Entscheidungsunterstützung zur Planung und Bewertung nachhaltiger industrieller Wertschöpfungsketten

dargestellt am Beispiel von Fahrzeugteilen

zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktors der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.)

von der KIT-Fakultät für Wirtschaftswissenschaften des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT)

genehmigte

Dissertation

von

Richard Carl Müller

Tag der mündlichen Prüfung: Referent: Korreferent: 07. Mai 2021 Prof. Dr. rer. pol. Frank Schultmann Prof. Dr. rer. pol. Magnus Fröhling

Vorwort

In der vorliegenden Dissertation wurde die Harvard-Zitierweise verwendet. Um zu vermeiden, dass die gleichen Quellen zu häufig genannt werden, wurde die Zitierweise wie folgt angepasst: Sofern sich eine Quelle auf den Inhalt nur eines Satzes bezieht, wurde diese vor dem Satzzeichen am Satzende genannt. Wenn sich eine Quelle auf den Inhalt mehrerer Sätze bezieht, wird die Quelle hinter das Satzzeichen der letzten zu zitierenden Aussage gestellt.

Diese Arbeit ist im Rahmen meiner Zeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Industriebetriebslehre und Industrielle Produktion (IIP) am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) in den Jahren 2015 bis 2020 entstanden. Während dieser Zeit habe ich von vielen Seiten Unterstützung erfahren, für die ich mich herzlich bedanken möchte.

Allen voran gilt mein Dank meinem Doktorvater Herrn Prof. Dr. Frank Schultmann für die Betreuung meiner Dissertation, die fachliche sowie persönliche Förderung und die unvergessliche Zeit am IIP, die von einem stets angenehmen Arbeitsklima geprägt war. Ich danke Herrn Prof. Dr. Magnus Fröhling für die Übernahme des Korreferats sowie Herrn Prof. Dr. Thomas Lützkendorf und Herrn Prof. Dr. Martin Klarmann für die Teilnahme am Prüfungskomitee. Des Weiteren gebührt mein Dank auch Herrn Prof. Noel Lindsay und seinen Mitarbeitern an der Adelaide Business School der University of Adelaide, die mich während meines vom Karlsruhe House of Young Scientists (KHYS) geförderten Aufenthalts unterstützten.

Danken möchte ich auch den vielen Kolleginnen und Kollegen am IIP; insbesondere danke ich Dr. Rebekka Volk, Dr. Felix Hübner, Elias Naber und Dr. Andreas Schiessl für die jahrelange gute Zusammenarbeit und Unterstützung zur Erstellung meiner Dissertation. Das schönste an meiner Zeit am Institut sind die vielen Freundschaften die entstanden sind. Neben Elias und Felix möchte ich auch Christoph, Daniel, Emil, Jann und Max hervorheben. Es war eine tolle Zeit mit euch, die mir immer in Erinnerung bleiben wird.

Die größte Unterstützung habe ich seit jeher durch meine Familie erhalten. Dafür danke ich meinen Eltern Angelika und Bernd, meinen Schwestern Elisa und Clara und auch danke ich Friedel, Reinhold, Ursula und Hans. Mein größter Dank geht dabei an meine Partnerin Judith für die fortwährende moralische Unterstützung und ihr Verständnis. Unsere größte Freude in dieser Zeit war die Geburt unseres Sohnes Carl, der in der Schlussphase der Dissertation zugleich auch meine größte Motivation war. Carl, ich wusste, dass ich die Dissertation fertig stellen muss, noch bevor du lernst nach mir zu rufen und mich zum Spielen aufzufordern. Nun zeigst du mir jeden Tag, dass ich mit meiner Vermutung richtig lag.

Hannover, Juni 2021

Richard Carl Müller

Kurzfassung

Die Dissertation widmet sich der Entwicklung eines Entscheidungsunterstützungssystems zur Planung und Bewertung nachhaltiger industrieller Wertschöpfungsketten und dessen exemplarische Anwendung in Fallstudien zur Automobil- und Zulieferindustrie (zum Beispiel der Metall- und Chemieindustrie).

Für die Planung nachhaltiger Wertschöpfungsketten stehen selten vollständige Informationen zur Verfügung, da sich Lieferketten aufgrund der Globalisierung des Beschaffungsmarktes zu sehr komplexen, intransparenten Liefernetzwerken entwickelt haben. Der Ursprung der eingekauften Produkte (beispielsweise das Werk des Lieferanten) sowie die dort eingesetzten Produktionsprozesse und deren Umweltwirkungen sind daher meist unbekannt. Zudem ist der Transformationsprozess zu einem nachhaltigen, beispielsweise klimaneutralen Unternehmen für einen Großteil der Unternehmen mit hohen, teils existenzgefährdenden Investitionen verbunden. Für Unternehmen besteht die zentrale Herausforderung darin, Maßnahmen entlang der Wertschöpfungskette zu identifizieren, die einen möglichst großen Effekt auf die Nachhaltigkeit haben und gleichzeitig mit möglichst geringen Kosten verbunden sind, damit der Unternehmen dazu in der Regel entsprechende Daten, Methoden und Bewertungssysteme.

Der in dieser Dissertation entwickelte Ansatz unterstützt Unternehmen und deren Entscheidungsträger bei der Planung klimafreundlicher und zugleich wirtschaftlicher Wertschöpfungsketten. Damit verfolgt die vorliegende Arbeit das Ziel, einen wesentlichen Beitrag zur Reduktion industrieller THG- Emissionen zu leisten, damit nationale und internationale Treibhausgasminderungsziele erreicht werden können und der vom Menschen verursachte Klimawandel begrenzt wird.

Im Fokus stehen die Wertschöpfungsstufen Materialherstellung, Materialverarbeitung/Endproduktherstellung, Produktnutzung und Ende des Lebenszyklus (zum Beispiel Deponierung, energetische Verwertung, Recycling). Für die Materialherstellung von Stahl, Aluminium und wichtigen chemischen Grundstoffen wurden hybride Life Cycle Assessment (LCA)-Modelle entwickelt, mit denen Materialhersteller erstmals werksspezifisch hinsichtlich ihrer THG-Intensität verglichen werden können. So kann der Carbon Footprint eines Produkts bereits durch die Auswahl klimafreundlicher Materialhersteller (Zulieferer) reduziert werden. Auch für die weiteren Wertschöpfungsstufen werden LCA-Modelle entwickelt und in das Entscheidungsunterstützungssystem integriert. Für die Phase der Materialverarbeitung/Endproduktherstellung wird darüber hinaus ein Bilanzierungsmodell geschaffen, das die Methoden Materialflusskostenrechnung und LCA miteinander kombiniert. Auf diese Weise werden parallel zu den THG-Emissionen die Herstellkosten eines Produkts ermittelt, die als ökonomisches Entscheidungskriterium verwendet werden. Für die Entscheidungsfindung werden unter allen kombinatorisch möglichen Wertschöpfungskettenkonfigurationen (Materialien, Lieferanten, Fertigungsketten, Produktnutzungsarten und möglichen Aktivitäten am Ende des Lebenszyklus) die pareto-optimalen Konfigurationen ermittelt. Auf Grundlage der pareto-optimalen Konfigurationen und der Präferenzen eines Entscheidungsträgers wird durch Methoden der multikriteriellen Entscheidungsanalyse und einer nachfolgenden Stabilitätsanalyse die für ein Unternehmen optimale Konfiguration einer Wertschöpfungskette berechnet sowie die THG-Vermeidungskosten bei der Produktherstellung beziffert. Das Entscheidungsunterstützungssystem wird am Beispiel eines Pkw-Bauteils angewendet. Dabei werden verschiedene Szenarien (zum Beispiel Antriebstechnik und Laufleistung des Pkw) und deren Auswirkung auf die Planung der Wertschöpfungskette untersucht.

Inhaltsverzeichnis

Vc	orwort			i
Ku	rzfass	ung		iii
In	haltsv	erzeich	nis	v
AŁ	bildu	ngsver	zeichnis	xv
Та	beller	verzei	chnis	.xxv
AŁ	okürzu	ngsver	zeichnis	xxxi
1	Einle	itung		1
	1.1	Proble	emstellung	1
	1.2	Zielse	tzung und Lösungsweg	5
2	Rahr	nenbe	dingungen und Anforderungen an eine Bewertung	
	indu	strielle	r THG-Emissionen	11
	2.1	Theor	etische Grundlagen nachhaltiger Wertschöpfungs-	
		ketter	۱	12
		2.1.1	Definition und Entwicklung der Nachhaltigkeit	12
		2.1.2	Dimensionen der Nachhaltigkeit	15
		2.1.3	Unternehmerische Nachhaltigkeit entlang der	
			Wertschöpfungskette	18
		2.1.4	Systemgrenzen nachhaltiger Wertschöpfungsketten in	
			dieser Arbeit	20
	2.2	Klima	wandel und Ziele zur Reduktion der THG-Emissionen	22
	2.3	Treibe	er industrieller THG-Emissionen	28
	2.4	Produ	ktionstechniken und THG-Emissionen der	
		Metal	lindustrie	33
		2.4.1	THG-Emissionen der Metallindustrie	33
		2.4.2	Eisen- und Stahlerzeugung	37

	2.4	.2.1	Eisen- und Stahlproduktion über die	
			Hochofenroute	37
	2.4	.2.2	Stahlproduktion über die Elektrostahlroute	40
	2.4.3	Alur	niniumherstellung	41
	2.4	.3.1	Produktion von Primäraluminium	42
	2.4	.3.2	Produktion von Sekundäraluminium	44
2.5	Produ	ktion	stechniken und THG-Emissionen der	
	Chem	ieind	ustrie	45
	2.5.1	Gru	ndlagen der Chemieindustrie und	
		trei	phausgasintensiver Erzeugnisse	45
	2.5.2	Hers	stellung petrochemischer Grundstoffe	53
	2.5	5.2.1	Steamcracken	55
	2.5	5.2.2	Fluid Catalytic Cracking (FCC)	58
	2.5.3	Hers	stellung von Chlor	60
	2.5.4	Hers	stellung von Toluoldiisocyanat (TDI)	63
2.6	Fertig	ungsv	verfahren zur Metall- und Kunststoffverarbeitung	65
	2.6.1	Gru	ndlagen der Produktion und Fertigungsverfahren	65
	2.6.2	Urfo	ormen	66
	2.6.3	Umf	ormen	66
	2.6.4	Trer	inen	67
	2.6.5	Füge	en	68
	2.6.6	Beso	chichten	69
	2.6.7	Stof	feigenschaften ändern	70
2.7	Anfor	derur	ngen an die Planung und Bewertung nachhaltiger	
	Werts	chöp	fungsketten	71
Ansä	itze zur	ökoi	nomischen und ökologischen Planung industrielle	r
Wer	tschöp	fungs	ketten	75
3.1	Indust	rielle	s Stoffstrommanagement	75
3.2	Grund	llager	n und Diskussion ausgewählter Methoden des	
-	Umwe	eltcor	ntrollings	79
	3.2.1	Einf	ührung in das Umweltcontrolling	79
	3.2.2	Met	hodenauswahl	81
	2.5 2.6 2.7 Ansä Wer 3.1 3.2	2.4 2.4 2.4.3 2.4 2.4 2.5 Produ Chem 2.5.1 2.5.2 2.5 2.5 2.5 2.5 2.5 2.5 2.5 2.5 2	2.4.2.1 2.4.2.2 2.4.3 Alur 2.4.3.1 2.4.3.2 2.5 Produktion Chemieindu 2.5.1 Grun treik 2.5.2 Hers 2.5.2 Hers 2.5.2 Hers 2.5.3 Hers 2.5.4 Hers 2.6.1 Grun 2.6.2 Urfo 2.6.3 Umf 2.6.3 Umf 2.6.4 Trer 2.6.5 Füge 2.6.6 Beso 2.6.7 Stof 2.7 Anforderur Wertschöp Mosätze zur ökon Wertschöp 3.1 Industrielle 3.2 Grundlager Umweltcor 3.2.1 Einf 3.2.2 Met	 2.4.2.1 Eisen- und Stahlproduktion über die Hochofenroute

	3.2.3	Öko	bilanzierung (LCA)	
	3.2	.3.1	Definition und Beschreibung	
	3.2.3.2 3.2.3.3		Aufbau einer Ökobilanz	85
			Festlegung des Ziels und des Untersuchungs-	
			rahmens	
	3.2	.3.4	Sachbilanz	
	3.2	.3.5	Wirkungsabschätzung	
	3.2	.3.6	Auswertung	90
	3.2	.3.7	Kritische Einordnung der Ökobilanzierung	91
	3.2.4	Mat	erialflusskostenrechnung (MFKR)	
	3.2	.4.1	Definition und Zielvorgaben	94
	3.2	.4.2	Elemente der MFKR	95
	3.2	.4.3	Implementierungsschritte	
	3.2	.4.4	Kritische Einordnung der MFKR und Abgrenzu	ing
			zur konventionellen Kostenrechnung	
	3.2.5	Leb	enszykluskostenrechnung (LCC)	106
3.3	Grund	lageı	n und Diskussion der multikriteriellen	
	Entsch	neidu	ngsanalyse	109
	3.3.1	Gru	ndlagen	109
	3.3.2	Mul	tiattributive Entscheidungsmodelle (MADM)	110
	3.3.3	Met	hodenauswahl	114
	3.3.4	Pare	eto-Optimum	116
	3.3.5	Wei	ghted Sum Method (WSM)	117
	3.3.6	PRC	METHEE I und II	121
	3.3	.6.1	Verallgemeinerte Präferenzfunktionen	
	3.3	.6.2	Festlegung der Präferenzfunktionen in dieser	
			Arbeit	
	3.3	.6.3	Methodik	
3.4	Schade	ens-	und Vermeidungskostenansatz	131
3.5	Literat	urüb	ersicht	133
	3.5.1	Ana	lysemerkmale der Literaturanalyse	133
	3.5.2	Ider	ntifizierung relevanter Literatur	136

		3.5.3	Ana	lyse existierender Ansätze	.142
	3.6	Forsch	nungs	bedarf	.153
4	Konz	ept de	s zu e	entwickelnden Entscheidungsunterstützungs-	
-	svste	ems			. 159
	4.1	Mode	llanfo	orderungen	. 159
	4.2	Mode	llübe	rsicht	.165
5	Svet	emmod	م ادا	Warkssnazifische THG-Emissionen der	
5	Mat	erialhe	rstell		. 171
	5.1	Stahl-	und	مانع Aluminiumherstellung: Teilmodule A1-A4	.171
		5.1.1	Prol	plemstellung und Zielsetzung	.172
		5.1.2	Lite	raturdiskussion und Forschungslücken	.174
		5.1.3	Fors	chungsansatz und Methode	.177
		5.1.4	Date	enbasis der Teilmodule A1-A4	.186
		5.1.5	Teil	modul A1: Primärstahlerzeugung (ECCO2-Steel1er).	. 189
		5.1	5.1	Ziel und Untersuchungsrahmen	.190
		5.1	5.2	Berechnungslogik	.192
		5.1	5.3	Fallstudie integrierter Primärstahlwerke der	
				EU15	.196
		5.1	5.4	Fallstudienergebnisse und Validierung	.198
		5.1.6	Teil	modul A2: Sekundärstahlerzeugung (ECCO ₂ -	
			Stee	el2er)	.200
		5.1	6.1	Ziel und Untersuchungsrahmen	.200
		5.1	6.2	Berechnungslogik und Implementierung	.202
		5.1	6.3	Fallstudie Sekundärstahlwerke in Deutschland	.209
		5.1	6.4	Fallstudienergebnisse und Validierung	.214
		5.1.7	Teil	modul A3: Primäraluminiumerzeugung (ECCO ₂ -	
			Alu	Ler)	.218
		5.1	7.1	Ziel und Untersuchungsrahmen	.219
		5.1	7.2	Berechnungslogik	.221
		5.1	7.3	Fallstudie Primäraluminiumhütten in Deutschland	.224
		5.1	7.4	Fallstudienergebnisse und Validierung	.225

	5.1.8	Teilı	modul A4: Sekundäraluminiumerzeugung (ECCO ₂ -	
		Stee	el2er)22	28
	5.1	8.1	Ziel und Untersuchungsrahmen22	8
	5.1	8.2	Berechnungslogik und Implementierung	0
	5.1	8.3	Fallstudie der Sekundäraluminiumwerke in	
			Deutschland23	32
	5.1	8.4	Fallstudienergebnisse und Validierung23	6
5.2	Herste	ellung	g chemischer Grundstoffe: Teilmodule A5 und A6 23	88
	5.2.1	Prob	plemstellung und Zielsetzung23	39
	5.2.2	Lite	raturdiskussion und Forschungslücken	10
	5.2.3	Fors	chungsansatz und Methode24	ł5
	5.2	2.3.1	Energiebasierter Ansatz und Fokus auf	
			Grundstoffchemie24	5
	5.2	2.3.2	Modellstruktur24	7
	5.2	2.3.3	Systemgrenzen und Modellierungsansatz25	51
	5.2.4	Mod	dellentwicklung und Implementierung25	54
	5.2	2.4.1	Teilmodul A5: Höherwertige Crackerprodukte	
			(ECCO ₂ -HVC)25	5
	5.2	2.4.2	Teilmodul A6: Sonstige Grundstoffe (ECCO ₂ -Basic	
			Chemicals)26	52
	5.2.5	Anw	vendung von Teilmodul A5 am Beispiel deutscher	
		Prop	oylen-Hersteller27	7
	5.2	2.5.1	Vorstellung der Fallstudie27	'7
	5.2	2.5.2	Datengrundlage und Annahmen27	8
	5.2	2.5.3	Validierung und Ergebnisdiskussion28	6
	5.2.6	Anw	endung von Teilmodul A6 am Beispiel deutscher	
		Tolu	ioldiisocyanat (TDI) Hersteller29	92
	5.2	2.6.1	Vorstellung der Fallstudie29)2
	5.2	2.6.2	Datengrundlage und Annahmen29)3
	5.2	2.6.3	Validierung und Ergebnisdiskussion30)4
5.3	Zwiscl	nenfa	zit und kritische Würdigung der Modelle zur	
	Mater	ialhe	rstellung31	0

		5.3.1	Übe	rsicht der Modellergebnisse von Systemmodul A .	310
		5.3.2	Resu	Iltierende THG-Einsparpotenziale	312
		5.3.3	Kriti	sche Würdigung und Ausblick	314
6	Syste	emmoo	lul B:	THG-Emissionen und Kosten der	
•	Endr	oroduk	thers	tellung	321
	6.1	Proble	emste	llung und Zielsetzung	322
	6.2	Forsch	nungs	ansatz und Methode	323
		6.2.1	Mod	lellanforderungen	323
		6.2.2	Syst	emgrenzen und Annahmen	326
		6.2.3	Mod	lellkonzept für Systemmodul B	331
	6.3	Berec	hnun	gslogik	333
		6.3.1	THG	-Emissionen einer Fertigungskette	333
		6.3.2	Kost	en eines Endprodukts auf Basis der MFKR	339
		6.3	8.2.1	Materialkosten	341
		6.3	8.2.2	Energiekosten	343
		6.3	3.2.3	Systemkosten	343
		6.3	8.2.4	Abfallmanagementkosten	346
		6.3	8.2.5	THG-Emissionskosten	347
	6.4	Anwe	ndun	g von Systemmodul B am Beispiel eines Pkw-	
		Baute	ils		347
		6.4.1	Fert	igungsprozess und Datengrundlage	348
		6.4.2	Sons	stige Prozessinformationen und Annahmen	351
		6.4.3	Falls	tudienergebnisse	353
	6.5	Kritisc	he W	ürdigung und Ausblick	358
7	Syste	emmod	dul C:	THG-Emissionen von Produkten in Nutzungs- un	d
	End-	of-Life	-Phas	e	362
	7.1	Zielse	tzung		362
	7.2	Defini	tion o	les Untersuchungsrahmens	363
		7.2.1	War	tungsphase	363
		7.2.2	Fahr	zeugsegmente und Antriebstechnologien	364
		7.2.3	Bere	itstellung der Antriebsenergie	365

