe, Zuckerrohr, Mais oder Weizen, lignocellulosehaltige Quellen wie Wald- und Forstholz, Kurzumtriebsplantagen, Energiegräser, Waldrestholz, Sägenebenprodukte, Stroh oder Altholz sowie Rest- und Abfallstoffe wie Altspeiseöle, tierische Fette, Gülle, Bioabfälle, Klärschlämme und geeignete industrielle biogene Reststoffe in Betracht. Aus der beispielhaften Nennung folgt keine Verpflichtung, jeden genannten Feedstock zu parametrisieren. Die konkrete Auswahl ist anhand ihrer technischen Anschlussfähigkeit an die betrachteten Routen, ihrer praktischen Relevanz sowie der Verfügbarkeit belastbarer Daten festzulegen.

Für eine aussagekräftige Sensitivitätsanalyse der Module sind in der Parametrisierung der ausgewählten Biomassen soweit möglich Herkunft und geografischer Bezug, Biomasseertrag, Trockenmasse- bzw. Feuchtegehalt, Flächenbedarf bzw. zeitbezogene Flächeninanspruchnahme, physischer Süßwasserverbrauch einschließlich gegebenenfalls relevanter Bewässerung, Bereitstellungsenergie, Ernte bzw. Sammlung, notwendige Erstaufbereitung, Lagerung und systemrelevanter Transport zu berücksichtigen.

Bei Rest-, Neben- und Abfallstoffen ist zusätzlich transparent festzulegen, ab welchem Punkt der jeweiligen Vorkette Ressourcenbeiträge übernommen werden und nach welchen Subdivisions-, Allokations- oder Cut-off-Regeln gegebenenfalls vorgelagerte Ressourceninanspruchnahmen zugeordnet werden.

4. Ressourcenindikatoren und Indikatorspezifische Berechnungslogik

Die Ressourcenindikatoren Energie, Wasser, Land, RMC/MF, TMR und ADP sind **verbindlich** im Analysewerkzeug abzubilden. GWP ist ausschließlich bei Beauftragung der optionalen Leistung nach Kapitel 4.7 zu berücksichtigen. In den folgenden Unterkapiteln werden die **verbindlichen** Ergebnis-, Abgrenzungs- und Datenanforderungen jeweils von methodischen Umsetzungshinweisen getrennt. Als methodische Umsetzungshinweise gekennzeichnete Gleichungen und Berechnungswege sind **nicht in ihrer konkreten Form verbindlich** und können durch fachlich gleichwertige oder bessere Ansätze ersetzt werden. **Eine nicht bindende methodische Umsetzung stellt keine optionale Leistung dar.**

4.1 Energie

Verbindliche Anforderung: Der Energieindikator ist als eigenständige Ergebnisgröße auszuweisen. Strom, Wärme und Brennstoffe sind in der Datengrundlage getrennt auszuweisen.

Methodischer Umsetzungshinweis (nicht bindend): Der direkte Energiebeitrag kann aus den unterschiedlichen eingesetzten Energieformen bestimmt werden:

$$D_{m,E} = \sum_e E_{m,e} \cdot CF_{e,E}$$

Je nach festgelegter Systematik kann $CF_{e,E}$ beispielsweise den direkten Energieinput oder einen Primärenergie-, KEA- bzw. CED-Faktor abbilden. Strom, Wärme und Brennstoffe sind in der Datengrundlage getrennt auszuweisen.

4.2 Wasser

Verbindliche Anforderung: Als physischer Kernindikator ist der Süßwasserverbrauch in m³ auszuweisen.

Methodischer Umsetzungshinweis (nicht bindend): Grundsätzlich kann gelten:

$$D_{m,W}^{phys} = W_{m,Entnahme} - W_{m,anrechenbareRückgabe}$$

Für eine standort- oder knappheitsgewichtete Wasserbewertung, ist diese als separater Indikator mit eigener Ergebniseinheit auszuweisen. Beispielsweise kann gelten:

$$D_{m,W}^{gew} = \sum_w W_{m,w}^{Verbrauch} \cdot CF_{w,W}$$

Die gewichtete Größe ersetzt nicht den physischen Süßwasserindikator in m³. Entnahme, Rückgabe und tatsächlicher Verbrauch sowie die verwendeten Bewertungsfaktoren sind methodisch eindeutig voneinander abzugrenzen.

4.3 Land

Verbindliche Anforderung: Für den Landindikator sind reiner Flächenbedarf und zeitbezogene Flächeninanspruchnahme dimensionsmäßig zu unterscheiden.