	7 7 4	lune in	lomontiortor Fabrauldus	267
	7.2.4	imp	iementierter Fanrzykius	
	7.2.5	Laut	ieistung	369
7.3	Mode	llieru	ng der Nutzungsphase	370
	7.3.1	Kon	zept und Methode	371
	7.3.2	Fahr	zyklusspezifische Minderverbrauchsfaktoren	374
	7.3	.2.1	Gewichtsinduzierter Energieverbrauch	374
	7.3	.2.2	Gewichtsinduzierter Kraftstoffverbrauch	376
	7.3	.2.3	Berechnung der Minderverbrauchsfaktoren in	۱
			Neuen Europäischen Fahrzyklus (NEFZ)	378
	7.3	.2.4	Berechnung im NEFZ mit Sekundäreffekten	380
	7.3	.2.5	Berücksichtigung hybrider und elektrischer	
			Fahrzeuge	383
	7.3.3	Kraf	tstoff- und Stromverbrauch aktueller	
		Fahr	zeugmodelle	384
	7.3	.3.1	Allokationsansatz nach Ridge	384
	7.3	.3.2	Kraftstoffverbrauch von Referenzfahrzeugen	
			existierender Studien	385
	7.3	.3.3	Entwicklung eigener Referenzfahrzeuge	387
	7.3	.3.4	Zusammenfassung Kraftstoff- und Strom-	
			verbrauch eines Bauteils	392
	7.3.4	Bere	echnung der THG-Emissionen von Bauteilen in d	ler
		Nut	zungsphase	393
7.4	Mode	llieru	ng der End-of-Life-Phase	395
	7.4.1	Gru	ndlagen	395
	7.4	.1.1	Einführung	395
	7.4	.1.2	Recyclingtechnologien und Ablauf	396
	7.4.2	Recy	/clingquoten und Deponierung	398
	7.4.3	Bere	echnung der EoL-THG-Emissionen	402
7.5	Anwei	ndun	g am Beispiel des deutschen Fahrzeugmarktes .	405
	7.5.1	Funl	ktionsweise	405
	7.5.2	Szer	narien	406
	7.5.3	Aus	wertung	407
			-	

	7.6	Kritisc	he W	/ürdigung und Ausblick	412		
8	Syste	emmod	lul D:	Entscheidungsunterstützung zur Konfiguration	einer		
	Wer	tschöpf	ungs	kette	417		
	8.1	Mode	llkon	zept	417		
	8.2	Anwer	Anwendung von Systemmodul D am Beispiel eines Pkw-				
		Bautei	ils		421		
		8.2.1	Aus	gangslage und Datenbasis	421		
		8.2.2	Szer	narien	422		
		8.2.3	Cark	oon Footprint (PCF)-Analyse (cradle-to-grave)	424		
		8.2	.3.1	Globales THG-Einsparpotenzial (cradle-to-gate)			
				durch Lieferantenwahl im Fahrzeugbau	424		
		8.2	.3.2	Materialempfehlung hinsichtlich PCF für das			
				Fallstudienbauteil	431		
		8.2	.3.3	Anteil der Materialherstellung am PCF	434		
		8.2	.3.4	Einfluss auf den PCF durch Lieferantenwahl	437		
		8.2	.3.5	Kombinierter Einfluss durch Material- und			
				Lieferantenwahl	440		
		8.2	.3.6	Fazit zu Stahl- oder Aluminium im Pkw	442		
		8.2.4	Pare	to-optimale Konfigurationen der			
			Wer	tschöpfungskette	448		
		8.2.5	THG	-Vermeidungskosten	451		
		8.2	.5.1	Berechnungsansatz	451		
		8.2	.5.2	THG-Vermeidungskosten bei der Herstellung de	S		
				Fallstudienbauteils	453		
		8.2	.5.3	Einordnung der Ergebnisse in den klimapolitisch	en		
				Kontext	457		
		8.2.6	WSN	ብ und PROMETHEE	458		
		8.2	.6.1	Entscheidungen und Ergebnisse mittels WSM	458		
		8.2	.6.2	Entscheidungen und Ergebnisse mittels			
				PROMETHEE	464		
		8.2.7	Erge	bnisvergleich und Fazit THG-Vermeidungskosten	,		
			WSM	٨ und PROMETHEE	472		

	8.3	Kritische Würdigung und Ausblick	
9	Zusa	mmenfassung	479
	9.1	Forschungslücken	
	9.2	Forschungsansatz	
	9.3	Forschungsergebnisse	483
	9.4	Forschungsausblick	489
А.	Anha	ang	491
	A.1	Grundlagen	
	A.2	Notation Teilmodule A5 und A6 (ECCO ₂ -HVC und	
		ECCO ₂ -Basic Chemicals)	499
	A.3	Notation Systemmodul B	504
	A.4	Systemmodul C	510
	A.5	Systemmodul D	512
в.	Liter	aturverzeichnis	519

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 2.1:	Visualisierungsmöglichkeiten für die drei Dimensionen der Nachhaltigkeit	16
Abbildung 2.2:	Relevante Wertschöpfungsstufen in dieser Arbeit zur ökonomischen und ökologischen Planung der Produkt-Wertschöpfungskette	21
Abbildung 2.3:	In Deutschland emittierte direkt wirkende Treibhausgase (UBA 2018a) und Minderungsziele der EU und Deutschlands	26
Abbildung 2.4:	Aufteilung der 2016 emittierten Treibhausgase in Deutschland nach Sektoren	29
Abbildung 2.5:	Gewichtsbezogene Materialanteile eines Pkws im Jahr 2015	30
Abbildung 2.6:	CO ₂ -Emissionen entlang des Lebenszyklus eines Pkws	31
Abbildung 2.7:	Produktionsmengen ausgewählter Metalle in Deutschland	34
Abbildung 2.8:	Anteil ausgewählter Metalle an den THG- Emissionen der gesamten Metallherstellung in Deutschland und weltweit	35
Abbildung 2.9:	Stoff- und Energieflüsse zwischen den Produktionsanlagen eines integrierten Hüttenwerks	39
Abbildung 2.10:	Aufteilung und Beschriftung der Wirtschaftszweige in der Chemieindustrie nach EU-Verordnung 1893 und Gewichtung des Anteils am Produktionsindex in der Chemischen Industrie in Deutschland	48

Abbildung 2.11:	Aufteilung chemischer Grundstoffe (Wirtschaftszweig 20.1) gemäß EU-Verordnung 1893 und Anteile am Produktionsvolumen chemischer Grundstoffe (20.1) 49
Abbildung 2.12:	Wichtige chemische Grundstoffe und darauf basierende chemische Wertschöpfungsketten
Abbildung 2.13:	Vereinfachtes Fließschema einer Raffinerie, die im Verbund mit der chemischen Industrie arbeitet54
Abbildung 2.14:	Aufbau einer Steamcracker-Anlage57
Abbildung 2.15:	Prinzip des fluid catalytic cracking (FCC)59
Abbildung 2.16:	Schematische Darstellung des Membran- Verfahrens zur Chloralkali-Elektrolyse62
Abbildung 2.17:	Produktionsschema Toluoldiisocyanat (TDI)64
Abbildung 3.1:	Klassifikation ausgewählter Instrumente des Umweltcontrollings81
Abbildung 3.2:	Phasen einer Ökobilanz85
Abbildung 3.3:	Die Auswertungsphase in Beziehung zu den anderen Phasen der Ökobilanz91
Abbildung 3.4:	Beispiel einer Materialbilanz96
Abbildung 3.5:	Beispiel einer Kostenberechnung in einer Mengenstelle98
Abbildung 3.6:	Beispiel eines Materialflussmodells100
Abbildung 3.7:	Implementierungsschritte der MFKR gemäß des PDCA-Kreislaufs101
Abbildung 3.8:	Materialflusskostenmatrix zweier Mengenstellen104
Abbildung 3.9:	Mögliche Konfigurationsalternativen einer Wertschöpfungskette zur Herstellung eines Bauteils – Darstellung pareto-optimaler und sonstiger Lösungen

Abbildung 3.10:	Normierungsverfahren im Bereich der
	multikriteriellen Entscheidungsunterstützung120
Abbildung 3.11:	Themenbereiche der Literaturrecherche137
Abbildung 3.12:	Entwickeltes mehrstufiges Rechercheschema zur Vorgehensweise der Literaturrecherche
Abbildung 3.13:	Ergebnisübersicht der Literaturanalyse der für diese Arbeit relevantesten 23 Veröffentlichungen151
Abbildung 3.14:	Einordnung des Forschungsansatzes in die Literatur157
Abbildung 4.1:	Generelle Funktionsweise und Aufbau des Entscheidungsunterstützungs-systems zur ökonomischen und ökologischen Planung und Bewertung von Wertschöpfungsketten
Abbildung 5.1:	Generischer sequentieller Berechnungsansatz zur Abschätzung werksspezifischer THG-Emissionen in der Metallindustrie
Abbildung 5.2:	Ebenen und Dimensionen der Lebenszyklusanalyse .185
Abbildung 5.3:	Prozessschritte eines integrierten Hüttenwerks einschließlich der im Modell betrachteten Systemgrenzen und Material- und Energieflüsse191
Abbildung 5.4:	Berechnungslogik des ECCO2-Steel1er Modells193
Abbildung 5.5:	Geografische Standorte der 22 betrachteten integrierten Hüttenwerke der Eisen- und Stahlerzeugung in Europa197
Abbildung 5.6:	Ergebnisse des PCF (cradle-to-gate(out)) der 22 Primärstahlwerke der EU15199

Abbildung 5.7:	Prozessschritte eines integrierten
	Sekundärstahlwerks einschließlich der im Modell
	betrachteten Systemgrenzen und Material- und
	Energieflüsse
Abbildung 5.8:	Berechnungslogik des ECCO2-Steel2er Modells203
Abbildung 5.9:	Geografische Standorte der 15 betrachteten
	Sekundärstahlwerke in Deutschland210
Abbildung 5.10:	Ergebnisse des PCF einer Tonne Rohstahl (cradle-
	to-gate(out)) der 15 betrachteten
	Sekundärstahlwerke in Deutschland216
Abbildung 5.11:	Prozessschritte einer Primäraluminiumhütte
	einschließlich der im Modell betrachteten
	Systemgrenzen und Material- und Energieflüsse220
Abbildung 5.12:	Berechnungslogik des ECCO ₂ -Alu1er Modells223
Abbildung 5.13:	Geografische Standorte der vier betrachteten
	Primäraluminiumhütten in Deutschland225
Abbildung 5.14:	Ergebnisse des PCF einer Tonne Rohaluminium
	(cradle-to-gate(out)) der vier
	Primäraluminiumhütten in Deutschland227
Abbildung 5.15:	Prozessschritte eines Remelters und eines Refiners
	einschließlich der im Modell betrachteten
	Systemgrenzen und Material- und Energieflüsse230
Abbildung 5.16:	Berechnungslogik des ECCO2-Alu2er Modells231
Abbildung 5.17:	Geografische Standorte der 15 betrachteten
	Sekundäraluminiumwerke in Deutschland233
Abbildung 5.18:	Ergebnisse des PCF einer Tonne Rohaluminium
	(cradle-to-gate(out)) der 15 betrachteten
	Sekundäraluminiumwerke (Remelter und Refiner)
	in Deutschland237

Abbildung 5.19:	Modellkonzept zur Abschätzung werksspezifischer Product Carbon Footprints (PCFs) chemischer Grundstoffe	9
Abbildung 5.20:	Systemgrenzen des Modellierungsansatzes und Unterscheidung zwischen Hauptprodukt, Zwischenprodukt und Nebenprodukt25	2
Abbildung 5.21:	CO ₂ e-Emissionen von Crackern am Beispiel der Ethylen-Herstellung (CEFIC 2008)25	8
Abbildung 5.22:	Beispiel zur Berechnung des Hadamard-Produkts26	3
Abbildung 5.23:	Untersuchte Cracker der Propylen-Herstellung in Deutschland27	8
Abbildung 5.24:	Crackerspezifische CO ₂ e-Emissionen der Propylen- Herstellung der 23 untersuchten Cracker in	0
Abbildung 5.25:	Sensitivitätsanalyse zum Carbon Footprint von Propylen für den BiC (18)- und WiC-Cracker (11) bei einer Verbesserung ausgewählter Inputvariablen um 10 %29	0
Abbildung 5.26:	Untersuchte Produktionsstandorte der TDI- Herstellung in Deutschland29	3
Abbildung 5.27:	Toluoldiisocyanat (TDI)-Produktionsschema	4
Abbildung 5.28:	Herstellung von Dinitrotoluol (DNT)29	5
Abbildung 5.29:	Massenanteile von Edukten an den Produkten entlang des Produktionsprozesses von Toluoldiisocyanat (TDI) [kg/kg]29	6
Abbildung 5.30:	Reaktionsgleichung und Massenbilanz der Herstellung von Diaminotoluol (TDA)29	7

Abbildung 5.31:	Exemplarische Berechnung der Eingangswerte für Matrix A auf Basis der Reaktionsgleichung DNT zu
	TDA297
Abbildung 5.32:	$Vektor \ t_0 \ exemplarisch \ für \ Werk \ 4298$
Abbildung 5.33:	Vektor PE exemplarisch für Werk 4299
Abbildung 5.34:	CO ₂ e-Emissionen der TDI-Herstellung in vier Werken Deutschland305
Abbildung 5.35:	Sensitivitätsanalyse zum Carbon Footprint von TDI für die beste (in Werk 1) und schlechteste Produktionsanlage (in Werk 2) bei einer Verbesserung ausgewählter Inputvariablen um 10 %
Abbildung 5.36:	Ergebnisvektor BP exemplarisch für Werk 4310
Abbildung 6.1:	Systemgrenzen der Materialflusskostenrechnung und der THG-Bilanz des Systemmodul B am Beispiel eines Fertigungsprozesses i
Abbildung 6.2:	Darstellung eines Fertigungsprozesses
Abbildung 6.3:	Modellstruktur von Systemmodul B inkl. der Integration des Systemmoduls A zur Berechnung eines cradle-to-gate PCFs eines Endprodukts
Abbildung 6.4:	Berechnungsschema der Ökobilanz des Endprodukts einer Fertigungskette
Abbildung 6.5:	Stoffströme entlang des Fertigungsprozesses des Fallstudienbauteils
Abbildung 6.6:	Vergleich der Herstellkosten und (cradle-to-gate) THG-Emissionen zwischen der Stahl- und Aluminiumversion des Fallstudienbauteils

Abbildung 6.7:	Herstellkosten und (gate-to-gate) THG-Emissionen der Fertigung des Fallstudienbauteils auf Stahlbasis (DD13)
Abbildung 6.8:	Herstellkosten und (gate-to-gate) THG-Emissionen der Fertigung des Fallstudienbauteils auf Aluminiumbasis (AIMg3)356
Abbildung 6.9:	Herstellkosten ohne die Kosten der Stahl- oder Aluminiumbeschaffung und (gate-to-gate) THG- Emissionen der Fertigung des Fallstudienbauteils357
Abbildung 7.1:	Funktionsweise zur Anwendung des Systemmodul C406
Abbildung 8.1:	Konzept und Logik des Systemmoduls D zur Entscheidungsunterstützung bei der Konfiguration von klimafreundlicheren und ökonomischen Produkt-Wertschöpfungsketten419
Abbildung 8.2:	THG-Einsparpotenzial im Fahrzeugbau durch den Wechsel von durchschnittlichen auf klimafreundliche (BiC) Materialhersteller430
Abbildung 8.3:	Cradle-to-grave THG-Emissionen des Fallstudienbauteils in der Stahl- (S) und Aluminiumvariante (A) je nach Antriebstechnik des Fahrzeugs im Strommix 2020 Szenario432
Abbildung 8.4:	Cradle-to-grave THG-Emissionen des Fallstudienbauteils in der Stahl- (S) und Aluminiumvariante (A) je nach Antriebstechnik des Fahrzeugs im Strommix 2030 Szenario433
Abbildung 8.5:	Cradle-to-grave THG-Emissionen des Fallstudienbauteils in der Stahl- (S) und Aluminiumvariante (A) je nach Antriebstechnik des Fahrzeugs im 100 %EE Szenario434

Abbildung 8.6:	Regressionsanalyse zum PCF (cradle-to-grave) des Fallstudienbauteils in Abhängigkeit von der CO ₂ - Intensität des Strommixes für eine Fahrzeuglaufleistung von 150.000 km443
Abbildung 8.7:	Regressionsanalyse zum PCF (cradle-to-grave) des Fallstudienbauteils in Abhängigkeit von der CO ₂ - Intensität des Strommixes für eine Fahrzeuglaufleistung von 300.000 km444
Abbildung 8.8:	Pareto-optimale und sonstige Wertschöpfungskettenkonfigurationen des Fallstudienbauteils (cradle-to-grave) in Abhängigkeit der Szenarien449
Abbildung 8.9:	WSM-Score der pareto-optimalen Wertschöpfungsketten des Fallstudienbauteils in Abhängigkeit der GWP-Gewichtung (CO ₂ e cradle- to-grave) und der unterschiedlichen Szenarien (hier: alle 150.000 km Szenarien)460
Abbildung 8.10:	WSM-Score der pareto-optimalen Wertschöpfungsketten des Fallstudienbauteils in Abhängigkeit der GWP-Gewichtung (CO ₂ e cradle- to-grave) und der unterschiedlichen Szenarien (hier: alle 300.000 km Szenarien)461
Abbildung 8.11:	PROMETHEE-Nettoflüsse der pareto-optimalen Wertschöpfungsketten des Fallstudienbauteils in Abhängigkeit der GWP-Gewichtung (CO ₂ e cradle- to-grave) und unterschiedlicher Szenarien (hier: alle 150.000 km Szenarien)466

Abbildung 8.12:	PROMETHEE-Nettoflüsse der pareto-optimalen	
	Abhängigkeit der GWP-Gewichtung (CO ₂ e cradle-	
	to-grave) und unterschiedlicher Szenarien (hier: alle 300.000 km Szenarien)	467
Abbildung 8.13:	Szenarienübergreifender Vergleich der PROMETHEE-Nettoflüsse der pareto-optimalen Wertschöpfungsketten des Fallstudienbauteils	471
Abbildung A.1:	Kunststoffbedarf 2015 und 2016 in Europa unterteilt nach Polymerarten	493
Abbildung A.2:	Übersicht der Fertigungsverfahren in Hauptgruppe 1 Urformen	496
Abbildung A.3:	Übersicht der Fertigungsverfahren in Hauptgruppe 3 Trennen	497
Abbildung A.4:	Übersicht über die Einteilung der Hauptgruppe 5 Beschichten	498
Abbildung A.5:	Verbrauch in Abhängigkeit des Fahrzeuggewichts für benzinbetriebe Pkw im Jahr 2016	510
Abbildung A.6:	Verbrauch in Abhängigkeit des Fahrzeuggewichts für dieselbetriebe Pkw im Jahr 2016	510
Abbildung A.7:	Teilherleitung zur Begründung der identischen Stabilitätsniveaus der PROMETHEE Ergebnisse in	
	verschiedenen Szenarien	518

Tabellenverzeichnis

Tabelle 2.1:	Treibhauspotenziale verschiedener Gase	27
Tabelle 2.2:	Definitionen der Umformgruppen	67
Tabelle 2.3:	Einteilung der Fügegruppen nach Art des Zusammenhalts und dessen Lösbarkeit	69
Tabelle 2.4:	Übersicht über die Einteilung der Hauptgruppe 6 Stoffeigenschaften ändern	70
Tabelle 3.1:	Wichtige Begriffe der Ökobilanzierung am Beispiel der Wirkungskategorie Klimaerwärmung	90
Tabelle 3.2:	Abgrenzungen MADM Methoden amerikanischer und europäischer Schule	111
Tabelle 3.3:	Präferenzfunktionen für ökonomische und ökologische Kriterien in der Literatur	127
Tabelle 5.1:	Datenbasis der ECCO ₂ -Modelle der Teilmodule A1- A4	188
Tabelle 5.2:	Berichtete Produktionsvolumina und Rohstahlkapazitäten der betrachteten Werke für das Bezugsjahr 2012	212
Tabelle 5.3:	Berichtete CO ₂ -Emissionen der betrachteten Sekundärstahlwerke (Stahl- und Walzwerke) für das Berichtsjahr 2012	213
Tabelle 5.4:	Allgemeine (werksunabhängige) Prozessparameter für die Anwendung des ECCO ₂ -Steel2er Modells	214
Tabelle 5.5:	Allgemeine (werksunabhängige) Prozessparameter für die Anwendung des ECCO ₂ -Alu2er Modells	236

Tabelle 5.6:	Spezifische Emissionsfaktoren und spezifischer
	Energieverbrauch des Cracker Feeds für SC- und FCC-Cracker
Tabelle 5.7:	Rohstoffmischung des Feedstocks der Cracker dieser Fallstudie281
Tabelle 5.8:	GWP der Feedstocks (cradle-to-gate)
Tabelle 5.9:	Datenbasis zur Berechnung der Crackereffizienz284
Tabelle 5.10:	Gewichtungen und Unter- und Obergrenzen zur Berechnung der Crackereffizienz
Tabelle 5.11:	Datenbasis zur Berechnung der werksspezifischen Produktionseffizienz von TDI
Tabelle 5.12:	Gewichtungen und Intervallbeschränkungen zur Berechnung der Produktionseffizienz von TDI302
Tabelle 5.13:	Spezifischer Energieverbrauch (SEC) der TDI- und Chlor-Herstellung sowie Emissionsfaktoren für den deutschen Strommix und für Erdgas
Tabelle 5.14:	Übersicht der Fallstudienergebnisse der Teilmodule A1-A6 (cradle-to-gate)
Tabelle 6.1:	Ökonomische Daten zum Fertigungsprozess des Fallstudienbauteils
Tabelle 6.2:	Dichte der verwendeten Roh-, Hilfs- und Betriebsstoffe351
Tabelle 6.3:	GWP der verwendeten Roh-, Hilfs- und Betriebsstoffe351
Tabelle 7.1:	THG-Emissionen und kumulativer Energieaufwand (KEA) bei der Bereitstellung der Antriebsenergie in Deutschland

Tabelle 7.2:	Charakteristische Werte für den NEFZ Fahrzyklus und sonstige benötigte Daten zur Berechnung des Energie- und Kraftstoffverbrauchs für einen Fahrzyklus
Tabelle 7.3:	Minderverbrauchsfaktoren für Benziner und Diesel in [l/(100km100kg)] mit Sekundäreffekten
Tabelle 7.4:	Leergewicht der erstellten Referenzfahrzeuge
Tabelle 7.5:	Übersicht zu technischen Recyclingquoten von Stahl und Aluminium400
Tabelle 7.6:	Übersicht zu Recyclingquoten ausgewählter Kunststoffe402
Tabelle 7.7:	Im Modell vorkonfigurierte Werte zur Berechnung der EoL THG-Emissionen403
Tabelle 7.8:	Erstellte Szenarien für die Berechnung der THG- Emissionen der Nutzungs- und EoL-Phase407
Tabelle 7.9:	Szenariobedingte THG-Emissionen der Nutzungs- und EoL-Phase des Fallstudienbauteils [kgCO ₂ e/Fallstudienbauteil] je Material und Antriebsart408
Tabelle 8.1:	Datenbasis zur durchgeführten Berechnung der CO ₂ e-Intensität für 100 % erneuerbare Energien in Deutschland424
Tabelle 8.2:	Gewichtsanteil der in Systemmodul A betrachteten Materialien an einem durchschnittlichen Pkw426
Tabelle 8.3:	Gegenüberstellung der THG-Emissionen durchschnittlicher und BiC-Materialhersteller für die Materialherstellung in Deutschland und global428
Tabelle 8.4:	Anteil der Materialherstellung am Carbon Footprint (cradle-to-grave) des Fallstudienbauteils435

Tabelle 8.5:	Einfluss der Lieferantenwahl auf den PCF (cradle- to-grave) des Fallstudienbauteils (maximales Reduktionspotenzial)438
Tabelle 8.6:	Einfluss durch Material- und Lieferantenwahl (Stahl und Aluminium) auf den Carbon Footprint (cradle-to-grave) des Fallstudienbauteils441
Tabelle 8.7:	Materialempfehlungen auf Basis der Szenarioberechnungen und der Regressionsanalyse446
Tabelle 8.8:	Pareto-optimale Wertschöpfungskettenkonfigurationen zur Minimierung der THG-Emissionen (cradle-to- grave) und Herstellkosten des Fallstudienbauteils450
Tabelle 8.9:	THG-Vermeidungskosten zwischen pareto- optimalen Wertschöpfungsketten der Herstellung des Fallstudienbauteils (cradle-to-gate)454
Tabelle 8.10:	THG-Vermeidungskosten zwischen pareto- optimalen Wertschöpfungsketten für den gesamten Produktlebenszyklus des Fallstudienbauteils (cradle-to-grave)456
Tabelle 8.11:	Stabilität der Überlegenheit von Wertschöpfungsketten (cradle-to-grave) gemäß der WSM in Abhängigkeit der Gewichtung des GWPs (CO ₂ e)463
Tabelle 8.12:	Stabilität der Überlegenheit von Wertschöpfungsketten (cradle-to-grave) nach PROMETHEE in Abhängigkeit der Gewichtung des GWPs (CO ₂ e)469

Tabelle 8.13:	Durchschnittliche Nettoflüsse der Wertschöpfungsketten und Bildung einer szenarienübergreifenden Rangfolge472
Tabelle 8.14:	Vergleich der Stabilität der Überlegenheit von Wertschöpfungsketten (cradle-to-grave) zwischen WSM und PROMETHEE in Abhängigkeit der Gewichtung des GWPs (CO ₂ e)473
Tabelle 8.15:	Zu verwendende Wertschöpfungskette je nach Entscheidungsunterstützungs-ansatz am Beispiel für eine Gewichtung des GWPs und der Herstellkosten (HK) zu jeweils 50 %475
Tabelle A.1:	Produktionsmengen der deutschen und weltweiten Metallerzeugung im Jahr 2014 und Treibhausgaspotenzial (GWP100) der einzelnen Metalle und Berechnung des produktionsmixspezifischen Treibhausgaspotenzials
Tabelle A.2:	THG-Emissionen der Erzeugung bestimmter Metalle in Deutschland und weltweit
Tabelle A.3:	Die meistproduzierten (Top 20) "sonstigen organischen Grundstoffe und Chemikalien" in Deutschland im Jahr 2017494
Tabelle A.4:	Die meistproduzierten (Top 20) "sonstigen anorganischen Grundstoffe und Chemikalien" in Deutschland im Jahr 2017495
Tabelle A.5:	In der Modellierung der Teilmodule A5 und A6 verwendete Variablen, Indizes und Parameter (ECCO ₂ -HVC-Modell und ECCO ₂ -Basic Chemicals- Modell)

Tabelle A.6:	In der Modellierung von Systemmodul B
	verwendete Variablen, Indizes und Parameter504
Tabelle A.7:	Abschätzung werksspezifischer THG-Emissionen
	der Fallstudienwerke (Sekundärstahlwerke) aus
	Teilmodul A2 unter Berücksichtigung eines
	Strommixes für das Jahr 2030511
Tabelle A.8:	Abschätzung werksspezifischer THG-Emissionen
	der Fallstudienwerke (Primäraluminiumwerke) aus
	Teilmodul A3 unter Berücksichtigung eines
	Strommixes für das Jahr 2030511
Tabelle A.9:	Cradle-to-grave THG-Emissionen des
	Fallstudienbauteils in der Stahl- und
	Aluminiumvariante512
Tabelle A.10:	Cradle-to-grave THG-Emissionen des
	Fallstudienbauteils in der Stahl- und
	Aluminiumvariante in Abhängigkeit vom Best-in-
	Class (BIC) und Worst-in-Class (WIC)
	Materialhersteller
Tabelle A.11:	Regressionsgeraden und Bestimmtheitsmaß der
	linearen Regressions zwischen den cradle-to-
	grave THG-Emissionen des Fallstudienbauteils in
	der Stahl- und Aluminiumvariante in Abhängigkeit
	vom Best-in-Class (BIC) Materialhersteller und
	dem Emissionsfaktor der Stromerzeugung514
Tabelle A.12:	Auflistung der möglichen Konfigurationen der
	Wertschöpfungskette des Fallstudienbauteils514
Tabelle A.13:	Stabilität der Wertschöpfungsketten mit den
	höchsten PROMETHEE-Nettoflüssen bei Variation
	der Präferenzfunktionen518

Abkürzungsverzeichnis

ADAC	Allgemeiner deutscher Automobil-Club
AHP	Analytic Hierarchy Process
Ar	Argon
ASR	Automotive Shredder Residue
BAT/BVT	Beste verfügbare Techniken
BEV	Battery Electric Vehicle
BiC	Best in Class
BMU/BMUB	Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit
BMWi	Bundesministerium für Wirtschaft und Energie
CADC	Common Artemis Driving Cycle
CEFIC	The European Chemical Industry Council
CF ₄	Tetrafluormethan
C_2F_6	Hexafluormethan
CH ₄	Methan
Cl ₂	Chlor
CML	Centrum voor Milieukunde
со	Kohlenstoffmonoxid
CO ₂	Kohlenstoffdioxid
CO ₂ e	Kohlenstoffdioxid Äquivalent
c.p.	Ceteris paribus (unter sonst gleichen Bedingungen)
DAT	Deutsche Automobil Treuhand
DEHSt	Deutsche Emissionshandelsstelle
DNT	Dinitrotoluol

DRI	Direct Reduced Iron
EAF	Electric Arc Furnace
ECCO ₂	Evaluation tool to Compare CO ₂ emissions
EE	Erneuerbare Energien
EEA	European Environment Agency
EG	Europäische Gemeinschaft
eLCC	environmental LCC
ELECTRE	Eliminiation Et Choice Translation Reality
ELV	End-of-Life-Vehicle
EMAS	Eco-Management and Audit Scheme
EoL	End-of-Life
EPA	Environmental Protection Agency
EPD	Umwelt- Produktdeklarationen
EPRTR	European Pollutant Release and Transfer Register
ERV	Energy Reduction Value
EU	Europäische Union
EU-ETS	Europäisches Emissionshandelssystem
FCC/CC	Fluid Catalytic Cracking
FRV	Fuel Reduction Value
GWP	Global Warming Potential
HCI	Salzsäure
HDPE	High Density Polyethylene
HEV	Hybrid Electric Vehicle
HFC	Fluorkohlenwasserstoff
HNO ₃	Salpetersäure
H ₂ O	Wasser

H_2SO_4	Schwefelsäure
HVC	High Value Chemicals
IEA	International Energy Agency
IPCC	Intergovernmental Panel on Climate Change
IPPC	Integrated Pollution Prevention and Control
KEA	Kumulierter Energieaufwand
KSS	Kühl- und Schmierstoffe
LCA	Life Cycle Assessment
LCC	Life Cycle Costing
LCI	Life Cycle Inventory
LCIA	Life Cycle Impact Assessment
Lkw	Lastkraftwagen
MADM	Multi-Attribute Decision Making
MCDM	Multi-Criteria Decision Making
MDI	Methylendiphenyldiisocyanat
MFKR/MFCA	Materialflusskostenrechnung
MNT	Mononitrotoluol
MODM	Multi-Objective Decision Making
N ₂	Stickstoff
NI	Nelson Complexity Index
NEFZ	Neuer Europäischer Fahrzyklus
NE	Nicht-Eisen
N_2O	Distickstoffmonoxid
PCF	Product Carbon Footprint
PE	Polyethylene
PET	Polyethylenterephthalat

PFC	Perfluorierte Kohlenwasserstoffe
PHEV	Plug in Hybrid Electric Vehicle
Pkw	Personenkraftwagen
PP	Polypropylen
PROMETHEE	Preference Ranking Organisation Method for Enrichment Evaluation
PRTR	Pollutant Release and Transfer Register
ps	Prozessschritt
PUR	Polyurethan
PV	Photovoltaik
PVC	Polyvinylchlorid
O ₂	Sauerstoff
RC	Recycling
RESH	Reststoffe Schredder
SC	Steam Cracking
SEC	Specific Energy Consumption
SEF	Spezifischer Emissionsfaktor
SF ₆	Schwefelhexafluorid
S-LCA	Simplified-LCA
SUV	Sports Utility Vehicle
тсо	Total Cost of Ownership
TDA	Diaminotoluol
TDI	Toluoldiisocyanat
THG	Treibhausgas
TOPSIS	Technique for Order Preference by Similarity to Ideal
	Solution
TtW	Tank to Wheel
- UBA Umweltbundesamt
- UN United Nations (Vereinte Nationen)
- VBA Visual Basic for Applications
- VCI Verband der Chemischen Industrie
- VDA Verband der Automobilindustrie
- VDI Verein Deutscher Ingenieure
- VDIK Verband der Internationalen Kraftfahrzeughersteller
- WBGU Wissenschaftlicher Beirat für globale
 - Umweltveränderungen
- WiC Worst in Class
- WLTP Worldwide Harmonized Light-Duty Vehicles Test Procedure
- WSM Weighted Sum Method
- WtT Well to Tank
- WtW Well to Wheel

1 Einleitung

1.1 Problemstellung

Die massiven anthropogenen Emissionen von Kohlenstoffdioxid und anderen Treibhausgasen gelten als einer der Hauptgründe für den Klimawandel auf der Erde (IPCC 2013). Aus diesem Grund existieren viele nationale und internationale Abkommen und Absichtserklärungen, in denen konkrete Zielwerte zur Einsparung von Treibhausgasemissionen (THG-Emissionen) vereinbart wurden. So setzen sich Deutschland und auch die gesamte Europäische Union das Ziel, bis 2030 55 % der THG-Emissionen gegenüber dem Basisjahr 1990 einzusparen (Europäische Kommission 2020; BMUB 2016). Das Ergebnis der bisher erreichten THG-Einsparungen ist jedoch ernüchternd: Deutschlands Klimaziel für das Jahr 2020 (40 % Einsparung gegenüber 1990) wurde zwar erreicht (42,3 %), allerdings nur aufgrund der massiven Auswirkungen der Corona-Pandemie auf die Wirtschaft. Eigentlich wäre das Ziel verfehlt worden (37,8 % statt 40 % Einsparung). (Agora Energiewende 2021) Bisherige Berechnungen gehen auch von einem Verfehlen der Ziele für 2030 aus, obwohl neueste Studien schon die Bepreisung von Kohlenstoffdioxid (CO₂) für fossile Brennstoffe enthalten (CO₂-Steuer¹), die im Rahmen des neuen Klimaschutzprogramms der deutschen Bundesregierung im Januar 2021 eingeführt wurde. (UBA 2020a)

Sowohl in der Politik und Wirtschaft als auch in der Bevölkerung rückt der Klimawandel, auch bedingt durch das voraussichtliche Verfehlen vereinbarter Ziele, immer stärker in den Fokus. So gibt es unterschiedliche Demonst-

¹ Die Bepreisung fossiler Brennstoffe ist in Höhe von 25 €/tCO₂ vorgesehen, die jeden Bürger und jedes Unternehmen in Deutschland betrifft (BMWi 2019).

rationsformate für ein rascheres und konsequenteres Handeln, wie Demonstrationen für einen schnelleren Kohleausstieg oder die Fridays-for-Future-Bewegung, die ein grundsätzliches Umdenken in Umweltfragen fordert. Es wird ein noch deutlicheres Bekenntnis zu den Klimazielen seitens der Politik, und seitens der Industrieunternehmen gefordert. Durch die Absicht der Politik, die Minderungsziele einhalten zu wollen, und durch den Druck der Bevölkerung erscheint es sehr wahrscheinlich, dass die Gesetzgebung weitere Verschärfungen vornehmen wird, um die Klimaziele des Jahres 2030 zu erreichen.

Auch hat sich das Bewusstsein der Bevölkerung in den letzten Jahren dahingehend geschärft, nachhaltiger im Sinne nachfolgender Generationen zu handeln (BMU 2018). So nimmt die Nachfrage nach klimaneutral oder zumindest klimafreundlich hergestellten Produkten (z.B. Pkws) zu (Sarkar et al. 2018). Die Tatsache, dass 21 % der THG-Emissionen in Deutschland industriebedingt sind, also nur durch die Erzeugung und Verarbeitung von Produkten verursacht werden (UBA 2018c), verdeutlicht das Potenzial und die Notwendigkeit, THG-Emissionen in der Produktherstellung zu reduzieren. Angesichts der aktuellen Gesetzgebung und sich verschärfender Rahmenbedingungen (z.B. CO₂-Bepreisung und sukzessive Erhöhung des CO₂-Preises), des Strebens der Kunden nach klimafreundlicheren Produkten und auch der intrinsischen Motivation der Industrieunternehmen rückt die Konfiguration CO₂-effizienter Produkt-Wertschöpfungsketten bzw. ein niedriger Product Carbon Footprint² (PCF) zunehmend in den Fokus unternehmerischen Handelns. Dabei stoßen die Unternehmen jedoch auf zwei entscheidende Problemstellungen:

1. Intransparenz von THG-Emissionen entlang der Lieferkette: Lieferketten haben sich aufgrund der Globalisierung bzw. der Internationalisierung des

² Der PCF ist definiert als die Bilanz der THG-Emissionen entlang des gesamten Lebenszyklus eines Produkts in einer definierten Anwendung und bezogen auf eine definierte Nutzeinheit (BMU et al. 2009).

Beschaffungsmarktes heutzutage zu sehr komplexen Liefernetzwerken entwickelt. Unternehmen können aus einer Vielzahl an Direktlieferanten wählen, die jeweils eigene Unterlieferanten haben, und auch diese haben wiederum ihr eigenes Liefernetzwerk. Je nach Anzahl der Wertschöpfungsstufen eines Produkts setzt sich die Lieferkette aus einer Vielzahl an Lieferanten zusammen. So ist es heutzutage keine Seltenheit, wenn Unternehmen weniger als 20 % der Wertschöpfung ihrer Produkte selbst generieren, und der Großteil der Wertschöpfung somit in der Lieferkette erbracht wird (Hartley und Choi 1996; Bai und Sarkis 2011). Der Ursprung (z.B. Werk/Standort des Lieferanten) der eingekauften Produkte und auch die eingesetzten Produktionsprozesse und Umweltwirkungen im Liefernetzwerk sind fokalen³ Unternehmen aufgrund der Komplexität des Liefernetzwerks daher meist unbekannt. Eine Abschätzung der spezifischen THG-Emissionen entlang der Wertschöpfungsstufen ist daher bislang nicht möglich. Die Verwendung von Beschaffungs- und Produktionsdaten der Lieferanten könnte zwar die Abschätzung von THG-Emissionen ermöglichen und auf diese Weise Transparenz in die Lieferkette bringen, doch diese Produktionsdaten sind in der Regel vertraulich und nicht öffentlich zugänglich (Saygin 2012).

2. Profitabilität bei gleichzeitiger Transformation zu einem klimafreundlichen Unternehmen: Aus ökonomischer Sicht sind Unternehmen darauf angewiesen profitabel zu sein um einerseits ihre Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter zu entlohnen und um andererseits zu investieren sowie langfristiges Wachstum und eine Erhöhung des Wohlstands anzustreben.

³ Ein fokales Unternehmen ist ein "zentrales Unternehmen in einem strategischen Netzwerk, dem die Aufgabe der Selektion bei der Aufnahme von Unternehmen in das Netzwerk, die Koordination der spezialisierten Aktivitäten der Netzwerkunternehmen sowie die Steuerung des Wissenstransfers und die Evaluierung der erbrachten Leistungen innerhalb des Netzwerkes zufällt". (Gabler 2013)

Derzeit befinden sich viele Unternehmen (83 %)⁴ im Transformationsprozess zu einem nachhaltig, vor allem klimafreundlich, agierenden Unternehmen (VDI-Z 2020; Ramboll Deutschland GmbH 2020). 95 % der in Ramboll Deutschland GmbH (2020) befragten Unternehmen sehen Nachhaltigkeit als Schlüssel ihres zukünftigen Erfolgs, doch die Umsetzung stelle sie vor große Herausforderungen. Für einen Großteil der Unternehmen ist die Transformation mit hohen Investitionen verbunden. Die Studie zeigt, dass die anstrebte Transformation nur dann mit wirtschaftlichem Wachstum einhergeht, wenn strategische Ziele neu formuliert und entsprechende Maßnahmen umgesetzt werden. Die zentrale Herausforderung besteht für die Unternehmen derzeit darin, geeignete Maßnahmen zu identifizieren und einzuleiten (VDI-Z 2020), ohne dabei den langfristigen Unternehmenserfolg zu gefährden. Solche Maßnahmen können Prozessverbesserungen (z.B. zur Erreichung einer höheren Energie- und Ressourceneffizienz) oder die Neugestaltung von Produkten sein (z.B. Wahl eines anderen Materials, um THG-Emissionen in der Herstellung, der Produktnutzung und durch Recycling am Ende des Lebenszyklus einzusparen). (VDI-Z 2020) Doch vielen Unternehmen fehlen Daten, Methoden und Bewertungssysteme, um Entscheidungen fundiert treffen zu können (Ramboll Deutschland GmbH 2020).

Angesichts der beschriebenen ambitionierten Klimaziele und der Schlüsselrolle der Industrie dabei ist es unerlässlich, industrielle Wertschöpfungsketten zu analysieren und darin THG-Reduktionspotenziale aufzudecken, die von Unternehmen zu möglichst geringen Kosten realisiert werden können. Dabei stellen sich insbesondere folgende Fragen:

• Gibt es bei treibhausgasintensiven Materialherstellungsprozessen, wie bei der Metallerzeugung oder bei der Herstellung chemischer

⁴ In der Studie wurden insgesamt 160 Industrieunternehmen befragt. (Ramboll Deutschland GmbH 2020)

Grundstoffe werksspezifische Unterschiede zwischen Herstellern hinsichtlich der verursachten THG-Emissionen?