Methodischer Umsetzungshinweis (nicht bindend): Der reine Flächenbedarf kann grundsätzlich bestimmt werden als:

$$A_{m,L} = \sum_l A_{m,l}$$

Wird zusätzlich die Dauer der Flächenbeanspruchung berücksichtigt, ergibt sich die zeitbezogene Flächeninanspruchnahme als:

$$L_{m,L} = \sum_l A_{m,l} \cdot t_{m,l}$$

Für ertragsabhängige Biomassebereitstellung ist zwischen jährlichen Stoffströmen und Gesamtmengen zu unterscheiden. Bei einem jährlichen Biomassebedarf und einem Flächenertrag, der als Masse je Fläche und Jahr angegeben ist, gilt für den erforderlichen Flächenbedarf:

$$A_{Biomasse} = \frac{\dot{x}_{Biomasse}}{Y_{Biomasse}}$$

Für eine über den Betrachtungszeitraum kumulierte Biomassemenge ergibt sich entsprechend die zeitbezogene Flächeninanspruchnahme:

$$L_{Biomasse} = \frac{x_{Biomasse}}{Y_{Biomasse}}$$

Für flächenbezogene erneuerbare Energieerzeugung gilt analog bei einem jährlichen Energiebedarf und einem flächenspezifischen Energieertrag je Fläche und Jahr:

$$A_{EE} = \frac{\dot{E}_{benötigt}}{Y_{EE,Fläche}}$$

Für eine über den Betrachtungszeitraum kumulierte Energiemenge ergibt sich entsprechend die zeitbezogene Flächeninanspruchnahme:

$$L_{EE} = \frac{E_{benötigt}}{Y_{EE,Fläche}}$$

Die Einheiten sind entsprechend konsistent zu wählen: Flächenbedarf in m² bzw. ha, zeitbezogene Flächeninanspruchnahme in m²·a bzw. ha·a; Flächenerträge beispielsweise in kg/(ha·a) bzw. MWh/(ha·a). Damit können geografische und klimatische Unterschiede unmittelbar als Parameter der Ressourcenbilanz berücksichtigt werden.

4.4 Raw Material Consumption / Material Footprint

Verbindliche Anforderung: RMC/MF ist als eigenständiger Ressourcenindikator auszuweisen. Die zugrunde liegende Datenstruktur muss eine Aufschlüsselung nach geeigneten Materialgruppen, insbesondere metallischen Rohstoffen, nichtmetallischen Mineralien sowie fossilen und biotischen Rohstoffen, ermöglichen.

Methodischer Umsetzungshinweis (nicht bindend):

$$D_{m,RMC} = \sum_r M_{m,r} \cdot CF_{r,RMC}$$

mit

$M_{m,r}$: eingesetzte Menge eines Materials bzw. Rohstoffs,

$CF_{r,RMC}$: zugehöriger RMC-/MF-Faktor.

4.5 Total Material Requirement

Verbindliche Anforderung: TMR ist als eigenständiger Ressourcenindikator auszuweisen. Der verwendete TMR-Faktor und dessen Systemgrenze sind transparent zu dokumentieren.

Methodischer Umsetzungshinweis (nicht bindend):

$$D_{m,TMR} = \sum_r M_{m,r} \cdot CF_{r,TMR}$$

4.6 Abiotic Depletion Potential

Verbindliche Anforderung: ADP ist als eigenständiger Ressourcenindikator auszuweisen. Die verwendete ADP-Methodik, Referenzsubstanz und Datengrundlage sind einheitlich festzulegen. Materialmenge beziehungsweise Ressourcenfluss und Charakterisierungsfaktor müssen auf derselben Bilanzenebene liegen; elementare Ressourcenflüsse und bereits vorcharakterisierte Materialfaktoren dürfen innerhalb derselben Berechnung nicht vermischt werden.

Methodischer Umsetzungshinweis (nicht bindend):

$$D_{m,ADP} = \sum_r M_{m,r} \cdot CF_{r,ADP}$$

4.7 Optionaler Indikator: Global Warming Potential (GWP)

Konditionale Anforderung – optionale Leistung: Das Global Warming Potential ist ausschließlich bei Beauftragung der in der Leistungsbeschreibung separat ausgewiesenen optionalen GWP-Leistung zu berücksichtigen. In diesem Fall sind die verwendeten Charakterisierungsfaktoren und der Zeithorizont transparent zu dokumentieren und GWP als eigenständiger Indikator analog zur übrigen modularen Bilanzierungslogik in Datenstruktur, Berechnung und Ergebnisdarstellung abzubilden

$$D_{m,GWP} = \sum_g M_{m,g} \cdot CF_{g,GWP}$$

5. Mathematische Grundlage der modularen Bilanzierungslogik

Die in diesem Kapitel beschriebenen Bilanzierungs-, Übertragungs-, Zuordnungs- und Abgrenzungsprinzipien bilden **verbindliche** fachliche Rahmenvorgaben für das Analysewerkzeug. Die dargestellte mathematische Notation und einzelne Beispielgleichungen sind nicht in ihrer konkreten Schreibweise vorgegeben. Fachlich äquivalente mathematische oder softwaretechnische Umsetzungen sind zulässig, sofern sie dieselben Bilanzierungszusammenhänge abbilden und zu nachvollziehbaren und reproduzierbaren Ergebnissen führen.