- Kann der Carbon Footprint eines Produkts durch einen Wechsel des Materiallieferanten signifikant reduziert werden?
- Wie groß ist der Anteil eines Materialherstellers/-lieferanten am Carbon Footprint eines Produkts?
- Wie groß ist der kombinierte Einfluss der Material- und Lieferantenwahl am Carbon Footprint eines Produkts?
- Wie hoch sind die zusätzlichen Kosten für ein Unternehmen (z.B. in €/tCO₂e), damit die Wertschöpfungskette eines Produkts klimafreundlicher konfiguriert wird?
- Wie kann die für ein spezifisches Unternehmen bzw. deren Produkt optimale Wertschöpfungskette unter Berücksichtigung von Kosten und THG-Emissionen bestimmt werden?
- Wie stark müssten THG-Emissionen im Gegensatz zu Herstellkosten gewichtet werden, damit produkt- bzw. produktionsbezogene Unternehmensentscheidungen klimafreundlicher getroffen werden?

1.2 Zielsetzung und Lösungsweg

Um die im vorangegangenen Abschnitt aufgeworfenen Fragen zu beantworten, sind Bilanzierungs- und Bewertungssysteme erforderlich, die sowohl Kosten als auch THG-Emissionen integriert und wertschöpfungskettenspezifisch betrachten und unter Berücksichtigung beider Kriterien eine optimale⁵ Wertschöpfungskette konfigurieren. Hierfür wird in dieser Arbeit ein modular aufgebautes Entscheidungsunterstützungssystem entwickelt, welches für jede Phase einer Wertschöpfungskette Potenziale zur THG-Reduktion aufdeckt und die für ein Unternehmen relevanten ökonomischen Zusammenhänge berücksichtigt. Damit soll diese Arbeit einen Beitrag zur nachhaltigen industriellen Produktion leisten.⁶ Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass der Fokus in dieser Arbeit auf der ökonomischen und ökologischen Perspektive der Nachhaltigkeit liegt und soziale Aspekte der Nachhaltigkeit bewusst nicht betrachtet und somit von der Entscheidungsfindung ausgeschlossen werden.⁷ Im Vordergrund einer Wertschöpfungskette stehen hier, angelehnt an die Lebenszyklusphasen eines Produkts, die Phasen Produktion (insbesondere Materialherstellung und -verarbeitung bis hin zum Endprodukt), Nutzung und Ende des Lebenszyklus'. Die Phase der Produktentwicklung wird somit bewusst vernachlässigt.⁸

⁵ Eine Wertschöpfungskette wird in dieser Arbeit als optimal definiert, wenn sie unter Berücksichtigung der verfügbaren Produktionsdaten und der Entscheidungspräferenzen eines Unternehmens die klimafreundlichste und ökonomischste Wertschöpfungskette darstellt. Entscheidungspräferenzen können hierbei beispielsweise die Gewichtungen von Kosten und THG-Emissionen sein.

⁶ In der industriellen Produktion ist dann von Nachhaltigkeit die Rede, wenn neben ökonomischen Motiven auch ökologische und/oder soziale Aspekte bei der Zielsetzung und Entscheidung eine Rolle spielen und durch unternehmerische Aktivität ebenfalls Wertschöpfung in diesen Bereichen geschaffen wird (vgl. Dyckhoff und Spengler 2010; Dyckhoff und Souren 2008) (siehe auch Kapitel 2.1).

⁷ Zur Vertiefung und Integration sozialer Aspekte in die Entscheidungsfindung siehe Zimmer (2016).

⁸ Aus ökologischer Sicht werden während der Entwicklungsphase in der Regel keine Schadstoffe in die Umwelt emittiert. Aus ökonomischer Sicht steht hier die Planung der Herstellkosten im Fokus, die keine Entwicklungskosten beinhalten (vgl. Coenenberg et al. 2016).

Zur Veranschaulichung wird das zu entwickelnde Entscheidungsunterstützungssystem anhand von Fallstudien demonstriert. Bei der Wahl der Fallstudien dienen die Automobil- und ihre Zulieferindustrie (insbesondere die Metall- und Chemieindustrie) als übergeordnetes Anwendungsbeispiel, da diese hinsichtlich der Problem- und Zielstellung dieser Arbeit einen maßgeblichen Anwendungsbereich darstellen (vgl. Kapitel 2.3). Für Produkte, die in Kraftfahrzeugen verbaut werden (z.B.: Fahrzeugkomponenten), ist die Berücksichtigung des gesamten Produktlebenszyklus bei der Konfiguration der Wertschöpfungskette von besonders großer Bedeutung, da diese auch in der Nutzungsphase in hohem Maße indirekte THG-Emissionen verursachen (vgl. Kapitel 2). Die nutzungsbedingten Emissionen hängen wesentlich vom Gewicht der Fahrzeugkomponente sowie der Antriebstechnik des Kraftfahrzeugs ab (vgl. Kapitel 2 und Kapitel 7). Dadurch erhöht sich die Komplexität des Entscheidungsunterstützungssystems bzw. des Lösungswegs, da auch die Nutzungsphase möglichst exakt abgebildet werden muss, um die Wertschöpfungskette unter Berücksichtigung des gesamten Lebenszyklus klimafreundlich konfigurieren zu können.

Die ökologische Zielsetzung der vorliegenden Arbeit besteht darin, durch Bilanzierung von THG-Emissionen entlang industrieller Wertschöpfungsketten zu einer Senkung des Product Carbon Footprints (PCF) von Endprodukten⁹ und damit zu einer Reduktion des Klimawandels und seiner Auswirkungen beizutragen. Damit zielt die vorliegende Arbeit nicht nur auf den Industriesektor (21 %), sondern auch auf den Verkehrssektor (19 %) ab. Beide Sektoren zusammen machten im Jahr 2017 ca. 40 % der jährlichen THG-Emissionen in Deutschland aus (UBA 2018a).

⁹ Der Begriff Endprodukt wird in dieser Arbeit nach Mellerowicz (2011) definiert, der ein Produkt als Endprodukt bezeichnet, wenn dieses für seine angedachte Verwendungsform (z.B.: Konsumgut) keine (Form-)Veränderung mehr durchmacht.

Zur Berücksichtigung der ökonomischen Nachhaltigkeitsdimension nutzt diese Arbeit die produktionswirtschaftliche Kenngröße der "Herstellkosten"¹⁰. Dadurch lassen sich die Auswirkungen von Konfigurationsänderungen der Wertschöpfungskette, wie der Wechsel eines Materiallieferanten oder Fertigungsverfahrens, auf die THG-Emissionen und Herstellkosten eines Produktes simultan betrachten und steuern. Konfigurationsänderungen, die zu einer Verringerung der THG-Emissionen führen, werden der jeweiligen Verringerung oder Erhöhung der Herstellkosten gegenübergestellt. So lassen sich beispielsweise die unternehmensspezifischen Kosten zur Minderung von THG-Emissionen bei der Produktherstellung berechnen (THG-Vermeidungskosten). Unternehmen könnten basierend darauf entscheiden, in welchem Maß THG-Emissionen eingespart werden können und sollen und in welchem Maß dies unter wirtschaftlichen Gesichtspunkten möglich ist. Ferner soll eine Entscheidungsunterstützung durch die Verwendung verschiedener multiattributiver Entscheidungsmodelle ermöglicht werden.

Die Entwicklung des integrierten Entscheidungsunterstützungssystems stützt sich sukzessive auf den im Folgenden beschriebenen Lösungsweg.

Kapitel 2 führt zunächst in die nachhaltige Produktion ein und definiert die Systemgrenzen der Arbeit. Daraus werden grundsätzliche Anforderungen an die Planung und Bewertung nachhaltiger Wertschöpfungsketten abgeleitet, um die komplexen Stoff- und Energieflüsse auf Werks-/Anlagenebene zu bewerten, um Minderungspotenziale beziffern und Wertschöpfungsketten optimieren zu können.

In Kapitel 3 wird das Forschungsthema in die bestehende Literatur eingeordnet. Dies umfasst zum einen die Diskussion und Auswahl von Methoden, die

¹⁰ Herstellkosten beziehen alle Einzelkosten des Produkts und dessen Material- und Fertigungsgemeinkosten mit ein, jedoch nicht die Kosten der Forschung und Entwicklung (vgl. Coenenberg et al. 2016).

für die angestrebte ökologische und ökonomische Bewertung und Entscheidungsfindung geeignet sind. Zum anderen werden existierende Bewertungsansätze analysiert und Forschungslücken aufgezeigt.

In Kapitel 4 werden die konkreten Anforderungen an das zu entwickelnde Entscheidungsunterstützungssystem aufgestellt und die Konzeptionierung des Systems vorgenommen. Durch die lebenszyklusorientierte Bilanzierung wird ein modularer Systemaufbau (A-D) gewählt, sodass die Phasen/Stufen einer Wertschöpfungskette in verschiedenen Systemmodulen (A, B und C) modelliert werden. Auf diese Weise können auch einzelne Phasen isoliert bewertet werden. In Systemmodul D werden die Ergebnisse aller Systemmodule zusammengeführt und auf Basis verschiedener Methoden der Entscheidungsanalyse optimale Lösungen zur Konfiguration der Wertschöpfungskette generiert.

In Kapitel 5 wird Systemmodul A vorgestellt, das die THG-Emissionen der Materialherstellung und deren Vorketten bilanziert. Dazu werden generische, werks-/anlagenspezifische Life Cycle Assessment (LCA)-Modelle entwickelt (Teilmodule A1 bis A6), die verschiedene Materialien und beliebig viele Werke gleichzeitig bewerten können. Systemmodul A wird am Beispiel nationaler und europäischer Metall- und Chemikalienhersteller angewendet.

In Kapitel 6 wird Systemmodul B entwickelt, das sich der Bilanzierung und Bewertung der THG-Emissionen und Herstellkosten der nachgeschalteten Materialverarbeitung/Endproduktfertigung bis zum Endprodukt widmet. Dies wird durch eine Integration der Methoden LCA, Lebenszykluskostenrechnung (LCC) und Materialflusskostenrechnung (MFKR) ermöglicht. Dadurch werden u.a. auch Potenziale zur Steigerung der Ressourceneffizienz in Fertigungsketten (z.B. Minimierung von Materialverlusten) aufgedeckt. Als Anwendungsbeispiel dient die Fertigung eines Pkw-Bauteils durch einen weltweit agierenden Automobilzulieferer.

1 Einleitung

In Kapitel 7 wird Systemmodul C entwickelt, um sämtliche THG-Emissionen durch ein LCA zu bilanzieren, die durch die Nutzungsphase sowie durch Aktivitäten am Ende des Produktlebenszyklus (z.B. Recycling) verursacht werden. Eine Anwendung des Systemmoduls C erfolgt anhand des Pkw-Fallstudienbauteils aus Systemmodul B. Um eine umfassende Entscheidungsgrundlage zur Verfügung stellen zu können, werden verschiedene Antriebstechniken, Fahrzeuglaufleistungen und CO₂-Intensitäten der Stromerzeugung szenarienbasiert untersucht.

In Kapitel 8 werden zunächst zu untersuchende Szenarien aufgestellt und die Entscheidungsanalyse (Systemmodul D) beschrieben. Die Entscheidungsanalyse umfasst eine detaillierte wertschöpfungskettenspezifische PCF-Analyse, um Transparenz entlang der Wertschöpfungskette zu erlangen. Zur Entscheidungsfindung werden alle kombinatorisch möglichen Wertschöpfungskettenkonfigurationen erzeugt und unter diesen die pareto-optimalen Konfigurationen ermittelt. Zur weiteren Analyse werden der THG-Vermeidungskostenansatz, die Weighted Sum Method (WSM) und das PROMETHEE-Verfahren implementiert, um aus den pareto-optimalen Konfigurationen die für ein Unternehmen optimale Wertschöpfungskettenkonfiguration zu bestimmen. Überdies werden Sensitivitäts-/Stabilitätsanalysen für alle Szenarien durchgeführt, um die Robustheit einer optimalen Konfiguration in Abhängigkeit der Präferenzen des Entscheidungsträgers (z.B. Kriteriengewichtungen) zu untersuchen.

Kapitel 9 fasst die Arbeit und insbesondere die wichtigsten Erkenntnisse der verschiedenen Systemmodule sowie die Antworten auf die Forschungsfragen zusammen.

2 Rahmenbedingungen und Anforderungen an eine Bewertung industrieller THG-Emissionen

In diesem Kapitel werden die grundlegenden Rahmenbedingungen und Anforderungen an die Bewertung von industriellen Treibhausgasemissionen dargestellt. Kapitel 2.1 führt zunächst in die Grundlagen nachhaltiger Wertschöpfungsketten ein. Neben Begriffsdefinitionen und der Entwicklung des nachhaltigen Wirtschaftens wird vor allem erläutert, was in dieser Arbeit unter nachhaltiger Produktion verstanden wird. Anschließend wird in Kapitel 2.2 auf den Klimawandel und dessen Auswirkungen eingegangen, um die Bedeutung der Einhaltung der Ziele zur Reduktion von Treibhausgasemissionen aufzuzeigen. In Kapitel 2.3 wird hergeleitet, welche Industriesektoren Hauptverursacher von THG-Emissionen sind. Darunter fallen vor allem die Metall- und Chemieindustrie, deren aktuelle Herstellungsverfahren in den Kapiteln 2.4 und 2.5 erläutert werden. Ein besonderer Fokus liegt dabei auf der Darstellung der treibhausgasintensiven Prozesse. Im Anschluss an die Produktionstechniken der Materialherstellung werden in Kapitel 2.6 Fertigungsverfahren beschrieben, mit denen Metalle und Kunststoffe weiterverarbeitet werden können. Basierend auf den Kapiteln 2.1 bis 2.6 werden in Kapitel 2.7 Anforderungen zusammengefasst, die ein Planungswerkzeug erfüllen sollte, um THG-Emissionen entlang der Wertschöpfungskette nachhaltig bewerten zu können.

2.1 Theoretische Grundlagen nachhaltiger Wertschöpfungsketten

Vor dem Hintergrund der stetig wachsenden Weltbevölkerung, dem damit steigenden Verbrauch nicht-regenerativer Ressourcen, der Umweltzerstörung im Allgemeinen und vor dem Hintergrund des Klimawandels und seiner drohenden Folgen im Speziellen ist das Streben nach nachhaltigem Entscheiden und Handeln zu beobachten (Dyck hoff und Spengler 2010; Dyck hoff und Souren 2008).

2.1.1 Definition und Entwicklung der Nachhaltigkeit

Nachhaltigkeit ist ein junger Begriff, der jedoch einen Umgang mit der Natur beschreibt, der schon vor hunderten von Jahren in allen Kulturen praktiziert wurde. Quellen berichten über Indianervölker, die darauf achten, Seen nicht zu überfischen (Schreiber 2004), oder über bäuerliche Kulturen der Antike, für die unser heutiger Nachhaltigkeitsgedanke bereits selbstverständlich war (Vogt 2013). Der nachhaltige Umgang mit lebensnotwendigen Ressourcen bzw. Nachhaltigkeit war schon immer eine Form der Überlebensstrategie (Chasek 2006). Die Ursprünge des Formulierens von Nachhaltigkeit als Grundsatz liegen in der deutschen Forstwirtschaft des frühen 18. Jahrhunderts. Das erste dazu niedergeschriebene Werk, mit dem Titel "Sylvicultura Oeconomica", stammt vom sächsischen Oberberghauptmann Hans Carl von Carlowitz aus dem Jahr 1713. Er forderte eine neue Form der Holzwirtschaft, da es vor seiner Zeit, vor allem während des Dreißigjährigen Krieges (1618 -1648), durch Kahlschlag zu starken Waldschäden gekommen war. Zudem bemerkte er den hohen Holzverbrauch im Zuge des damaligen Bergbaus und plädierte dafür, dass zukünftig immer nur so viel Holz geschlagen werden solle, wie durch Wiederaufforstung nachwachsen könne. Dies beschrieb er als die nachhaltige Nutzung von Wäldern. (Carlowitz et al. 2000)

Über die Grenzen der Forstwirtschaft hinaus ist der Umgang mit der natürlichen Umwelt erst aufgrund zahlreicher Umweltkatastrophen in den 1950er und -60er Jahren, wie Tankerunfälle oder Smog in Großstädten, zu vermehrter Aufmerksamkeit gelangt. Die in diesem Zusammenhang geführte gesellschaftspolitische Auseinandersetzung führte über die Themenkomplexe Umwelt und Entwicklung schließlich zum Konzept der Nachhaltigen Entwicklung. (Burschel et al. 2004; Loew et al. 2004; Schrack 2016)

Mit dem Anfang der 1970er Jahre, als prognostiziert wurde, dass sich eine Übernutzung natürlicher Ressourcen auf die Wirtschaft auswirken könne, wurde das Thema der Nachhaltigen Entwicklung immer populärer. Große Aufmerksamkeit erhielt diesbezüglich der 1972 veröffentlichte Bericht "Grenzen des Wachstums" des Club of Rome (Bretzke und Barkawi 2012), in dem die Autoren beschrieben, wie das schnelle Bevölkerungs- und Wirtschaftswachstum mit hohem Ressourcenverbrauch einhergeht und dies in einem Zusammenbruch des globalen Gesellschafts- und Wirtschaftssystems resultieren wird (Meadows 1974). In Folge dessen wurde intensiv über die Zusammenhänge zwischen dem Verbrauch bzw. der Erschöpfung natürlicher Ressourcen, dem Wirtschaftswachstum und den gesellschaftlichen Produktions- und Lebensstilen diskutiert (Burschel et al. 2004). In diesem Zuge wurden auch die Anfänge der betriebswirtschaftlichen Wissenschaftszweige "Umweltwirtschaft" bzw. "Umweltmanagement" gelegt (Prammer 2009), die in Kapitel 3.2 weiter ausgeführt werden.

Die erste weitreichend akzeptierte Definition für Nachhaltigkeit und nachhaltige Produktion geht aus dem Brundtland-Bericht "Our Common Future" der Weltkommission für Umwelt und Entwicklung der Vereinten Nationen aus dem Jahre 1987 hervor (WCED 1987): *"Sustainable development is development that meets the needs of the present without compromising the ability of future generations to meet their own needs.*" Eine nachhaltige Entwicklung ist also eine Entwicklung, die den Bedürfnissen der Gegenwart entspricht, ohne die Fähigkeit künftiger Generationen zu beeinträchtigen, ihre eigenen Bedürfnisse zu befriedigen. Damit war eine erste, allgemein anerkannte und bis heute prägende Definition des Begriffs "Sustainable Development" publiziert. Allerdings fehlt bis heute eine allgemein gültige Definition, sodass es im Laufe der Jahre zu einer Reihe an Definitionen für das Leitbild der Nachhaltigen Entwicklung kam. Für eine detaillierte Diskussion und Auflistung der verschiedenen Definitionen wird auf Burschel et al. (2004) verwiesen. Trotz der zahlreichen Definitionen ist erkennbar, dass über den Kern der Definitionsinhalte überwiegend Konsens herrscht. Im Mittelpunkt steht die inter- und intragenerative Gerechtigkeit einer globalen Ressourcenteilhabe. (Burschel et al. 2004)

Ein weiterer Meilenstein wurde 1992 erreicht, als die Vereinten Nationen (UN) die UN-Konferenz für Umwelt und Entwicklung in Rio de Janeiro einberiefen. Damit reagierten die Vereinten Nationen auf den Brundtland-Bericht und diese Einberufung wurde zum Symbol für das neue Bewusstsein der Weltgemeinschaft hinsichtlich einer gemeinsamen Verantwortung. (Müller-Christ 2001) Die internationale Staatengemeinschaft verpflichtete sich im Rahmen dieser Konferenz dazu, auf nationaler und globaler Ebene konkrete Maßnahmen nach dem Leitbild der Nachhaltigen Entwicklung umzusetzen (Grunwald und Kopfmüller 2012). Im Bereich der Klimapolitik wurde die Klimarahmenkonvention vereinbart: Der erste internationale Vertrag, in dem der Klimawandel als ernsthafte Bedrohung eingestuft wird und das Ziel für die Staatengemeinschaft formuliert, eine gefährliche Störung des Klimas zu vermeiden (Bodansky 1993). Mit dem Inkrafttreten der Klimarahmenkonvention zwei Jahre später im Jahr 1994 finden seit 1995 jährlich UN-Weltklimakonferenzen an wechselnden Orten statt. Die für die klimapolitische Entwicklung relevanteste Klimakonferenz fand 1997 in Kyoto statt, auf der das sogenannte Kyoto-Protokoll verabschiedet wurde. Dies ist ein für den Klimaschutz beschlossenes Zusatzprotokoll, in dem erstmals rechtlich verbindliche Zielwerte für den Ausstoß von Treibhausgasen in den Industrieländern festgelegt wurden (IPCC 2007c). Die Entwicklung führte bis zum derzeit aktuellsten Abkommen, dem Pariser Klimaschutzabkommen aus dem Jahr

2015. Das Abkommen ist 2016 in Kraft getreten und wurde bis Ende 2018 von 180 Staaten ratifiziert (BMWi 2018). Bezüglich der angestrebten nationalen und internationalen Ziele der Klimaschutzabkommen wird auf Kapitel 2.2 verwiesen.