5.1 Grundnotation

Für ein Modul m und einen Indikator k werden folgende Größen verwendet:

Symbol	Bedeutung
$x_{m,j}$	Menge des Inputstroms j in Modul m
$y_{m,r}$	Menge des Outputstroms r
$p_{j,k}$	bereits bestimmtes kumuliertes Ressourcenprofil des Inputs j für Indikator k
$D_{m,k}$	direkter zusätzlicher Ressourcenbeitrag des Moduls m
$B_{m,k}$	kumulierter Ressourcenwert des Moduls vor einer ggf. erforderlichen Zuordnung auf mehrere Outputs
$\alpha_{m,r}$	Zuordnungs- bzw. Allokationsfaktor für Output r
$p_{m,r,k}$	mengenbezogener Übertragungsfaktor des Outputs r für den Indikator k

Der mengenbezogene Übertragungsfaktor dient ausschließlich dazu, bereits bestimmte Ressourcenprofile eines Zwischenprodukts entsprechend der tatsächlich benötigten Einsatzmenge in nachgelagerte Module zu übertragen. Er stellt keine übergeordnete funktionale Einheit der Gesamtbetrachtung dar.

5.2 Direkter Ressourcenbeitrag eines Moduls

Der zusätzliche Ressourcenbeitrag eines Moduls ergibt sich aus den diesem Modul unmittelbar zuzuordnenden Ressourcen-, Energie- und Materialinputs:

$$D_{m,k} = \sum_h z_{m,h} \cdot CF_{h,k} + I_{m,k}$$

mit

$z_{m,h}$: Menge eines direkt dem Modul zugeordneten Inputs h ,

$CF_{h,k}$: Umrechnungs-, Ressourcen- bzw. Charakterisierungsfaktor für den Indikator k ,

$I_{m,k}$: anteilig zuzurechnender Infrastruktur- bzw. Anlagenbeitrag.

Ein Ressourcenbeitrag darf dabei nur einmal erfasst werden. Ein Input ist entweder als bereits bilanziertes vorgelagertes Modul mit einem Ressourcenprofil $p_{j,k}$ oder als unmittelbar zu charakterisierender direkter Input zu berücksichtigen.

5.3 Kumuliertes Ressourcenprofil bei einem oder mehreren Inputs

Der kumulierte Ressourcenwert eines Moduls ergibt sich aus den übernommenen Ressourcenprofilen sämtlicher vorgelagerter Inputs und dem zusätzlichen Beitrag des aktuellen Prozessschrittes:

$$B_{m,k} = D_{m,k} + \sum_j x_{m,j} \cdot p_{j,k}$$

Damit gilt beispielsweise bei zwei konvergierenden Inputs:

$$B_{m,k} = D_{m,k} + x_{m,1}p_{1,k} + x_{m,2}p_{2,k}$$

Für eine Methanolsynthese könnte sich entsprechend ergeben:

$$B_{MeOH,k} = D_{Synthese,k} + x_{H_2}p_{H_2,k} + x_{CO_2}p_{CO_2,k}$$

Die Gleichung ist separat für jeden Indikator anzuwenden. Energie, Wasser, Land, RMC/MF, TMR, ADP und gegebenenfalls GWP bleiben dabei voneinander unabhängige Ergebnisgrößen.

5.4 Mengenbezogener Übertragungsfaktor

Damit ein erzeugtes Intermediat oder Zwischenprodukt in einem nachgelagerten Modul mengenbezogen berücksichtigt werden kann, ist aus dem kumulierten Ressourcenwert ein Übertragungsfaktor je Einheit des erzeugten Stoffstroms zu bestimmen.

Bei einem Output gilt:

$$p_{m,k} = \frac{B_{m,k}}{y_m}$$

Der Faktor besitzt die Dimension:

$$\frac{\text{Einheit des Indikators } k}{\text{physische Einheit des Outputs}}$$

Beispielsweise:

- MWh je kg H₂,
- m³ Wasser je kg H₂,
- m²·a je kg Intermediat,
- kg RMC je kg Intermediat.

Wird das Intermediat/ Zwischenprodukt anschließend in einem anderen Modul in der Menge x eingesetzt, wird dessen vorgelagerter Ressourcenbeitrag über

$$x \cdot p_{m,k}$$

in die neue Bilanz eingestellt.

Auf diese Weise kann ein bereits bestimmtes Ressourcenprofil beliebig oft als Input weiterer Module verwendet werden, ohne den vollständigen vorgelagerten Pfad erneut zu bilanzieren.

5.5 Behandlung von Wirkungsgraden, Erträgen und Ausbeuten

Technische Wirkungsgrade und Ausbeuten sowie standortbezogene Erträge sind bei der Bestimmung der erforderlichen Inputmengen eines Moduls zu berücksichtigen. Die nachfolgenden Gleichungen zeigen mögliche mathematische Umsetzungen dieses Grundprinzips – **nicht bindend**.

Für einen einfachen Zusammenhang zwischen Input und Output gleicher bzw. kompatibler Bezugsgrößen kann gelten:

$$\eta_m = \frac{y_m}{x_m}$$

und damit:

$$x_m = \frac{y_m}{\eta_m}$$

Bei unterschiedlichen Stoffströmen ist ein reines Verhältnis von Output- zu Inputmenge in der Regel nicht ausreichend. Ist zusätzlich ein stöchiometrischer oder technisch erforderlicher Inputkoeffizient bekannt, kann die benötigte Inputmenge beispielsweise als

$$x_{m,j} = \frac{s_{m,j} \cdot y_m}{\eta_{m,j}}$$

bestimmt werden. Der Inputkoeffizient bildet dabei die stöchiometrisch bzw. technisch erforderliche Inputmenge je Einheit des betrachteten Outputs ab; Wirkungsgrad bzw. Ausbeute korrigieren diese theoretische bzw. technische Einsatzmenge.

Damit wirkt der Wirkungsgrad nicht nur auf einen unmittelbaren Energie- oder Ressourcenbedarf des aktuellen Moduls, sondern auch auf die Menge der benötigten vorgelagerten Intermediate:

$$B_{m,k} = D_{m,k} + \sum_j \frac{s_{m,j} \cdot y_m}{\eta_{m,j}} p_{j,k}$$

Dies ist insbesondere für die spätere Sensitivitätsanalyse relevant.

5.6 Anlagen- und Infrastrukturbeiträge

Langlebige Anlagen- und Infrastrukturbeiträge sind anteilig auf die über ihre technische Lebensdauer bereitgestellte Leistung beziehungsweise Outputmenge umzulegen. Die nachfolgend dargestellten Gleichungen zeigen eine mögliche Umsetzung dieses verbindlichen Umlageprinzips.

Für ein Single-Output-Modul bzw. eine eindeutig definierte gemeinsame Referenzgröße kann hierfür gelten:

$$p_{m,k}^{infra} = \frac{\sum_l M_{m,l}^{Anlage} \cdot CF_{l,k}}{Y_m^{Lebensdauer}}$$

Der Infrastrukturbeitrag für die im betrachteten Modul erzeugte Menge ergibt sich anschließend aus:

$$I_{m,k} = y_m \cdot p_{m,k}^{infra}$$

Dabei müssen die betrachtete Outputmenge und die über die Lebensdauer zugrunde gelegte Gesamtoutputmenge auf derselben physikalischen Bezugsgröße beruhen. Bei Mehrproduktmodulen ist der Infrastrukturaufwand zunächst als gemeinsamer Modulbeitrag zu erfassen und anschließend nach der in Abschnitt 5.7 ‚Module mit mehreren Outputs‘ festgelegten Zuordnungs- bzw. Allokationslogik auf die Outputs zu verteilen; eine willkürliche Division durch nur einen der Outputs ist zu vermeiden.

Damit können unter anderem technische Lebensdauer, Kapazitätsfaktor, Volllaststunden, Auslastung und Materialintensität der Anlage auf die Ressourcenprofile wirken.

5.7 Module mit mehreren Outputs

Für Module mit mehreren relevanten Outputs ist die nachfolgend beschriebene Entscheidungshierarchie verbindlich: Soweit fachlich möglich, ist zunächst eine direkte Zuordnung durch Subdivision vorzunehmen. Ist eine direkte Zuordnung nicht möglich, ist eine fachlich begründete Allokationslogik anzuwenden. Die konkrete Wahl des Allokationsschlüssels ist nicht vorgegeben, muss jedoch für den jeweiligen Prozess fachlich geeignet, transparent begründet und konsistent angewendet werden.

Bei direkter Zuordnung kann der jeweilige Output separat bilanziert werden:

$$B_{m,r,k} = D_{m,r,k} + \sum_j x_{m,j,r} p_{j,k}$$

Für die Allokation gilt:

$$B_{m,r,k} = \alpha_{m,r} \cdot B_{m,k}$$

mit

$$\sum_r \alpha_{m,r} = 1$$

und anschließend:

$$p_{m,r,k} = \frac{\alpha_{m,r} B_{m,k}}{y_{m,r}}$$

Der Allokationsfaktor kann beispielsweise massenbezogen, energiebezogen, ökonomisch oder anhand eines nachgewiesenen physikalisch-kausalen Zusammenhangs bestimmt werden.