Im Bereich Umwelt und Entwicklung folgten nach der UN-Konferenz von 1992 eine Reihe weiterer, bedeutender Konferenzen zur konkreten Umsetzung nationaler und internationaler Nachhaltigkeitsziele. Zu nennen sind beispielsweise die Weltbevölkerungskonferenz 1994 in Kairo, der Weltsozialgipfel 1995 in Kopenhagen, der Weltgipfel für nachhaltige Entwicklung 2002 in Johannesburg, die 2012 erneut in Rio de Janeiro stattgefundene UN-Konferenz über nachhaltige Entwicklung und der Weltgipfel für nachhaltige Entwicklung 2015 in New York. (Zimmer 2016)

2.1.2 Dimensionen der Nachhaltigkeit

Im Zuge dieser Entwicklung haben sich Mitte der 1990er-Jahre drei Nachhaltigkeitsdimensionen etabliert, die seitdem als Ausgangspunkt vieler Nachhaltigkeitsstrategien und -konzepte fungieren (Schrack 2016). Die vormals rein ökologische Perspektive der Nachhaltigkeit wurde um eine ökonomische und eine soziale Dimension erweitert. Eine Differenzierung, die es möglich macht, scheinbar konfliktäre Ziele oder Interessen simultan zu betrachten und miteinander zu versöhnen. (Prammer 2009)

Aufgrund der gleichrangigen Berücksichtigung von Ökologie, Ökonomie und Soziales werden die drei Dimensionen als sogenanntes "Drei-Säulen-Konzept" bzw. "magisches Dreieck" der Nachhaltigkeit verstanden (Huber 2001; Hauff und Kleine 2009). In der Literatur hat sich zur Visualisierung des Drei-Säulen-Konzepts ein Drei-Säulen-Modell durchgesetzt, das in der Vergangenheit jedoch mehrfach auf Kritik gestoßen ist. Der Begriff Nachhaltigkeit stellt darin ein Dach dar, das beispielsweise auch nur durch zwei oder sogar nur die mittlere Säule getragen werden könnte (Hauff 2012). Somit kommt es zu einer Partialoptimierung, bei der eine Integration aller Säulen fehlt (Ott und Döring 2011).



Abbildung 2.1: Visualisierungsmöglichkeiten für die drei Dimensionen der Nachhaltigkeit (in Anlehnung an Kropp 2019)

Neben dem Drei-Säulen-Modell hat sich daher auch häufig ein Schnittmengen-Modell in Form von Kreisen oder in Form eines Dreiecks durchgesetzt (Hauff und Kleine 2009) (vgl. Abbildung 2.1). Im Kontext unternehmerischer Nachhaltigkeit der betrieblichen Praxis wird zudem von der "Triple-Bottom-Line" gesprochen. Elkington (1998) führte diesen Begriff in Anlehnung an die "Bottom-Line", den Profit eines Unternehmens, ein. Der Gewinn eines Unternehmens soll unter Berücksichtigung ökologischer und sozialer Aspekte erwirtschaftet werden, um natürliche Ressourcen für zukünftige Generationen zu erhalten (Quick und Knocinski 2006; Schmidt 2013). Die drei Dimensionen der Nachhaltigkeit verfolgen im Kern das Ziel wirtschaftlichen Erfolg in Einklang mit Umwelt- und Sozialverträglichkeit zu realisieren (Corsten und Roth 2012). Im Folgenden werden die drei Nachhaltigkeitsdimensionen kurz beschrieben.

Ökologische Systeme bilden die Lebensgrundlage aller menschlicher Aktivitäten auf der Erde. Die ökologische Dimension der Nachhaltigkeit zielt daher auf die Erhaltung ökologischer Systeme ab, ohne die der Mensch nicht überlebensfähig wäre. (Hauff und Kleine 2009) Konkret geht es um das Reduzieren ökologischer Missstände, die schonende Nutzung natürlicher und am besten sich regenerierender Ressourcen und deren Sicherung, Erhalt oder gar das Erreichen einer positiven Entwicklung für nachfolgende Generationen. Im Mittelpunkt steht dabei, dass die natürliche Lebensgrundlage für Flora und Fauna geschützt wird. (Koplin 2006; Colsman 2016)

Die ökonomische Dimension der Nachhaltigkeit zielt darauf ab, eine angemessene bzw. gewünschte Lebensqualität für alle Menschen zu schaffen und diese über Generationen hinweg aufrecht zu erhalten (Enquete-Kommission 1998). Wichtige Teilziele um dies zu erreichen sind eine geringe Arbeitslosigkeit, Preisstabilität und ein wirtschaftliches Gleichgewicht zwischen den Ländern (Schmidt 2013). Vor allem aber ist eine zunehmende Entkopplung von Wirtschaftswachstum und Ressourcenverbrauch erforderlich, da seit dem Bericht "Grenzen des Wachstums" des Club of Rome bekannt ist, dass (zumindest im betrachteten Zeitraum) steigende Wachstumsraten bzw. Wohlstand in einem steigenden Umweltverbrauch resultierten. Im Zentrum der Entkopplung stehen dabei beispielsweise innovative Produkte und Produktionstechniken, erhöhte Ressourcenproduktivität oder die Nutzung regenerativer Kapazitäten (z.B. Erneuerbare Energien) (Schrack 2016).

Im Fokus der sozialen Dimension stehen soziale Stabilität, individuelle Freiheit, Sicherung von Entwicklungs- und Handlungsmöglichkeiten sowie das Erreichen möglichst positiver Auswirkungen auf das gesellschaftliche Umfeld (Colsman 2016; Promberger et al. 2006). Im Mittelpunkt stehen dabei ein gerechter Zugang zu sozialen Grundgütern, eine gerechte Ressourcenverteilung sowie Chancengleichheit, Existenzsicherung, Rechtssicherheit und Gleichberechtigung (Schmidt 2013; Hauff und Kleine 2009). Aber auch die Festigung demokratischer Strukturen und die Verbesserung von Bildungs- und Gesundheitssystemen zählen zu den Zielen sozialer Nachhaltigkeit (Koplin 2006). Darüber hinaus kann im Zusammenhang des Konzepts sozialer Nachhaltigkeit auch die Glücksforschung erwähnt werden, die durch das Messen und Aufzeigen von Glück oder Zufriedenheit einen wichtigen Beitrag leistet (Hauff und Kleine 2009).

2.1.3 Unternehmerische Nachhaltigkeit entlang der Wertschöpfungskette

Durch die stetig präsenter werdenden Umweltanforderungen, politischen Forderungen (z.B. Fridays for Future Bewegung) und Diskussionen zur Nachhaltigkeit sind Unternehmen neben den ökonomischen Zielsetzungen auch zunehmend mit Fragen des ökologischen und sozialen Handelns konfrontiert. Diese beziehen sich dabei nicht nur auf die ökologischen und sozialen Auswirkungen der Aktivitäten in der Wertkette innerhalb des Unternehmens, sondern auch auf die Auswirkungen über die Unternehmensgrenzen hinaus – von der Rohstoffentnahme und Materialerzeugung über die Verarbeitung bis hin zur Nutzungs- und Entsorgungsphase des Produkts.

Das Konzept bzw. der Begriff **Wertkette**, in der Literatur auch unter Value Chain bekannt, wurde erstmals im Jahre 1985 von Michael E. Porter eingeführt und soll die Produktionsstufen in einem Unternehmen in geordneter Reihenfolge gemäß der erfolgten Tätigkeiten darstellen. Tätigkeiten werden dadurch charakterisiert, dass sie Ressourcen verbrauchen, in Prozessen miteinander verbunden sind und einen Wert schaffen. Dies umfasst alle im Unternehmen durchgeführten Aktivitäten, vom Entwurf, über die Herstellung und den Vertrieb bis hin zur Auslieferung eines Produktes. (Porter 1986) Durch die Erweiterung der Systemgrenze des Unternehmens um externe Prozesse wird die Wertkette zu einer **Wertschöpfungskette**. Synonym werden auch die Begriffe Lieferkette, Versorgungskette oder Supply Chain verwendet. Die Wertschöpfungskette enthält alle vertikalen Verknüpfungen eines Unternehmens mit den externen Wertketten der Zulieferer und Abnehmer. (Porter 2014; Walther 2010)

Im Vordergrund der Nachhaltigkeitsbetrachtung der Wertschöpfungskette steht aktuell vor allem die vorgelagerte Lieferkette, da der Wertschöpfungsanteil durch Lieferanten stetig wächst (Zimmer 2016). Daher werden vordergründig große fokale Unternehmen mit bekannten und bedeutenden Markennamen als hauptverantwortlich angesehen, die ökologischen und sozialen Bedingungen der Vorkette, durch ihre entsprechende Marktmacht, zu verbessern (Kleindorfer et al. 2005; Dai und Blackhurst 2012; Theißen und Spinler 2014; Zimmer 2016). Krause et al. (2009) leiten entsprechend ab, dass ein Unternehmen nur so nachhaltig wie seine Lieferkette ist. Darüber hinaus hat sich gezeigt, dass die Integration ökologischer und sozialer Aspekte in die unternehmensinterne Organisation, aber auch in die externen Lieferantenabläufe einen wichtigen Faktor darstellt, um langfristig wettbewerbsfähig zu sein (Bai und Sarkis 2010; Dou et al. 2014). So stellt die unternehmerische Nachhaltigkeit in der modernen Produktion eine wichtige strategische Zielgröße dar (Westkämper und Löffler 2016). Unternehmerische Nachhaltigkeit basiert entsprechend der drei Nachhaltigkeitsdimensionen grundsätzlich auf drei Managementbereichen, die umgesetzt und gleichzeitig erfüllt sein müssen (Bansal 2005; Peters 2010; Dyllick und Hockerts 2002):

- der wirtschaftliche Erfolg durch Wertschöpfung,
- das betriebliche Umweltmanagement und
- die soziale Verantwortung (Corporate Social Responsibility).

Die für diese Arbeit relevanten Managementbereiche des Konzepts der Wertschöpfung und des betrieblichen Umweltmanagements werden im Folgenden kurz beschrieben. In der Betriebswirtschaftslehre, vor allem im Kontext des Supply Chain Management, bezieht sich die **Wertschöpfung** auf das die Unternehmen verbindende Wertschöpfungsnetzwerk. Der geschaffene Wert ergibt sich aus der Differenz des Marktwerts des vom Unternehmen hergestellten Produkts, abzüglich der Kosten und der von den Lieferanten beschafften Materialien. (Rutherford 1977) Wertschöpfung stellt somit die Basis der ökonomischen Leistungsfähigkeit und des Unternehmenserfolgs dar (Peters 2010).

Das **Umweltmanagement** ist der strategische Unternehmensbereich, der sich mit den Fragestellungen der Nachhaltigkeit und des Umweltschutzes beschäftigt (Kranert und Cord-Landwehr 2010). Im Wesentlichen wird das Ziel verfolgt, den ökologischen Fußabdruck, der durch Produkte bzw. die Produktionsprozesse verursacht wird, zu verringern (Bansal 2005). Dazu können verschiedene Umweltmanagementsysteme eingeführt werden, die Strategien, Vorgänge und Werkzeuge zur Zielerreichung beinhalten mit denen Umweltwirkungen erfasst, bewertet und gesteuert werden können (Kranert und Cord-Landwehr 2010). Ein unterstützendes Rahmenwerk zur Implementierung von Umweltmanagementsystemen in Unternehmen bietet z.B. die DIN EN ISO 14001:2015 oder EMAS (Eco-Management and Audit Scheme). Damit das Umweltmanagement innerhalb eines Unternehmens nicht isoliert bleibt, sondern effizient und gewinnbringend eingesetzt wird, muss eine Integration über alle Unternehmensbereiche hinweg erfolgen. Diese Aufgabe übernimmt das sogenannte Umwelt- oder Ökocontrolling das in Kapitel 3.2.1 erläutert wird. (Dyck hoff und Souren 2008; Tschandl und Posch 2012)

2.1.4 Systemgrenzen nachhaltiger Wertschöpfungsketten in dieser Arbeit

Nachhaltige Wertschöpfungsketten sind durch die Berücksichtigung des gesamten Produktlebenszyklus gekennzeichnet (Walther 2010). Die traditionellen Aktivitäten einer Wertschöpfungskette wie Beschaffung, Herstellung, Distribution und Nutzung werden daher noch um die Prozesse der Rücknahme und Entsorgung ergänzt (Beamon 1999; Clift 2003; Clift und Wright 2000). Aufgrund der Relevanz des Ressourcen- und Energieverbrauchs entlang der Wertschöpfungskette kann es sinnvoll oder notwendig sein, die Lebenszyklusphasen der Herstellung/Produktion und Entsorgung noch detaillierter zu unterteilen. Dementsprechend wird die Produktionsphase häufig in die Unterprozesse Rohstoffgewinnung, Rohstoffverarbeitung, Bauteilfertigung, Montage und Distribution unterteilt. (Walther 2010) Die Entsorgungsphase kann in einen Redistributions- und einen Behandlungsprozess gegliedert werden (Clift und Wright 2000). Im Vordergrund der Analyse der Wertschöpfungskette stehen in dieser Arbeit gemäß Kapitel 1 die Lebenszyklusphasen Produktion, Nutzung und Endof-Life (EoL) (vgl. Abbildung 2.2). Die Produktionsphase wird im Rahmen dieser Arbeit in die Wertschöpfungsstufen Vorkette (vorgelagerte Produktionsprozesse), Rohstoffverarbeitung/Materialherstellung und Bauteilfertigung untergliedert.



Abbildung 2.2: Relevante Wertschöpfungsstufen in dieser Arbeit zur ökonomischen und ökologischen Planung der Produkt-Wertschöpfungskette

Der Begriff Vorkette umfasst in dieser Arbeit alle stoff- und energieflussrelevanten Prozesse der Rohstoffgewinnung und -aufbereitung sowie des Transports der Rohstoffe bis zum Werkstor des Rohstoffverarbeiters. Rohstoffe werden als aus der Natur gewonnene Grundstoffe betrachtet (z.B. Eisenerz), die entweder sofort verbraucht oder einer industriellen Verarbeitung zugeführt werden. Die Rohstoffverarbeitung/Materialherstellung bezieht sich in dieser Arbeit auf die Herstellungsprozesse der wichtigsten Rohmaterialien bzw. Werkstoffe der deutschen Industrie in Bezug auf die jährlich umgesetzte/verarbeitete Menge und die emittierten THG-Emissionen. Welche Materialien bzw. Werkstoffe dies explizit sind, wird in Kapitel 2.3 hergeleitet. Der Prozess der Rohstoffverarbeitung beinhaltet zudem die Verarbeitungsschritte zu Halbzeugen (unfertige Erzeugnisse/Halbfabrikate) auf Basis von Ur- und Umformverfahren (z.B. Verarbeitung von Rohstahl zu Walzstahl). Die Bauteilfertigung beinhaltet alle Prozesse der Materialverarbeitung vom Halbzeug bis zum Endprodukt, wie z.B. die Herstellung eines Motorgehäuses aus Stahl für einen Pkw durch Umform- und Trennverfahren. In der **Nutzungsphase** werden die durch die Nutzung des fertigen Produktes verursachten THG-Emissionen bewertet. Wird ein Produkt nach dem Durchlaufen der erwähnten Wertschöpfungsstufen der Produktionsphase beispielsweise in einem Kraftfahrzeug eingesetzt, werden die durch das Bauteilgewicht bewirkten THG-Emissionen berechnet. Die Entsorgungsphase wird in dieser Arbeit als **End-of-Life-Phase** bezeichnet. Diese umfasst alle Stoff- und Energieflüsse, die aufgewendet werden müssen, um das Bauteil schließlich wieder in den technischen/industriellen Stoffkreislauf zurückzuführen. Abhängig vom verwendeten Material beinhaltet dies verschiedene Recyclingtechniken oder eine energetische Verwertung.

Durch die detaillierte Betrachtung aller Wertschöpfungsstufen ergibt sich die Wertschöpfungskette entlang des Produktlebenszyklus. Zur Planung und Steuerung dieser Wertschöpfungskette sind auf jeder dieser Wertschöpfungsstufen Planungsmodelle unter Berücksichtigung des gesamten Lebenszyklus zu entwickeln.¹ (Walther 2010)

2.2 Klimawandel und Ziele zur Reduktion der THG-Emissionen

Die Bedeutung der Reduktion von Treibhausgasen zur Bekämpfung des Klimawandels ergibt sich aus dem entstehenden Treibhauseffekt, der an dieser Stelle kurz nach Hertig (2004) und Rahmstorf und Schellnhuber (2007) beschrieben wird. Die Atmosphäre ist ein Gemisch aus Gasen, das hauptsächlich aus Stickstoff (N₂) (78,08 Vol. %), Sauerstoff (O₂) (20,95 Vol. %) und Argon (Ar) (0,93 Vol. %) besteht. Die übrigen Gase werden aufgrund ihrer geringen Konzentration Spurengase genannt und sind teilweise treibhauswirksam. Zu diesen Spurengasen zählen Wasserdampf (H₂O), Kohlendioxid (CO₂), Methan (CH₄), Distickstoffmonoxid (N₂O), Schwefelhexafluorid (SF₆)

¹ Siehe vergleichend die Modellübersicht dieser Arbeit in Kapitel 4.2.

sowie teilhalogenierte Fluorkohlenwasserstoffe (HFC) und perfluorierte Kohlenwasserstoffe (PFC). Diese Spurengase haben auf das einfallende kurzwellige Sonnenlicht nur eine kleine Adsorptionswirkung, sodass mehr als die Hälfte der die Erdatmosphäre erreichenden Sonnenstrahlung den Erdboden erreicht. Dass dieser Anteil nicht größer ist, liegt an der Reflexion der Strahlung an der Erdoberfläche, an Wolken und anderer kleiner Schwebeteilchen (Aerosolen) in der Atmosphäre. Sind die Spurengase für das einfallende kurzwellige Sonnenlicht also nahezu vollständig transparent, so haben sie im langwelligen Spektralbereich jedoch das Vermögen, die einfallende Strahlungsenergie der ausgehenden Erdstrahlung in deutlichem größerem Umfang aufzunehmen. Die Spurengase erwärmen sich und geben entsprechend ihrer Temperatur und Konzentration wieder Strahlung ab. Diese Strahlung ist etwa zur Hälfte Richtung Erdoberfläche gerichtet, wodurch tiefere Luftschichten erwärmt werden. Die mittlere Temperatur des Gesamtsystems Erdoberfläche wird dadurch um circa 30 K (Grad Kelvin) heraufgesetzt. Dieser Effekt wird als natürlicher Treibhauseffekt bezeichnet.

Der natürliche Treibhauseffekt wird seit einigen Dekaden durch menschliche Aktivitäten verstärkt, indem Spurengase auf nicht natürlichem Weg bspw. durch die Verbrennung fossiler Energieträger in die Atmosphäre gelangen, wodurch die Konzentrationen der Spurengase in der Atmosphäre beeinflusst werden (anthropogener Treibhauseffekt). Jedoch stellen manche Skeptiker, darunter auch Klimawissenschaftler, den Einfluss des anthropogenen Anteils eines Gases und auch den Einfluss des Treibhauseffekts infrage, wodurch der anthropogene Beitrag zur Erderwärmung weiter umstritten ist. (Raschke 2008; Hertig 2004) Allerdings wurde mehrfach belegt, dass die Konzentration der Treibhausgase seit Beginn der Industrialisierung deutlich gestiegen sind (IPCC 2001; Hertig 2004). Darüber hinaus wird der Mensch vom Großteil der Wissenschaftler und allen offiziellen Institutionen, wie z.B. der deutschen Bundesregierung, der Europäischen Union und der Vereinten Nationen als (Mit-)Verursacher des Klimawandels anerkannt (Verband der Wirtschaft für Emissionshandel und Klimaschutz e.V. - Co2ncept plus 2012).

Zur weiteren Klärung der Debatte um den Klimawandel und seiner möglichen Folgen wurde 1988 das IPCC (Intergovernmental Panel on Climate Change) als unabhängige und offizielle Institution von der World Meteorological Organization (WMO) und dem United Nations Environment Programme (UNEP) gegründet, um politische Entscheidungsträger zu beraten (IPCC 2010). Seither wertet dieser zwischenstaatliche Ausschuss den aktuellen Stand der Forschung zum Klimawandel aus und stellt sogenannte Sachstandsberichte zusammen. Im aktuellsten fünften Sachstandsbericht aus dem Jahr 2013 wird es als äußerst wahrscheinlich eingestuft, dass die Erderwärmung größtenteils auf die Zunahme der vom Menschen emittierten Treibhause zurückgeht. "Äußerst wahrscheinlich" definiert darin eine Wahrscheinlichkeit, die über 95 % liegt. (IPCC 2013; Raschke 2008) Zudem wird die Erderwärmung weiter zunehmen, das heißt bis zum Ende des 21. Jahrhunderts wird die durchschnittliche Temperatur gegenüber vorindustriellen Bedingungen um bis zu 5,4 °C steigen. Als evidente Folgen des Klimawandels wird das Tauen der Gletscher, das Abschmelzen der Eisschilde, die Erwärmung des Ozeans und der Anstieg des Meeresspiegels sowie die Häufung von Extremwetterereignissen wie heftige Stürme und Dürren aufgeführt. Unter der Voraussetzung einer sehr ambitionierten Klimapolitik ließe sich der Temperaturanstieg auf 0,9 bis 2,3 °C reduzieren. (IPCC 2013)

Auf der Klimakonferenz der Vereinten Nationen in Cancún 2010 wurde der Handlungsbedarf zur Vermeidung eines fortschreitenden Klimawandels erkannt und ein Zwei-Grad-Ziel vereinbart, dem sich 194 Staaten verschrieben. In die Politik ist das Zwei-Grad-Ziel erstmals durch den Wissenschaftlichen Beirat der Deutschen Bundesregierung für Globale Umweltveränderungen (WBGU) eingeflossen. Diese Grenze wurde vom WBGU 1995 in einem Gutachten befürwortet und dann zum Ziel der europäischen Klimaschutzpolitik gemacht. (Jaeger und Jaeger 2010) Erstmals wurde dieser Wert bereits 1975 und 1977 vom Ökonomen William D. Nordhaus geprägt, der argumentiert, dass die Begrenzung einer globalen Erwärmung auf der natürlichen Schwankung des Klimas basieren solle. Bei einer Erwärmung um mehr als 2 °C würde ein Zustand erreicht werden, wie es ihn seit mehreren hunderttausend Jahren nicht gegeben habe. (Nordhaus 1977)

Einige Klimaforscher weisen darauf hin, dass 2 °C nur die Grenze zwischen "gefährlichem" und "sehr gefährlichem" Klimawandel darstellt und nicht zwischen "tolerablem" und "gefährlichem". (Anderson und Bows 2011) Dies wurde im Sonderbericht des IPCC zur Umsetzung eines 1,5-Grad-Zieles bestätigt, der im Rahmen der 48. Sitzung im Oktober 2018 in Incheon (Südkorea) angefertigt wurde. Der Meeresspiegel würde beispielsweise bis zum Jahr 2100 bei 1,5 °C um 0,1 Meter weniger ansteigen als bei 2°C (IPCC 2018), und die Wahrscheinlichkeit einer sommerlichen Eisfreiheit im Jahr 2100 würde von 100 % auf 30 % sinken (Jahn 2018). Allerdings kann das 1,5-Grad-Ziel nur noch erreicht werden, wenn "schnelle, weitreichende und beispiellose Veränderungen in allen Bereichen der Gesellschaft" vorgenommen werden (IPCC 2018). Allerdings liegt die globale Durchschnittstemperatur bereits 0,8 °C über dem Wert vor dem Industriezeitalter, und es muss zudem davon ausgegangen werden, dass eine weitere Erwärmung um 0,5°C bereits durch die Langlebigkeit der bisher emittierten Treibhausgase und der Trägheit der Ozeane bereits im System steckt und nicht mehr vermieden werden kann (WBGU 2009). Es sind also tiefgreifende Emissionsreduzierungen in den Bereichen Energie, Landnutzung, Stadt, Infrastruktur (Transport und Gebäude) und Industrie erforderlich (IPCC 2018).

Die EU setzt sich basierend auf den Szenariorechnungen aus dem vierten Sachstandsbericht des IPCC (Gupta et al. 2007) das Ziel, im Jahr 2050 zwischen 80-95 % weniger Treibhausgase in den Industrieländern zu emittieren als im Jahr 1990, das für die Ziele als Basisjahr herangezogen wird. Als ein Meilenstein soll dazu im Jahr 2030 eine 55 % Reduktion erreicht werden (Europäische Kommission 2020). Deutschland setzt sich das noch ambitioniertere Ziel, 40 % der Emissionen bereits schon im Jahr 2020 einzusparen. Ab 2030 sollen es ebenfalls 55 % sein; ab 2040 70 % und für 2050 werden in Deutschland die gleichen Ziele wie auf EU Ebene angestrebt. (BMUB 2016) Diese Minderungsziele der Treibhausgasemissionen sowie die emittierten Treibhausgase sind in Abbildung 2.3 vergleichend dargestellt.



Abbildung 2.3: In Deutschland emittierte direkt wirkende Treibhausgase (UBA 2018a) und Minderungsziele der EU und Deutschlands (in Anlehnung an Breun 2016)

Abbildung 2.3 veranschaulicht zudem, dass die CO_2 -Emissionen kontinuierlich den größten Anteil der Treibhausgasemissionen ausmachen. Im Jahr 2016 waren dies 88,2 %. Die CH₄-Emissionen kommen auf 6,0 %, die N₂O-Emissionen auf 4,2 % und die restlichen Treibhausgase machen einen Anteil von 1,6 % aus. (UBA 2018a)

Eine wichtige Rolle beim Vergleich der Treibhausgase bezüglich ihres Treibhauspotenzials (engl. Global Warming Potential - GWP) spielt das Absorptionsvermögen und die Verweilzeit eines Gases in der Atmosphäre, weshalb das Treibhauspotenzial auf einen vordefinierten Zeitraum bezogen wird (Raschke 2008). Um die Emissionsmengen verschiedener Treibhausgase miteinander vergleichen zu können, werden diese in CO₂-Äquivalenten (CO₂e) angeben. Beim Treibhauspotenzial handelt es sich also um die Menge an CO₂e Emissionen für eine festgelegte Menge einer anderen chemischen Verbindung über einen festgelegten Zeithorizont von 20, 100 oder 500 Jahren. (Klöpffer und Wagner 2007) Im Kyoto-Protokoll aus dem Jahr 1997 (vgl. Kapitel 2.1.1) wurde das GWP über einen Zeitraum von 100 Jahren als die maßgebende Kennzahl festgelegt (IPCC 2013). Die Treibhauspotenziale der relevanten, im Kyoto-Protokoll genannten Gase bezogen auf einen Zeitraum von 100 Jahren können Tabelle 2.1 entnommen werden. Die Werte stammen größtenteils aus der Ecoinvent-Datenbank (Ecoinvent V2.2 2007-2013).

Es ist ersichtlich, dass CO_2 zwar das geringste Treibhauspotenzial aufweist, jedoch übersteigt die emittierte Menge die anderen Gase bei weitem, was zu den in CO_2 e gemessenen Anteilen in Abbildung 2.3 führt.

Treibhausgas	Treibhauspotenzial [kgCO ₂ e/kg]
CO ₂	1 ¹
CH ₄	25 ¹
N ₂ O	298 ¹
HFC, PFC	1.000 - 10.000 ²
SF ₆	22.800 ¹

¹ nach Ecoinvent-Datenbank

² nach (Schwarz und Leisewitz 2000)

Die Einhaltung der klimapolitischen Ziele hängt also maßgeblich von den anthropogenen CO_2e -Emissionen ab. CO_2 entsteht vor allem bei Verbrennungsprozessen durch die Reaktion von kohlenstoffhaltigen Stoffen mit Sauerstoff wie bei der Verbrennung von Holz, Kohle, Öl oder Gas und folgt der vereinfachten Reaktionsgleichung gemäß Formel (2.1) (Ilsen 2012). n und m bezeichnen jeweils Reaktionsstöchiometriezahlen, die so gewählt werden müssen, dass die Stoffmengen-Verhältnisse der Reaktionspartner auf beiden Seiten der Reaktionsgleichung identisch sind (vgl. Kullbach 1980).

$$C_n H_m + \left(n + \frac{m}{4}\right) O_2 \to n C O_2 + \frac{m}{2} H_2 O$$
 (2.1)

Durch Verbrennung wird die zuvor im Brennstoff gebundene Energie in Wärme, kinetische Energie oder Elektrizität umgewandelt und je nach benötigter Form in der Energiewirtschaft, in Haushalten, der Industrie oder im Verkehr eingesetzt.

2.3 Treiber industrieller THG-Emissionen

Die im Fokus dieser Arbeit stehenden Sektoren Gewerbe (5 %), Industrie (21 %) und Verkehr (18 %) verursachen zusammen etwa die Hälfte der gesamten deutschen THG-Emissionen (44 %) (vgl. Abbildung 2.4).

In Deutschland entstehen im industriellen Sektor über die Hälfte der THG-Emissionen (53 %) in der Metallerzeugung und -verarbeitung (28 %) und der Erdöl- und Chemieindustrie (25 %) (vgl. Abbildung 2.4). Weitere 23 % werden in den Bereichen Glas, Glaswaren, Keramik sowie verarbeitete Steine und Erden emittiert. Die übrigen 24 % der Emissionen teilen sich auf sonstige Sektoren auf. (Statistisches Bundesamt 2018b) Die metall- und chemieintensiven Branchen sind auch gleichzeitig die umsatzstärksten Branchen in Deutschland und generierten im Jahr 2017 zusammen einen Umsatzanteil von 59 %, der sich auf den Kraftfahrzeugbau (23 %), den Maschinenbau (13 %), die chemisch-pharmazeutische Industrie (10 %), die Metallerzeugung und -verarbeitung (6 %) und die Mineralöl- und Kunststoffindustrie (7 %) aufteilt (Statistisches Bundesamt und VCI 2019).



Abbildung 2.4: Aufteilung der 2016 emittierten Treibhausgase in Deutschland nach Sektoren (in Anlehnung an UBA 2018a; Breun 2016; Statistisches Bundesamt 2018b)

Der umsatzstarke Kraftfahrzeugbau (23 %) stellt eine Branche dar, die aufgrund ihrer Komplexität durch die Vielzahl an Produktkomponenten für Pkw und Lkw und zahlreichen Zulieferer entlang der Wertschöpfungskette all diese treibhausgasintensiven Sektoren umfasst. Ein Pkw besteht aus etwa 10.000 Einzelteilen aus über 40 verschiedenen Werkstoffen (Gruden 2008). Die relevantesten Werkstoffe/Materialien dieser Pkw-Bauteile lassen sich durch die Berechnung der gewichtsbezogenen Anteile der verwendeten Materialien identifizieren. Abbildung 2.5 fasst entsprechend die meistverwendeten Materialien eines Pkws mit Standardausstattung aus dem Jahr 2015 zusammen. Die drei Materialien mit den größten Anteilen sind Eisen und Stahl mit 64 % (blau markiert), Aluminium mit 11 % (hellgrün markiert) und Kunststoffe² mit 9 % (grün markiert).

² Polymere sind die Hauptkomponente bei der Herstellung von Kunststoffen.





Die Betrachtung der CO₂-Emissionen entlang des Produktlebenszyklus eines Pkws mit Verbrennungsmotor zeigt, dass aktuell allerdings ca. 80 % der CO₂-Emissionen in der Nutzungsphase emittiert werden (vgl. Abbildung 2.6).³ Daran wird deutlich, dass der Fahrzeugbau nicht nur erheblich mit den industriellen THG-Emissionen der Materialherstellung in Verbindung steht, sondern auch immens zu den verkehrsbedingten THG-Emissionen beiträgt, die 18 % der gesamten THG-Emissionen Deutschlands ausmachen (vgl. Abbildung 2.5).

³ Diese Rechnung bezieht sich auf Fahrzeuge die durch Verbrennungsmotoren angetrieben werden und beinhaltet auch die für die Kraftstoffbereitstellung verursachten Emissionen. Der Anteil der Nutzungsphase an den gesamten CO₂-Emissionen ist vor allem von der Laufleistung eines Fahrzeugs und den zugrunde gelegten CO₂-Emissionen pro km abhängig. In der Literatur werden für die Nutzungsphase meistens Szenarien zwischen 150.000 und 250.000 km Laufleistung mit Abgasemissionen zwischen 95 und 209 gCO₂/km berechnet (95 gCO₂/km ist dabei das tank-to-wheel-Ziel der EU bis 2020 für neue Pkw). Je nach Szenario schwankt der Anteil der Nutzungsphase zwischen 76 % und 85 %.



1) 240.000 km 2) inkl. Kraftstoffbereitstellung 3) Strom aus erneuerbaren Quellen

Die Herstellungsphase eines Fahrzeugs mit Verbrennungsmotor macht ca. 18 %⁴ des Carbon Footprints eines Pkws aus, wovon ca. 16 % auf die Wertschöpfungstätigkeiten in der Lieferkette und ca. 2 % auf den Automobilhersteller entfallen (vgl. Abbildung 2.6). (Bauer et al. 2015; Umweltbundesamt Österreich 2016a; BMU 2019b; VCÖ-Mobilität mit Zukunft 2019; Bratzel 2013) Der große Anteil der Nutzungsphase an den Lebenszyklusemissionen eines Fahrzeugs (ca. 80 %) zeigt die Wichtigkeit der Implementierung von Maßnahmen hinsichtlich der Einsparung von CO₂-Emissionen im Fahrbetrieb, beispielsweise im Rahmen der EU-Verordnung zum Einhalten herstellerspezifischer Grenzwerte. So müssen die jährlich verkauften Fahrzeuge eines Herstellers im Durchschnitt unter dem spezifischen Grenzwert bleiben, sonst drohen seit 2019 Geldstrafen in Höhe von 95 €/g pro Fahrzeug. Seit 2012 gilt ein Grenzwert von 130 g/km; ab 2020 sind es 95 g/km. (EU 2009) Um diese Grenzwerte einzuhalten, müssen die Fahrzeughersteller zwangsläufig verstärkt auf Hybrid- und Elektrofahrzeuge (BEV - battery electric vehicle) setzen. Allein durch eine Hybridisierung des Antriebsstrangs kann die Kraftstoffeffizienz im Vergleich zu einem reinen Verbrennungsmotor um 30 % gesteigert werden. In Kombination mit einem noch stärkeren Einsatz

Abbildung 2.6: CO₂-Emissionen entlang des Lebenszyklus eines Pkws (Datengrundlage Bauer et al. 2015)

⁴ Die Angaben variieren zwischen 10-20 %.

von Leichtbaukomponenten können sogar bis zu 44 % erreicht werden. Bei Plug-in-Hybriden⁵ sind sogar 65-80 % realistisch. (McKinsey 2009)

Entsprechend wird es aufgrund des angestrebten und kontinuierlich vorangetriebenen Wechsels der Antriebstechnologie vom Verbrennungsmotor zum Elektromotor eine Verschiebung der CO₂-Emissionen im Produktlebenszyklus geben. So wird sich der Anteil aus der Herstellungsphase im Jahr 2030 zunächst auf ca. 30 % erhöhen (Bauer et al. 2015) und mit zunehmendem Einsatz erneuerbarer Quellen zur Stromgewinnung wird der Anteil auf bis zu 60-70 % ansteigen (VCÖ-Mobilität mit Zukunft 2019; BMU 2019b; Bauer et al. 2015). In machen Szenarien sind sogar 80 % möglich (Bauer et al. 2015; VCÖ-Mobilität mit Zukunft 2019; BMU 2019b).

Dieses Beispiel aus der Automobilindustrie belegt die stetig bedeutsamer werdende Rolle des industriellen Sektors, um die anvisierten Klimaziele noch erreichen zu können. Die THG-Effizienz in der Metallerzeugung und verarbeitung sowie der Erdöl- und Chemieindustrie sollte also im Fokus stehen, um die THG-Emissionen in Wertschöpfungsnetzwerken reduzieren zu können (vgl. Abbildung 2.4). In einem weiteren Schritt muss daher ermittelt werden, welche Metalle oder chemischen Produkte bzw. welche Materialherstellungsprozesse die CO₂-Treiber in den jeweiligen Wertketten darstellen. Kapitel 2.4 befasst sich daher mit den Produktionstechniken der Metallindustrie und Kapitel 2.5 mit den Techniken der Chemieindustrie.

⁵ Hybridfahrzeug dessen Akkumulator sowohl über den Verbrennungsmotor als auch über das Stromnetz geladen werden kann (PHEV - plug-in hybrid vehicle). Andere Arten von Hybridfahrzeugen werden nur durch Verbrennungsmotoren oder Rekuperation aufgeladen (HEV hybrid electric vehicle).

2.4 Produktionstechniken und THG-Emissionen der Metallindustrie

Die THG-Emissionen des industriellen Sektors in Deutschland stammen überwiegend aus der Metall- und Chemieindustrie (zusammen 53 %) (vgl. Kapitel 2.3). Im Folgenden werden diese beiden Industriezweige und die dort eingesetzten Produktionstechniken ausführlicher vorgestellt. Dieses Kapitel widmet sich der Metallindustrie, identifiziert treibhausgasrelevante Metalle auf nationaler und internationaler Ebene und beleuchtet diese hinsichtlich ihrer Produktionsverfahren und resultierender THG-Emissionen.

2.4.1 THG-Emissionen der Metallindustrie

Aus Kapitel 2.3 ist bekannt, das Metalle und Metallerzeugnisse 28 % der industriebedingten THG-Emissionen in Deutschland ausmachen. Der Sammelbegriff Metalle umfasst gemäß der umweltökonomischen Gesamtrechnung des Statistischen Bundesamtes, neben Roheisen und Stahl auch Nicht-Eisen-Metalle (NE-Metalle) und Halbzeuge daraus. Abbildung 2.7 stellt die Produktionsmengen der meist produzierten Metalle dar und veranschaulicht, dass die Rohstahlproduktion in den vergangenen Jahren mit einem nahezu unveränderten Anteil von 95 % den mengenmäßig größten Teil der Metallproduktion in Deutschland ausmacht. Die Produktionsmengen der NE-Metalle (z.B. Aluminium, Kupfer, Blei, Zink sowie restliche NE-Metalle) sind signifikant geringer als die Produktionsmengen von Stahl.



2 Rahmenbedingungen und Anforderungen an eine Bewertung industrieller THG-Emissionen



Um den Anteil der verschiedenen Metalle an den THG-Emissionen der Branche einschätzen zu können, müssen die Produktionsmengen noch mit den spezifischen Treibhausgaspotenzialen jedes Metalls multipliziert werden. Abbildung 2.8 zeigt die so berechneten Anteile ausgewählter Metalle an den gesamten THG der Metallindustrie für das Jahr 2014 in Deutschland und weltweit.

⁶ Anmerkung Produktionsrückgang 2009: In Kapitel 2.1 wurde bereits aufgezeigt, dass die metall- und chemieintensiven Branchen (z.B. Fahrzeug-, Maschinenbau und Bauwesen) die umsatzstärksten Branchen in Deutschland sind und diese aufgrund ihrer immensen Nachfrage nach Werkstoffen einen großen Einfluss auf vorgelagerte Produktionsketten, wie auf die Stahlerzeugung haben. Nachfrageänderungen nach industriellen Endprodukten führen somit zu einer Änderung der Nachfrage nach Metallen und Chemikalien (Commerzbank 2014). Abbildung 2.7 verdeutlicht diesen Zusammenhang durch den signifikanten Produktionsrückgang im Jahr 2009 aufgrund der Wirtschaftskrise.


Abbildung 2.8: Anteil ausgewählter Metalle an den THG-Emissionen der gesamten Metallherstellung in Deutschland und weltweit ⁷

Die deutsche Metallerzeugung hat im Jahr 2014 ungefähr 67,4 Mio. t CO₂e direkt und indirekt verursacht.⁸ Davon entfallen ca. 82 % auf die Stahlindustrie und ca. 10 % auf die Aluminiumindustrie. Weitere NE-Metalle wie Kupfer,

⁷ Eigene Berechnung auf Basis folgender Datengrundlage: Für Deutschland wurden die Produktionszahlen nach U.S. Geological Survey (2017) und Stahl-Zentrum (2016) verwendet, für den weltweiten Vergleich die Produktionszahlen nach World Steel Association (2018), GDA (2018), U.S. Geological Survey (2015a), U.S. Geological Survey (2015b), U.S. Geological Survey (2016). Für die Treibhauspotenziale (GWP100) der Metalle wurden europäische Daten von Ecoinvent v.2.2 herangezogen und damit ein produktionsmixspezifischer Wert berechnet. Weitere Informationen zur Berechnung siehe Anhang Tabelle A.1.

⁸ Eigene Berechnung gemäß Daten aus U.S. Geological Survey 2017) und Ecoinvent V.2.2 siehe Anhang Tabelle A.2. Zu unterscheiden vom Wert des Statistischen Bundesamtes, das für 2014 in den Publikationen der Umweltökonomischen Gesamtrechnung Teil 3 Anthropogene Luftemissionen 50,7 Mio. t CO₂e ausgibt (Metalle und Kokserzeugnisse). Die Differenz kommt dadurch zustande, dass die Ecoinvent Datensätze zusätzlich die THG-Emissionen von Vorketten sowie indirekte Emissionen enthalten.