Beispielsweise massenbezogen:

$$\alpha_{m,r}^{Masse} = \frac{y_{m,r}}{\sum_s y_{m,s}}$$

oder energiebezogen:

$$\alpha_{m,r}^{Energie} = \frac{y_{m,r} H_r}{\sum_s y_{m,s} H_s}$$

mit dem jeweiligen Energieinhalt des Outputs. Eine massenbezogene Allokation ist nur zulässig, wenn sämtliche Outputmengen in derselben Masseneinheit vorliegen bzw. auf eine gemeinsame Massenbasis überführt wurden. Entsprechendes gilt für andere physische Allokationsschlüssel. Eine energiebezogene Allokation ist nur anzuwenden, wenn der Energieinhalt für die betrachteten Outputs fachlich eine geeignete gemeinsame Bezugsgröße darstellt.

Die gewählte Behandlung von Mehrproduktprozessen, Koppelprodukten und Nebenströmen ist für alle betrachteten Pfade konsistent anzuwenden und fachlich zu begründen.

6. Ergebnisdarstellung

Die in diesem Kapitel beschriebenen Anforderungen an die Ergebnisdarstellung, die Prozesskettenübersicht, das kumulierte Ressourcenprofil, die modulspezifische Sensitivitätsdarstellung sowie die zugrunde liegende tabellarische Datengrundlage sind **verbindliche funktionale Anforderungen**. Die konkrete grafische und technische Umsetzung bleibt dem Auftragnehmer überlassen, sofern die beschriebenen Informationsinhalte, Auswertungsfunktionen, Rückführbarkeit und Reproduzierbarkeit vollständig gewährleistet werden. Als beispielhaft oder schematisch gekennzeichnete Abbildungen und Darstellungen sind hinsichtlich ihrer konkreten Gestaltung **nicht verbindlich**.

Das Analysewerkzeug muss für jede darin konfigurierte technisch zulässige Route eine horizontale Prozessketten Darstellung erzeugen können. Der Material- und Energiefluss verläuft grundsätzlich von links nach rechts. Rohstoff- und Energieinputs, Zwischenprodukte, konvergierende Stoffströme, Nebenströme sowie relevante Outputs sind den jeweiligen Modulen eindeutig zuzuordnen. Das Dashboard ist aus den im Analysewerkzeug hinterlegten Modul-, Parameter- und Ergebnisdaten reproduzierbar zu erzeugen; eine ausschließlich manuell erstellte statische Darstellung erfüllt diese Anforderung nicht.

Schematische lineare Prozesskette:

Ausgangsstoffbereitstellung → Aufbereitung → Konversion → Intermediat → weitere Konversion/Synthese → nachgelagertes Intermediat

Schematische konvergierende Prozesskette:

Wasserstoffbereitstellung — } → Synthesemodul → Intermediat
CO₂-Bereitstellung — }

Jedem Modul ist ein kompakter Auswertungsbereich zuzuordnen. Dieser besteht aus zwei komplementären Darstellungen:

- **Diagramm A – kumuliertes Ressourcenprofil**
- **Diagramm B – modulspezifische Sensitivität**

Die Kombination beider Darstellungen soll es ermöglichen, entlang der Prozesskette gleichzeitig die Höhe der Ressourceninanspruchnahme, deren Entstehung sowie die Robustheit der Ergebnisse gegenüber den für das jeweilige Modul maßgeblichen Parametern zu erfassen.

6.1 Diagramm A – kumuliertes Ressourcenprofil

Diagramm A bildet für jeden festgelegten Ressourcenindikator den kumulierten Wert am Ausgang des jeweiligen Moduls ab. Der Gesamtbalken entspricht dem kumulierten Ressourcenwert am Ausgang des Moduls. Die Balken eines Indikators sind in mindestens zwei Bestandteile zu gliedern:

- **übernommener Ressourcenbeitrag vorgelagerter Inputs bzw. Intermediate, zusätzlicher Ressourcenbeitrag des aktuell betrachteten Moduls.**

Schematische Leselogik:

Indikator k : | vorgelagerter Beitrag | zusätzlicher Modulbeitrag | = kumulierter Wert

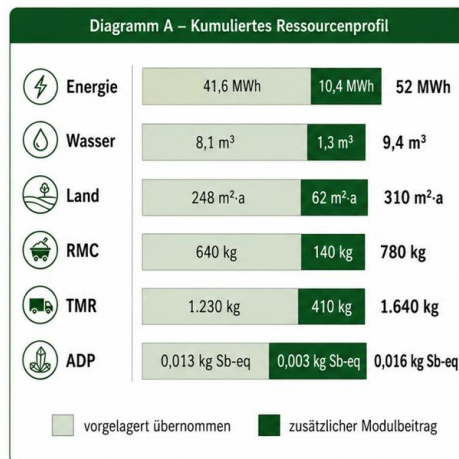


Abbildung 5: Beispielhafte Darstellung des kumulierten Ressourcenprofils (eigene Darstellung).