Blei und Zink haben nur einen sehr geringen Anteil an den gesamten THG-Emissionen. Verglichen mit den Produktionsmengen fällt jedoch auf, dass der Anteil der NE-Metalle an den THG-Emissionen größer ist als an den Produktionsmengen (vgl. Abbildung 2.7 und Abbildung 2.8). Dies liegt darin begründet, dass beispielsweise die Aluminiumindustrie aufgrund des besonders hohen Stromverbrauchs vor allem indirekte Emissionen bei der Stromerzeugung verursacht (World Aluminium 2013).

Auch ein weltweiter Vergleich bestätigt, dass die Erzeugung von Stahl (ca. 72 %) und Aluminium (ca. 21 %) den Großteil der gesamten THG-Emissionen in der Metallerzeugung ausmachen (vgl. Abbildung 2.8). Es kann darüber hinaus festgestellt werden, dass die Aluminiumherstellung weltweit einen größeren THG-Treiber darstellt als in Deutschland (ca. 10 % vs. ca. 21 %). 7um einen sind diese Unterschiede auf den Produktionsmix zurückzuführen. In Deutschland wird mehr Recyclingaluminium hergestellt als im internationalen Vergleich und Recyclingaluminium weist ein deutlich niedrigeres Treibhauspotenzial (GWP100: 0,42 kgCO₂e/kg) auf als Hüttenaluminium (GWP100: 12,04 kgCO₂e/kg) (GDA 2018; Ecoinvent V2.2 2007-2013). Zudem wird in Deutschland gleichfalls auch mehr Stahl recycelt, wodurch der Produktionsmix auch in diesem Fall zu einem geringen Treibhauspotenzial führt. Recyclingstahl aus sogenannten Elektrolichtbogenöfen (GWP100: 0,43 kgCO₂e/kg) hat in Deutschland einen Anteil von ca. 30 % (Stahl-Zentrum 2016) (vgl. Kapitel 2.4.2); der Anteil von Stahl über die Hochofenroute (GWP100: 1,66 kgCO₂e/kg) beträgt dementsprechend 70 % (Ecoinvent V2.2 2007-2013). Weltweit ist das Verhältnis 26 % zu 74 %. Zum anderen ist der Aluminiumanteil an der weltweiten Produktionsmenge aller Metalle größer als in Deutschland. Kombiniert mit dem deutlich höheren Treibhauspotenzial der Aluminiumherstellung führt dies ebenso dazu, dass Aluminium weltweit einen größeren THG-Treiber darstellt als in Deutschland.

Es lässt sich zusammenfassen, dass allein die Stahl- und Aluminiumherstellung ca. 92 % aller THG-Emissionen der Metallerzeugung verursachen. Aus diesem Grund werden diese Metalle bzw. deren Erzeugung in den folgenden Unterkapiteln näher erläutert und zählen zu den Materialien, die im Entscheidungsunterstützungssystem (vgl. Kapitel 4.2 und Kapitel 5.1) modelliert werden.

2.4.2 Eisen- und Stahlerzeugung

In Deutschland wurden im Jahr 2017 43,3 Mio. t Rohstahl hergestellt. Davon wurden 40,7 Mio. t zu Walzerzeugnissen verarbeitet, die als Halbzeuge in nachgelagerten Wertschöpfungsketten, z.B. im Fahrzeug-, Maschinenbau oder im Baugewerbe, eingesetzt oder weiterverarbeitet werden (siehe Verarbeitungsverfahren Kapitel 2.6). 12,8 Mio. t dieser Halbzeuge sind Langerzeugnisse wie z.B. Drähte oder Stabstähle (Weck und Brecher 2005) und 24,7 Mio. t sind Flacherzeugnisse, z.B. Band oder Bleche (Stahl-Zentrum 2013). (Stahl-Zentrum 2016)

Bei der Stahlerzeugung wird im Wesentlichen zwischen zwei Verfahrensrouten unterschieden: Der Hochofen- bzw. Primärroute (Oxygenstahl) und der Elektrostahl- bzw. Sekundärroute, bei der Stahlschrott recycelt wird. (Buttermann und Hillebrand 2005) Im Jahr 2017 wurden deutschlandweit 13 Mio. t Elektrostahl (30 %) und 30,3 Mio. t Oxygenstahl (70 %) produziert. Auf andere Verfahren der Stahlerzeugung wie die Direktreduktion oder die Schmelzreduktion wird im Folgenden kein Bezug genommen, da die Direktreduktion nur in einem Werk und die Schmelzreduktion nicht in Europa praktiziert wird (Breun 2016; European Commission 2013; Gerspacher et al. 2011).

2.4.2.1 Eisen- und Stahlproduktion über die Hochofenroute

Die Erläuterung der Prozessschritte zur Primärstahlerzeugung in einem integrierten Hüttenwerk folgt Breun (2016), Bartusch et al. (2013), European Commission (2013) und Rentz et al. (2006; 1997). Die Herstellung von Walzstahl erfolgt durch fünf wesentliche Prozessschritte (ps_x) bzw. Anlagentypen ps₁ bis ps₅ (vgl. Abbildung 2.9). Abbildung 2.9 zeigt die aggregierten Stoffund Energieflüsse zwischen den Anlagen eines integrierten Hüttenwerks. Die zentrale Anlage der Primärstahlerzeugung ist der Hochofen (ps₃), in dem aus oxydischen Eisenträgern unter Zufuhr von Koks als Reduktionsmittel, Roheisen erzeugt wird. Als Nebenprodukt entsteht dabei Eisenhüttenschlacke, die in verschiedenen industriellen Bereichen, wie z.B. der Zementindustrie als Zuschlagstoff genutzt wird (Huang et al. 2016; Siddique 2014). Als Eisenträger werden in der Regel Erze eingesetzt, die zuvor in der Sinteranlage (ps₂) durch das Stückigmachen der Feinanteile vorbereitet werden. Koks, der zweite wichtige Inputstoff des Hochofens, wird in der Kokerei (ps₁) erzeugt, in dem Kohle unter Sauerstoffausschluss erhitzt wird. Koks wird über die Funktion als Reduktionsmittel im Hochofen hinaus zudem als Brennstoff in der Sinteranlage eingesetzt. Im Konverter (ps₄) werden Kohlenstoff und andere unerwünschte Begleitstoffe aus dem Roheisen unter Einblasen von Sauerstoff oxidiert wodurch schließlich Rohstahl, mit einem Kohlenstoffgehalt von weniger als 1 % entsteht (Worrell et al. 2009). Der flüssige Rohstahl wird in nachfolgenden sekundärmetallurgischen Prozessen in Pfannenöfen je nach Kundenwunsch und Werkstoffspezifikation (z.B. Automobilindustrie) veredelt und zu Blöcken (Blockguss) oder Strängen (Strangießanlange) gegossen. Diese können im Walzwerk (ps₅) zu Halbzeugen (i.d.R. Endprodukt eines Stahlwerks) weiterverarbeitet werden, wobei über formgebende Verfahren hinaus auch die Materialeigenschaften durch Beschichten oder Beizen beeinflusst werden können.



Abbildung 2.9: Stoff- und Energieflüsse zwischen den Produktionsanlagen eines integrierten Hüttenwerks (in Anlehnung an Schiessl et al. 2020)

In den Anlagen Kokerei, Hochofen und Konverter entstehen als Nebenprodukte Prozess- bzw. Kuppelgase (Kokereigas, Gichtgas (Hochofengas), Konvertergas), die sich abhängig vom Anlagentyp hinsichtlich ihrer stofflichen Zusammensetzung und ihres Energiegehalts unterscheiden. In einem integrierten Hüttenwerk werden diese Gase zur Energiebereitstellung verwendet und können mehr als 60 % des gesamten Energiebedarfs eines Stahlwerks decken (World Steel Association 2019a). Der spezifische Energieverbrauch des gesamten Prozesses zur Erzeugung einer Tonne Rohstahl liegt zwischen 15-18 [GJ/t]. Zur Erreichung einer hohen Energieeffizienz, bzw. einem niedrigen spezifischen Energieverbrauch, ist dabei darauf zu achten, dass ein Brenngas in der Anlage einsetzt wird, für die es am besten geeignet ist (vgl. Best Available Techniques (BAT) Dokument in European Commission (2013)). Im Hinblick auf die Energieeffizienz eines Stahlwerks kann zudem ein werkseigenes Kraftwerk (ps₆) einen großen Beitrag leisten, da es überschüssige Prozessgase, die nicht im Stahlerzeugungsprozess genutzt werden können, zur Stromerzeugung einsetzt. Die Rohstahlproduktion in integrierten Hüttenwerken weist aufgrund der hohen Interdependenz der Stoff- und Energieflüsse zwischen den Anlagen (vgl. Abbildung 2.9) im Vergleich zu anderen Stahlerzeugungsprozessen die höchste Komplexität auf (European Commission 2013).

2.4.2.2 Stahlproduktion über die Elektrostahlroute

Die Elektrostahlroute benötigt deutlich weniger Anlagen als die Hochofenroute. Im Wesentlichen wird der Prozess nur durch zwei Anlagentypen (Prozessschritte ps_x) charakterisiert: den Elektrolichtbogenofen (ps₁) (engl. Electric Arc Furnace - EAF) und das Walzwerk (ps₂). Die Beschreibung des Herstellungsverfahrens folgt Breun (2016), Ilsen (2012), European Commission (2013) und Stahlinstitut VDEh (2019). Als Rohstoff für den Elektrolichtbogenofen wird hauptsächlich eisenhaltiger Schrott eingesetzt. Dies umfasst zum einen Stahlprodukte die am Ende des Produktlebenszyklus für das Stahlrecycling zurückgeführt werden und zum anderen Neuschrotte, die beim Stahlwerk selbst anfallen, wie z.B. beim Gießen oder Walzen.⁹ Als Alternative zu Schrott kann auch direkt reduziertes Eisen (engl. direct reduced

⁹ Schrotte beim Gießen: Beim Gießen des Stahls aus den Pfannen in die Coquillen bleiben teils kleine Stahlreste in den Pfannen, teils reicht die Menge nicht mehr aus, um eine Coquille zu füllen (Restblöcke). Schrotte beim Walzen: Das Walzen selbst verursacht kleine Stahlabfälle, die Walzschlacken genannt werden. Zudem fallen Stahlreste beim Sägen von Blöcken (Enden genannt) an, da die Blöcke auf eine bestimmte Größe geschnitten werden müssen. (Wagner 1912)

iron- DRI) als Einsatzstoff verwendet werden. Je nach Qualität des Schrotts bzw. des Einsatzstoffs, kann grundsätzlich jede Stahlsorte erzeugt werden, die auch über die Primärstahlroute erzeugt wird.

Nachdem die Schrotte in den Ofen verfüllt wurden, wird der Ofen geschlossen und Graphitelektroden werden in den Schrott abgesenkt. Daraufhin wird der Lichtbogen gezündet, der Temperaturen bis zu 3500°C erreicht und die notwendige Wärme zum Schmelzen des Schrottes liefert. Zur Beschleunigung des Schmelzprozesses werden häufig zusätzlich Sauerstoff oder andere Brennstoff-Gasgemische in den Ofen eingeblasen. Zur Veredelung des Stahls bzw. um die Eigenschaften des Stahls zu beeinflussen, folgen, analog zur Primärroute, sekundärmetallurgische Schritte, wie z.B. das Legieren. Ebenso schließt sich das Gießen (bspw. Stranggussanlage) und daraufhin das Walzen im Walzwerk (ps₂) an. Der spezifische Energieverbrauch zur Herstellung einer Tonne Rohstahl ist mit 1,8-2,4 [GJ/t] im Vergleich zum integrierten Hüttenwerk deutlich geringer, da keine Reduktion von oxydischen Eisenträgern durchgeführt werden muss.

2.4.3 Aluminiumherstellung

Im Jahr 2018 wurden in Deutschland 2,46 Mio. t Halbzeuge aus Aluminium, unter die Strangpressprodukte, Walzprodukte, Drähte und Schmiedeteile fallen, sowie 1,02 Mio. t Aluminiumformguss hergestellt. Die Hauptanwendungsgebiete von Aluminium sind zu 48 % im Fahrzeugbau, zu 15 % im Bauwesen und zu 10 % in der Verpackungsindustrie. (WVMetalle 2018) Analog zur Stahlindustrie lassen sich auch für die Aluminiumindustrie im Wesentlichen zwei Verfahren unterscheiden, eine Primärroute (Aluminium aus Erz) und eine Sekundärroute (recyceltes Aluminium) (Breun 2016). In 2018 wurden in Deutschland mittels dieser Herstellungsverfahren 0,53 Mio. t. Aluminium aus Erz (41 %) sowie 0,76 Mio. t recyceltes Aluminium (59 %) produziert (WVMetalle 2018).

2.4.3.1 Produktion von Primäraluminium

Die Herstellung von Primäraluminium basiert auf fünf wesentlichen Prozessschritten (ps_x), die an dieser Stelle kurz nach Breun (2016), Dienhart (2003), European Commission (2017a), Luo und Soria (2008) und Quinkertz (2002) erläutert werden. Im ersten Schritt wird mittels des Bayer-Verfahrens (ps₁) aus dem Rohstoff Bauxit Aluminiumoxid extrahiert, das auch als Tonerde bezeichnet wird. Für die Herstellung einer Tonne Aluminiumoxid werden zwei bis drei Tonnen Bauxit benötigt (European Commission 2017a). Im Bayer-Verfahren wird das Bauxit mithilfe von Natronlauge unter hohem Druck und erhöhten Temperaturen aufgeschlossen wodurch Aluminiumhydroxid entsteht, das in einer nachgeschalteten Kalzination zu Aluminiumoxid umgewandelt wird.

Das Aluminiumoxid wird anschließend elektrolytischen Zellen zugeführt, in denen es nach dem Hall-Héroult-Prozess (ps₃) bei ca. 960 °C in einem Schmelzbad aus Kryolith gelöst wird, das als Elektrolyt dient. Für diese sogenannte Schmelzflusselektrolyse (ps3) werden Anoden benötigt, die in der Regel in einem separaten vorgelagerten Prozess (ps₂) aus Petrolkoks, Pech und Anodenresten gemischt und vorgebrannt werden. In der Schmelzflusselektrolyse (ps₃) werden die elektrolytischen Zellen in Reihe geschaltet und Gleichstrom wird von Zelle zu Zelle geleitet. Die Zellen bestehen aus Kohlenstoffkathoden, die sich in einer rechteckigen Stahlhülle befinden und innen durch feuerfeste Ziegelwände isoliert sind. Die Anoden sind aufgehängt und werden durch elektrisch leitende Anodenträger an ihrem Platz gehalten. Durch das Anlegen der Gleichspannung zwischen der vorgebrannten Anode und der Kathode spaltet sich das Aluminiumoxid in Aluminium und Sauerstoff (Reduktion). Aluminium scheidet sich dabei an der Kathode ab und sammelt sich am Boden der Elektrolysezelle, wo es als flüssiges Aluminium abgesaugt werden kann. Der abgespaltete Sauerstoff wiederrum reagiert mit den Anoden und führt zur Bildung von CO und CO₂ und dazu, dass die Anoden verbraucht werden und ersetzt werden müssen. Das so entstehende CO₂ macht ca. 12 % der THG-Emissionen der Primärherstellung aus.

Bei der Elektrolyse kann es außerdem zum sogenannten Anodeneffekt kommen, der 15 % der THG-Emissionen ausmacht. (Breun 2016) Der Anodeneffekt wird hervorgerufen, wenn die Aluminiumoxid-Konzentration im Schmelzbad unter 1-2 % fällt. Dies führt dazu, dass anstelle des Aluminiumoxids der Elektrolyt in Metall- und Fluoridionen zersetzt wird, wobei Letztere mit dem Kohlenstoff der Anode reagieren und per- und polyfluorierte Chemikalien (PFCs) bilden, die ein sehr hohes Treibhauspotenzial besitzen. (European Commission 2017a). Die sich bildenden PFCs sind CF₄ (Tetrafluormethan) und C_2F_6 (Hexafluorethan) mit einem GWP100 von 7.390 tCO₂e/t Rohaluminium für CF₄ und 12.200 tCO₂e/t Rohaluminium für C₂F₆ (IPCC 2007b). 47 % der THG-Emissionen macht die Bereitstellung der Elektrizität für die Elektrolyse aus (Breun 2016). Je nach eingesetzter Elektrolyse-Technik liegt der Strombedarf zwischen 13,2 und 17,0 MWh/t Rohaluminium. Am weitesten verbreitet ist die Point Feeder PreBaked (PFPB)-Elektrolyse mittels Verwendung vorgebrannter Anoden mit einem eher geringeren Strombedarf zwischen 13,2 und 15,0 MWh/t Rohaluminium. (European Commission 2017a) Der gesamte Primärenergieeinsatz wird auf 211,8 GJ/t Aluminium beziffert (Jochem et al. 2004) und ist damit um ein Vielfaches höher als der von Stahl mit ca. 15-18 GJ/t Rohstahl über die Hochofenroute und 1,8-2,4 GJ/t über die Elektrostahlroute (siehe Kapitel 2.4.2.1 und 2.4.2.2). 74 % der THG-Emissionen bei der Aluminiumherstellung werden also durch die Schmelzflusselektrolyse verursacht und die übrigen 26 % in den vor- und nachgelagerten Prozessschritten.

Dem flüssigen Aluminium können, ähnlich wie bei der Stahlerzeugung, Legierungselemente zugesetzt werden, bevor dieses in einem vierten Prozessschritt gegossen wird (ps_4). Das gegossene Aluminium (z.B. Barren) wird schließlich in einem letzten Schritt durch Walzen, Strangpressen, Ziehen oder Schmieden zu Halbzeugen weiterverarbeitet (ps_5).

2.4.3.2 Produktion von Sekundäraluminium

Beim Recycling von Aluminium wird zunächst unterschieden, ob als Sekundärrohstoff Altschrotte oder Neuschrotte eingesetzt werden, da Sekundärhütten diesbezüglich in sogenannte Refiner (Verwendung Altschrotte) bzw. Remelter (Umschmelzwerke, Verwendung Neuschrotte) klassifiziert werden. Altschrotte sind gebrauchte Aluminiumprodukte am Ende ihres Produktlebenszyklus. Neuschrotte entstehen direkt bei der Primärproduktion oder bei Weiterverarbeitungsprozessen wie Stanzen, Drehen oder Fräsen (siehe auch Weiterverarbeitungsprozesse in Kapitel 2.6). In Refinern werden aus den Altschrotten aufgrund verschiedenster Zusammensetzungen Gusslegierungen erzeugt, während in Remeltern wegen der Sortenreinheit der Neuschrotte hochwertigere Knetlegierungen hergestellt werden können. Knetlegierungen zeichnen sich durch gute Festigkeitswerte und plastische Verformbarkeit aus. Bei Gusslegierungen liegt der Fokus auf einer guten Vergießbarkeit.

Im Vergleich zur Primärproduktion von Aluminium erfolgt die Herstellung von Sekundäraluminium in weniger Prozessschritten. Die nachstehende Erläuterung dieser Prozessschritte folgt Dienhart (2003), European Commission (2017a), Luo und Soria (2008; Quinkertz) und Jochem et al. (2004): Das Recycling von Aluminiumschrotten erfordert zunächst die Aufbereitung des Schrotts durch ein oder mehrere Aufbereitungsverfahren wie Schredder, Schwimm-Sink-Anlagen oder Wirbelstromscheider mit dem Ziel einer möglichst hohen Konzentrierung des zu gewinnenden Aluminiums. Die Art bzw. Kombination von Aufbereitungsverfahren ergibt sich aus der Qualität der vorhandenen Sekundärrohstoffe, woraus wiederum große Bandbreiten für den nötigen Energiebedarf resultieren. Der Energiebedarf zur Aufbereitung von Altschrotten ist dementsprechend deutlich höher als der von Neuschrotten (Ecoinvent V2.2 2007-2013). Die Aufbereitung wird in der Regel nicht von der Sekundäraluminiumhütte selbst durchgeführt. Daher wird in dieser Arbeit nicht spezifisch auf die verschiedenen Aufbereitungsverfahren eingegangen. In der Sekundäraluminiumhütte werden im ersten Prozessschritt (ps₁) die angelieferten aufbereiteten Aluminiumschrotte geschmolzen, wobei verschiedene Öfen, wie Induktionsöfen, Drehtrommelöfen oder Herdöfen zur Anwendung kommen. In der Regel wird der Schrott unter Zusatz von Salz eingeschmolzen, das Verunreinigungen aufnimmt und die Oxidation durch die Ofenatmosphäre begrenzt. Knetlegierungen können analog zur Primärproduktion nach dem Vergießen einer Weiterverarbeitung zugeführt werden (z.B. Walzwerk) (ps₂). Jochem et al. (2004) beziffern den durchschnittlichen Primärenergieeinsatz der Sekundäraluminiumerzeugung auf 17,9 GJ/t Aluminium, was nur 8 % des Energieeinsatzes der Primärroute entspricht.