Die grafische Codierung ist über alle Module und Routen hinweg konsistent zu halten. Bei mehreren vorgelagerten Inputs können deren Beiträge, sofern dies analytisch erforderlich und grafisch übersichtlich möglich ist, zusätzlich unterschieden werden. Für die Enddarstellung ist eine Zusammenfassung zu einem vorgelagerten Beitrag zulässig, sofern die Einzelbeiträge in den zugrunde liegenden Tabellen nachvollziehbar dokumentiert werden.

Die kumulierten Werte aufeinanderfolgender Module stellen jeweils einen Bilanzstand dar und dürfen nicht über mehrere Prozessstufen hinweg addiert werden.

6.2 Diagramm B – modulspezifische Sensitivität

Diagramm B ergänzt das kumulierte Ressourcenprofil um eine kompakte Darstellung der Sensitivität des kumulierten Indikatorwerts am Ausgang des jeweiligen Moduls gegenüber den variablen Parametern des aktuell betrachteten Moduls.

Im Rahmen der modulspezifischen Sensitivitätsdarstellung werden Parameter vorgelagerter Module nicht erneut variiert und deren Parameterbandbreiten nicht kumuliert. Die Sensitivitätsdarstellung erfasst ausschließlich die durch Variation der dem aktuell betrachteten Modul zugeordneten technischen oder standortbezogenen Parameter verursachte Veränderung des kumulierten Indikatorwerts.

Die dargestellte Sensitivitätsbandbreite ist keine statistische Unsicherheits- oder Fehlerbandbreite. Sie beschreibt den Ergebnisbereich, der sich aus fachlich definierten plausiblen Parameterwerten ergibt. Da der Referenzwert innerhalb des zulässigen Parameterbereichs nicht zwingend mittig liegt und die Modellbeziehungen nicht linear sein müssen, können die relativen Abweichungen nach unten und oben asymmetrisch ausfallen.

Hierzu gehören beispielsweise Wirkungsgrad, Ausbeute, Ertrag, Verlustquote, Rückgewinnungsrate, Anlagenlebensdauer, Kapazitätsfaktor oder flächenspezifischer Energieertrag.

Vorgelagerte Ressourcenprofile werden für diese lokale Sensitivitätsbetrachtung auf ihrem jeweiligen Referenzwert konstant gehalten. Verändert ein lokaler Parameter jedoch die erforderliche Menge eines vorgelagerten Inputs, ist diese Mengenänderung vollständig zu berücksichtigen.

Sei θ_m der Vektor der variablen Parameter eines Moduls. Für die Sensitivitätsanalyse ist der betrachtete Output- bzw. Referenzfluss r auf dem Referenzniveau konstant zu halten:

$$y_{m,r}(\theta_m) = y_{m,r}^0$$

Unter dieser Randbedingung gilt bei einer Zuordnung bzw. Allokation nach Abschnitt 5.7 für den betrachteten Output r :

$$B_{m,r,k}(\theta_m) = \alpha_{m,r}(\theta_m) \left[D_{m,k}(\theta_m) + \sum_j x_{m,j}(\theta_m) p_{j,k}^{Ref} \right]$$

Für Single-Output-Module gilt $\alpha = 1$. Wird der Prozess nach Abschnitt 5.7 in Teilprozesse untergliedert (Subdivision), ist die dort definierte output-spezifische Bilanz unmittelbar auf den variierten Parametersatz anzuwenden.

Die vorgelagerten Ressourcenprofile bleiben dabei konstant:

$$p_{j,k} = p_{j,k}^{Ref}$$

Der Referenzwert des betrachteten Outputs ergibt sich aus:

$$B_{m,r,k}^0 = B_{m,r,k}(\theta_m^0)$$

Für die fachlich definierte Menge Θ_m technisch und intern konsistenter Parameterkonfigurationen ergeben sich die unteren und oberen Ergebnisgrenzen:

$$B_{m,r,k}^{\min} = \min_{\theta_m \in \Theta_m} B_{m,r,k}(\theta_m)$$

und

$$B_{m,r,k}^{\max} = \max_{\theta_m \in \Theta_m} B_{m,r,k}(\theta_m)$$

Für die grafische Darstellung können die Abweichungen auf den Referenzwert normiert werden:

$$\delta_{m,r,k}^{\min} = \frac{B_{m,r,k}^{\min} - B_{m,r,k}^0}{B_{m,r,k}^0} \cdot 100\%$$

$$\delta_{m,r,k}^{\max} = \frac{B_{m,r,k}^{\max} - B_{m,r,k}^0}{B_{m,r,k}^0} \cdot 100\%$$

Die relative Darstellung setzt einen von null verschiedenen und für eine relative Bewertung hinreichend großen Referenzwert voraus. Bei einem Referenzwert von null bzw. bei ungeeignet kleinen Referenzwerten ist die Sensitivitätsbandbreite in absoluten Indikatoreinheiten auszuweisen.

Diagramm B stellt je Indikator ausschließlich diese Ergebnisbandbreite dar:

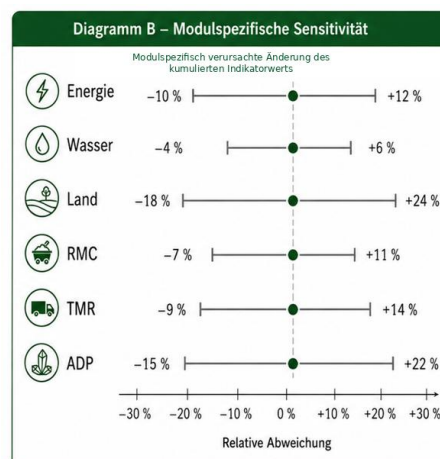


Abbildung 6: Beispielhafte Darstellung der modulspezifischen Sensitivität (eigene Darstellung)

In der Prozesskettenübersicht ist keine grafische Aufschlüsselung der einzelnen Sensitivitätstreiber erforderlich. Die zugrunde liegenden Parameter, Referenzwerte, unteren und oberen Ausprägungen sowie die daraus resultierenden Veränderungen sind in einer ergänzenden Parametertabelle vollständig und nachvollziehbar zu dokumentieren.

Dadurch bleibt die Prozesskettenübersicht lesbar, während die fachliche Nachvollziehbarkeit der Sensitivitätsanalyse erhalten bleibt.

6.3 Zusammenspiel der beiden Diagramme

Diagramm A und Diagramm B erfüllen unterschiedliche analytische Funktionen.

Diagramm A beantwortet:

- Wie hoch ist der Ressourcenwert am Ausgang dieses Moduls?
- Welcher Anteil wurde aus vorgelagerten Inputs übernommen?
- Welcher zusätzliche Ressourcenbeitrag entsteht durch das aktuelle Modul?
- An welcher Stelle entlang der Prozesskette entstehen indicatorspezifische Hotspots?

Diagramm B beantwortet:

- Wie robust ist der am Modul ausgewiesene Indikatorwert gegenüber den Variationen der für dieses Modul relevanten Parameter?
- In welcher Bandbreite kann sich der Wert unter plausiblen technischen oder standortbezogenen Bedingungen bewegen?
- Bei welchen Prozessstufen besteht eine besonders hohe Ergebnisabhängigkeit von den zugrunde gelegten Parametern?

Damit ergibt sich für jedes Modul ein einheitlicher Auswertungsblock:

Modul: Inputströme → Prozessschritt → Outputströme

A – kumuliertes Ressourcenprofil

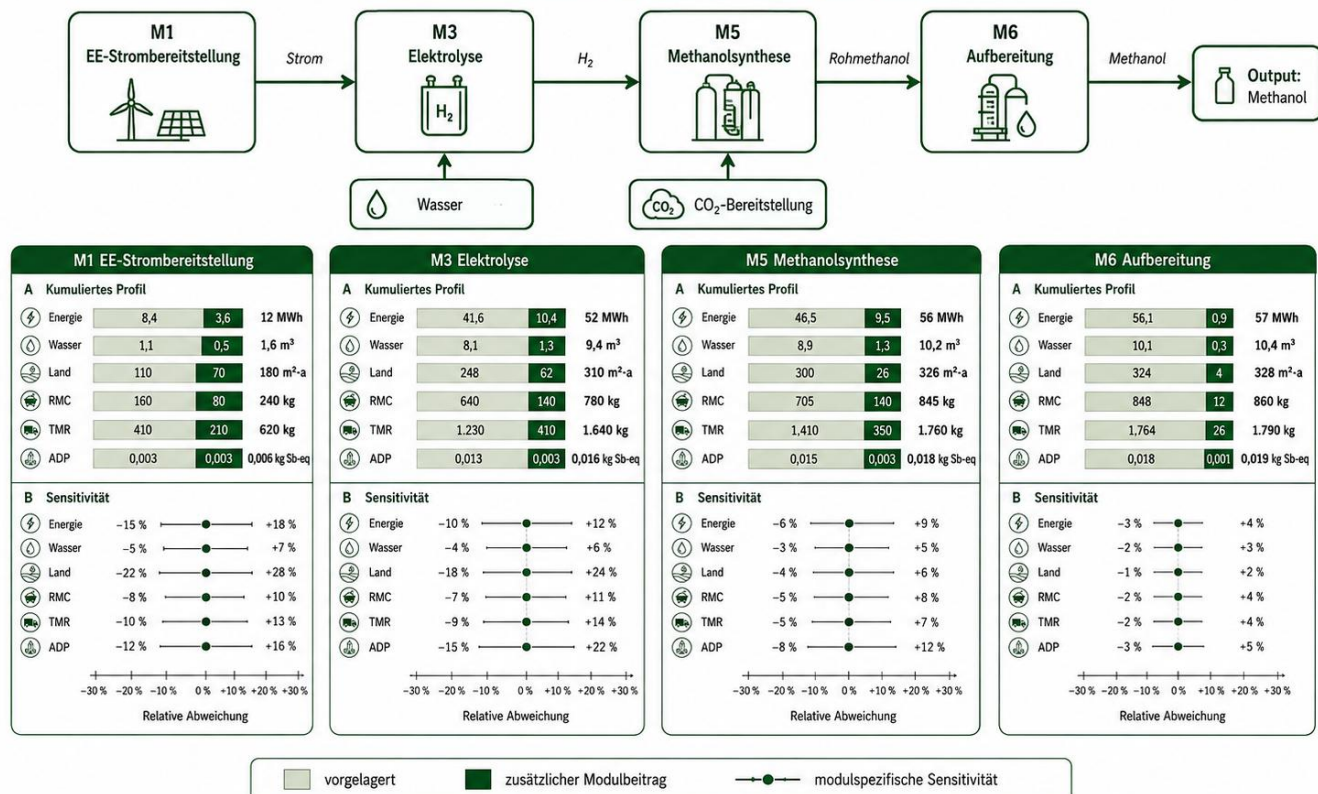
- indikatorspezifische absolute Werte,
- vorgelagerter Ressourcenbeitrag,
- zusätzlicher Modulbeitrag,
- kumulierter Wert am Modulausgang.

B – modulspezifisches Sensitivitätsprofil

- untere Ergebnissgrenze,
- Referenzwert,
- obere Ergebnissgrenze,
- vorzugsweise zusätzlich als relative Abweichung vom Referenzfall.

Exemplarischer Referenzpfad

Prozessketten-Dashboard – illustrative Werte



Hinweis: Schematische Prozessdarstellung; Werte nur illustrativ.

Abbildung 7: Beispielhafte grafische Darstellung eines Prozessketten-Dashboards (eigene Darstellung)

Die eigentliche Herleitung der Werte, die Parametrisierung, die Aufteilung der Ressourcenbeiträge sowie die Behandlung von Mehrproduktprozessen sind ergänzend tabellarisch zu dokumentieren.

6.4 Mindestanforderungen an die hinterlegte Datentabelle

Die grafische Prozesskettenübersicht ist durch eine maschinenlesbare bzw. weiterverarbeitbare tabellarische Datengrundlage zu hinterlegen. Für jedes Modul sind mindestens auszuweisen:

Kategorie	Erforderliche Angaben
Modul	Bezeichnung und Modul-ID
Inputs	Stoff-/Energiestrom, Menge, Einheit, Herkunftsmodul
Outputs	Stoff-/Energiestrom, Menge und Einheit
Technologie	Technologievariante sowie wesentliche technische Parameter einschließlich Einheit, Referenzwert und – soweit variabel – unterer und oberer Parametergrenze
Direkte Ressourcenbeiträge	Werte je Indikator
Vorgelagerte Ressourcenbeiträge	Beiträge je Input und Indikator
Kumuliertes Ressourcenprofil	Gesamtwert je Indikator am Modulausgang
Übertragungsfaktoren	Ressourcenprofil je Einheit des jeweiligen Outputs
Mehrproduktbehandlung	Subdivision, Allokationsregel bzw. sonstige Behandlung
Sensitivitätsparameter	Referenzwert sowie untere und obere Parametergrenze
Sensitivitätsergebnis	unterer, Referenz- und oberer Indikatorwert
Daten- und Quellenmetadaten	Quelle bzw. Datenbank/Datensatz, Bezugsjahr, geografischer Bezug, Abrufzeitpunkt, Datenbank-/Datenstand, Qualitätsbewertung und ggf. relevante Lizenzabhängigkeit
Infrastruktur	Relevante Anlagen- und Infrastrukturbeiträge einschließlich Bezugsgröße, Lebensdauer bzw. sonstiger erforderlicher Umlageparameter
Modul-/Datenversion	Nachvollziehbarer Datenstand bzw. Versionskennzeichnung und Zeitpunkt wesentlicher Aktualisierungen

Die tabellarische Datengrundlage und die grafische Darstellung müssen vollständig aufeinander rückführbar sein. Jeder in der Prozesskettenübersicht dargestellte Wert muss anhand der hinterlegten Eingangsdaten, Faktoren und Berechnungsschritte reproduzierbar sein.