2.5 Produktionstechniken und THG-Emissionen der Chemieindustrie

Wie in Kapitel 2.3 ausgeführt, werden die THG-Emissionen des industriellen Sektors in Deutschland überwiegend in der Metall- und Chemieindustrie (zusammen 53 %) verursacht. Analog zu Kapitel 2.4 zur Metallindustrie beschäftigt sich dieses Kapitel mit der Chemieindustrie, identifiziert treibhausgasintensive chemische Erzeugnisse auf nationaler und internationaler Ebene (Kapitel 2.5.1) und beleuchtet diese hinsichtlich ihrer Produktionsverfahren und resultierender THG-Emissionen (Kapitel 2.5.2 bis Kapitel 2.5.4).

2.5.1 Grundlagen der Chemieindustrie und treibhausgasintensiver Erzeugnisse

Die Erzeugung mineralölischer und chemischer Produkte verursacht 25 % der industriebedingten THG-Emissionen in Deutschland (vgl. Kapitel 2.3). Die THG-Emissionen verhalten sich dabei nahezu proportional zum Endenergieverbrauch, der einen Anteil von ca. 85 % an den gesamten THG-Emissionen der chemischen Industrie ausmacht (McKinsey 2006). Gemäß der umweltökonomischen Gesamtrechnung des Statistischen Bundesamtes zu den anthropogenen Luftemissionen wurden durch die Herstellung mineralölischer und chemischer Produkte im Jahr 2016 46,5 Mio. t CO₂e (Statistisches Bundesamt 2018b) emittiert. Davon entfallen 44 % der Emissionen auf Mineralölerzeugnisse und 56 % auf chemische Erzeugnisse.

Nach dieser Klassifikation der Europäischen Union aus der Verordnung Nr. 1893 des Jahres 2006 (EU 2006b) sind Mineralölerzeugnisse flüssige oder gasförmige Brennstoffe aus Rohöl, bituminöse Mineralien und deren Fraktionierungsprodukte, die durch Raffinieren in Form von Fraktionierung, direkter Destillation von Rohöl oder Spaltung entstehen. Bekannte Minerölerzeugnisse sind Naphtha (Rohbenzin), Motorentreibstoffe wie Benzin und Kerosin, Raffineriegase wie Ethan, Propan und Butan sowie Brennstoffe wie z.B. Heizöl. (Statistisches Bundesamt 2008; EU 2006b; Römpp 2002)

Chemische Erzeugnisse umfassen alle Erzeugnisse aus der Verarbeitung organischer und anorganischer Rohstoffe durch chemische Verfahren. Hierbei wird zwischen der Herstellung von chemischen Grundstoffen¹⁰, auf organischer oder anorganischer Basis, und der Herstellung von Zwischen- und Endprodukten durch Weiterverarbeitung der chemischen Grundstoffe unterschieden. (Statistisches Bundesamt 2008) Die organische Chemie ist die Teildisziplin der Chemie für die wissenschaftliche Untersuchung von Struktur, Eigenschaften und Reaktionen von organischen, d.h. kohlenstoffhaltigen, Verbindungen und Materialien. Die wichtigsten organischen Rohstoffe sind Erdgas, Erdöl, Kohle und nachwachsende Rohstoffe. (Behr et al. 2010; Clayden et al. 2012) Elemente und chemische Verbindungen, die keinen Kohlenstoff enthalten, zählen entsprechend zu den anorganischen Stoffen, die in der Teildisziplin der anorganischen Chemie behandelt werden. Bedeu-

¹⁰ Grundstoff, Grundchemikalie und Basischemikalie werden im Folgenden synonym verwendet.

tende anorganische Rohstoffe sind Schwefel, Stickstoff, Sauerstoff, Steinsalz, Wasser, Metalloxide und Phosphate. (Behr et al. 2010; Clayden et al. 2012; Holleman et al. 2007)

Chemische Erzeugnisse gliedern sich laut EU-Verordnung Nr. 1893 in sechs Wirtschaftszweige (EU 2006b) (Abbildung 2.10). Unter diesen Wirtschaftszweigen hat die Grundstoffchemie mit 64 % den mit Abstand größten Anteil an der Produktion in Deutschland (mengenbezogen) bzw. am deutschen Produktionsindex¹¹ der Chemieindustrie. (VCI 2018)

Es folgen sonstige chemische Erzeugnisse (14 %), Seifen, Wasch-, Reinigungs- und Körperpflegemittel sowie Duftstoffe (10 %), Anstrichmittel, Druckfarben und Kitte (9 %), Chemiefasern (2 %) sowie Schädlingsbekämpfungs-, Pflanzenschutz- und Desinfektionsmittel (1 %). (VCI 2018) Die Grundstoffchemie ist überdies gleichzeitig auch Hauptverursacher der THG-Emissionen, da dieser Bereich mit 460,1 PJ/Jahr einen Anteil von ca. 84 % am gesamten Energieverbrauch der Chemieindustrie hat (Fleiter et al. 2013; AGEB 2009; Statistisches Bundesamt 2009).

¹¹ Der Produktionsindex zeigt das Niveau und die Veränderung der mengenmäßigen Produktion bezogen auf ein definiertes Basisjahr (Lübbers 2012).



Abbildung 2.10: Aufteilung und Beschriftung der Wirtschaftszweige in der Chemieindustrie nach EU-Verordnung 1893 und Gewichtung des Anteils am Produktionsindex in der Chemischen Industrie in Deutschland basierend auf der Datenlage nach VCI (2018)

Zur Grundstoffchemie zählen nach Verordnung Nr. 1893 der EU (2006b) "sonstige organische Grundstoffe und Chemikalien" (mit einem Anteil am Produktionsvolumen chemischer Grundstoffe von 57 %), "Kunststoffe in Primärformen" (24 %), "Düngemittel und Stickstoffverbindungen" (7 %), "sonstige anorganische Grundstoffe und Chemikalien" (6 %), "Farbstoffe und Pigmente" (3 %), "Industriegase" (2 %) sowie "Synthetischer Kautschuk in Primärformen" (1 %) (Abbildung 2.11). (VCI 2018)



Abbildung 2.11: Aufteilung chemischer Grundstoffe (Wirtschaftszweig 20.1) gemäß EU-Verordnung 1893 und Anteile am Produktionsvolumen chemischer Grundstoffe (20.1)

Sonstige organische Grundstoffe und Chemikalien, die wie beschrieben 57 % aller chemischen Grundstoffe ausmachen, werden in der Petrochemie erzeugt (VCI 2018). So wird die Chemiesparte genannt, in der vor allem Erdgas und Fraktionen des Erdöls wie z.B. Naphtha (Rohbenzin) durch Cracken verarbeitet werden (Behr et al. 2010). Die Petrochemie ist heutzutage die Chemiesparte mit den größten Produktionsmengen und somit auch dem größten Anteil am Produktionsindex der deutschen Chemieindustrie. Die wichtigsten bzw. meistproduzierten organischen Grundstoffe in Deutschland sind Alkene¹² (häufig auch als Olefine bezeichnet) und Aromaten¹³. (Behr et al. 2010; Latscha et al. 2016) Bekannte Alkene sind z.B. Ethylen (Ethen) (Anteil an den hergestellten Grundstoffen: 14 %), Propylen (Propen) (11 %) und Buten (4 %), die in Deutschland allein schon ca. 30 % des Produktionsvolumens (t/Jahr) der organischen Grundstoffe ausmachen. In großen Mengen produzierte Aromaten sind beispielsweise Benzol (5 %) und Toluol (2 %). (siehe Anhang Tabelle A.3, Datenlage gemäß Statistisches Bundesamt (2018a). Die meistproduzierten **anorganischen Grundchemikalien** sind Chlor (17 % der anorganischen Grundchemikalien), Natriumhydroxid (14 %), Schwefelsäure (13 %), Soda (11 %) und Salzsäure (8 %) (siehe Anhang Tabelle A.4, Datenlage gemäß Statistisches Bundesamt (2018a)).

Kunststoffe in Primärformen, mit einem Anteil von 24 % am Produktionsvolumen chemischer Grundstoffe, sind gemäß der EU-Verordnung Nr. 1893 vor allem Polymere (Statistisches Bundesamt 2008).¹⁴ Polymere sind chemische Verbindungen aus Kettenmolekülen- oder verzweigten Molekülen, die in der Regel aus vielen gleichen oder gleichartigen niedermolekularen Teilchen (Monomeren) aufgebaut sind, weshalb diese Moleküle die Bezeichnung Polymere tragen (griechisch: polys, viele; meros, Teil) (Kaiser 2016; Lechner et al. 2003). Polymere gliedern sich in verschiedene Gruppen, die alle auf ca. 30 verschiedenen Monomeren basieren. Die nach Produktionsmengen bedeutendste Gruppe sind die Polyolefine, in der z.B. die Polymere

¹² Alkene sind chemische Verbindungen mit einer oder mehreren Kohlenstoff-Kohlenstoff-Doppelbindung im Molekül. Die Summenformel ist C₂H_{2n}. (vertiefend siehe Latscha et al. 2016)

¹³ Aromaten sind Kohlenwasserstoffe die mit der Struktur des Benzols verwandt sind bzw. das Bindungssystem des Benzols enthalten und oft einen angenehmen aromatischen Geruch besitzen (vertiefend siehe Latscha et al. 2016).

¹⁴ Zur vollständigen Auflistung der Kunststoffe in Primärformen wird auf Statistisches Bundesamt (2008) verwiesen.

Polyethylen (PE) und Polypropylen (PP) enthalten sind, die aus den Monomeren Ethylen und Propylen erzeugt werden (Behr et al. 2010). PE und PP sind die mit Abstand meist produzierten Polymere weltweit und haben allein in Europa einen Anteil von ca. 50 % an der gesamten Polymerproduktion (siehe Anhang Abbildung A.1) (PlasticsEurope 2017). Weitere Polymergruppen sind Polydiene, Vinylpolymere, Polyacrylate, Polyester, Polyamide, Polyether, Polyurethane, Harze und Polyacetate. Für tiefergehende Erläuterungen der Polymergruppen und zugehöriger Polymere wird an dieser Stelle auf Fachliteratur verwiesen (z.B. Kaiser (2016) oder Behr et al. (2016)).

Zusammenfassend werden die meisten THG-Emissionen in der Grundstoffchemie (ca. 84 %), insbesondere in der Petrochemie, verursacht. Gleichzeitig ist die Grundstoffchemie auch die Chemiesparte, die die gesamte Fertigungsindustrie mit einer breiten Produktpalette an Basischemikalien, Zwischenprodukten und Polymeren versorgt (Fleiter et al. 2013) und daher besonders interessant ist für Einkaufsabteilungen von Unternehmen, z.B. aus der Automobil-, Elektronik-, Bau- oder Verpackungsindustrie, die in dieser Arbeit im Vordergrund stehen.



Wachsende Wertschöpfungstiefe

Abbildung 2.12: Wichtige chemische Grundstoffe und darauf basierende chemische Wertschöpfungsketten (in Anlehnung an VCI 2012)

Exemplarische Wertschöpfungsketten der Chemieindustrie, die auf den wichtigsten chemischen Grundstoffen und Zwischenprodukten basieren, können

Abbildung 2.12 entnommen werden. Im Folgenden werden die bedeutendsten Herstellungsverfahren dieser **Grundstoffe** aufgrund ihrer Treibhausgasrelevanz (siehe oben) kurz beschrieben. Die bedeutendsten Verfahren sind Cracking-Verfahren, mit denen z.B. Synthesegase, Ethylen, Propylen, Butan, Benzol und Xylole hergestellt werden (Kapitel 2.5.2.1 und 2.5.2.2). Darüber hinaus wird in Kapitel 2.5.3 die Herstellung von Chlor, dem wichtigsten anorganischen Grundstoff erläutert, der unter anderem für die Herstellung von Polyvinylchlorid (PVC) oder Polyurethan (PUR) benötigt wird (Behr et al. 2016). PVC und PUR sind die nach Polyethylen und Polypropylen dritt- und viertwichtigsten (volumenstärksten) Kunststoffe in Europa (PlasticsEurope 2017). Zuletzt wird die Herstellung von Toluoldiisocyanat (TDI) (Kapitel 2.5.4) als Beispiel für ein wichtiges Zwischenprodukt und wichtigstes Ausgangsprodukt der PUR Herstellung vorgestellt (European Commission 2017b). Ein wichtiges Zwischenprodukt wird hier nur für PUR und nicht für PVC vorgestellt, da PUR aufgrund seiner breiten Anwendungsmöglichkeiten für verschiedenste Industriezweige für diese Arbeit als relevanter erachtet wird. PVC wird dagegen überwiegend in der Bauindustrie verwendet. (Kaiser 2015; Behr et al. 2016)

2.5.2 Herstellung petrochemischer Grundstoffe

Chemische Grundstoffe sind die Basisstoffe chemischer Wertschöpfungsketten, aus denen Endprodukte wie Kunststoffe, Kosmetika oder Waschmittel hergestellt werden (Behr et al. 2010). 57 % der chemischen Grundstoffe sind organische Grundstoffe (VCI 2018), die überwiegend in der Petrochemie erzeugt werden und zu 95 % auf Erdöl oder Erdgas basieren. Erdöl ist der derzeit wichtigste Rohstoff der chemischen Industrie. Erdöl ist ein sehr komplexes Gemisch aus vielen Kohlenwasserstoffen sowie stickstoff-, sauerstoffund schwefelhaltigen Komponenten und muss daher zunächst in erdölverarbeitenden Raffinerien in besser handhabbare Fraktionen unterteilt werden, bevor es in der Petrochemie weiterverarbeitet werden kann. (Behr et al. 2010) Der grundlegende Verarbeitungsprozess einer Raffinerie zur Fraktionierung ist die Rohöldestillation. (MWV 2003)

Bei der Rohöldestillation wird das Rohöl zunächst in einem Entsalzer von Sanden und Salzen befreit. Im Anschluss wird es über mehrere Wärmetauscher in einen Röhrenofen gepumpt und auf 350 bis 370 °C erhitzt. Von da gelangt das Dampf-Flüssigkeits-Gemisch in den ersten Destillationsturm bei Normaldruck (Atmosphärendruck). Am Kopf des Turms erhält man das überwiegend aus Propan und Butan bestehende Flüssiggas, Leicht- und Schwerbenzin (auch leichtes und schweres Naphtha genannt) und Gasöl, die seitlich abgeleitet werden. Im Sumpf des Turms erhält man den sogenannten Atmosphärenrückstand, der anschließend in einer Vakuumdestillation aufbereitet wird. Das Vakuum wird mit Dampfstrahlpumpen auf 40-70 mbar eingestellt. Als leichteste Fraktion im Vakuumturm wird Vakuumgasöl gewonnen. Als Nebenprodukt erhält man leichtes und schweres Wachsdestillat zur Schmierstoffherstellung. Im Sumpf verbleibt Vakuumrückstand, der als Bitumen verwendet werden kann. (MWV 2003; Behr et al. 2010) (vgl. Abbildung 2.13) Zur Vertiefung der Funktionsweise einer Raffinerie und ihrer Anlagen wird auf Latscha et al. (2016) und MWV (2003) verwiesen.



Abbildung 2.13: Vereinfachtes Fließschema einer Raffinerie, die im Verbund mit der chemischen Industrie arbeitet (in Anlehnung an Latscha et al. 2016; MWV 2003)

Raffinerien arbeiten häufig im Verbund mit petrochemischen Anlagen (vgl. Abbildung 2.13). Der mit ca. 90 % größte Teil der Raffinerieproduktion wird

als Heizstoff oder Treibstoffe verwendet. (Kaiser 2015) Die wichtigsten Raffinerieprodukte für die Chemieindustrie sind Naphtha und Gasöl, die in der Petrochemie zu Olefinen und Aromaten verarbeitet werden. (Latscha et al. 2016)

Das dafür wichtigste Verfahren der Petrochemie zur Verarbeitung von Naphtha und Gasöl ist das Cracken. Dabei werden langkettige Kohlenwasserstoffe in kurzkettige Kohlenwasserstoffe aufgespalten. Die wichtigsten Cracking-Verfahren sind das Steamcracken und das katalytische Cracken, die im Folgenden näher erläutert werden. (Latscha et al. 2016; Behr et al. 2010; Behr et al. 2016)

2.5.2.1 Steamcracken

Die in Kapitel 2.5.1 und Kapitel 2.5.2 angesprochenen wichtigsten Ausgangsstoffe der chemischen Industrie, also die Alkene Ethylen, Propylen und Buten sowie die Aromaten Benzol, Toluol und Xylol können in einem Steamcracker als Gemisch produziert werden. Als Rohstoffe für den Steamcracker, der sogenannte Feed, kommen neben Naphtha auch Erdgaskondensate wie Ethan, Propan und Butan infrage, es können aber auch andere Destillationsschnitte der Erdöldestillation eingesetzt werden. Je nach Feed ändert sich die entstehende Menge an Ethylen und Propylen. (Behr et al. 2016)

Die nachstehende Beschreibung der Funktionsweise des Steamcrackens folgt Latscha et al. (2016), Behr et al. (2016) und MWV (2003). Beim Cracken werden die verwendeten Rohstoffe unter erhöhter Temperatur gespalten (*Cracken*). Das Spalten meint das Auftrennen von Kohlenstoff-Kohlenstoff (C-C) Verbindungen und Kohlenstoff-Wasserstoff (C-H) Verbindungen, sodass aus langkettigen Kohlenwasserstoffen kurzkettige Kohlenwasserstoffe werden. Dieser Prozess einer thermo-chemischen Spaltung organischer Verbindungen wird auch als Pyrolyse bezeichnet. Steamcracken ist dementsprechend auch als Mitteltemperaturpyrolyse definiert. Während des Crackingprozesses wird gleichzeitig Wasserstoff (*Steam*) eingespeist, um die Crackerprodukte an einer Weiterreaktion im Reaktor zu hindern. Allerdings kann diese Weiterreaktion nicht ganz verhindert werden, sodass sich höherkettige Aromaten zu unerwünschtem Koks zusammenschließen, der im Steamcracker nur aufwändig durch kontrollierte Verbrennung mit Dampf und Luft entfernt werden kann, wodurch unproduktive Ausfallzeiten entstehen (Cai et al. 2002; Kurati 2019).

Der Aufbau eines Steamcrackers einschließlich der Eingangsstoffe und der wichtigsten Produkte ist in Abbildung 2.14 dargestellt. Der Steamcracker besteht aus bis zu 80 Meter langen Strömungsrohren, die in einem ausgemauerten Ofenraum angeordnet sind (Strömungsrohr-Reaktor). In dem Ofenraum bringen Brenner die Rohrwandungen auf die für die Pyrolyse erforderliche Temperatur von 800-900 °C. Die dabei entstehenden heißen Abgase werden durch einen Kamin ausgeleitet. Der Kamin hat eingebaute Wärmetauscher, sodass die Hitze der Abgase genutzt wird, um sowohl die zu crackenden Rohstoffe (z.B. Naphtha) als auch den Wasserstoff vorzuwärmen. Das vorgeheizte Gemisch wird auf diese Weise mit ca. 400 °C in den Ofen geleitet und auf bis zu 900°C erhitzt. Nach einer Verweilzeit von 0,1 bis 0,5 Sekunden wird das Gasgemisch am Ende des Strömungsrohr-Reaktors schnell in einem Wärmetauscher mit Wasser abgekühlt (quenchen), damit es nicht zu Folgereaktionen kommt. Dabei entsteht Hochdruckdampf, der in anderen Prozessen weiterverwendet werden kann. Im zweiten Abkühlungsschritt wird ein Quenchöl direkt eingespritzt, sodass sich das Gemisch in Crackgase und Crackbenzin aufteilt. Wegen der hohen Temperaturen wird der Teil der Steamcracker-Anlage hot section genannt. Durch die Veränderung der Temperatur, Verweilzeit und der Partialdrücke der Kohlenwasserstoffe und des Wassers wird die Crackschärfe gesteuert, die den Output des Crackers bestimmt. In der Praxis wird der Cracker so gesteuert, dass die Mengen an Ethylen, Propylen und des C₄-Schnitts (siehe Abbildung 2.14: z.B. Isobuten) optimal sind und die Bildung unerwünschten Wasserstoffs und Methans gleichzeitig möglichst gering sind.



Abbildung 2.14: Aufbau einer Steamcracker-Anlage (in Anlehnung an Behr et al. 2016)

Nachgeschaltet zur *hot section* werden in der *cold section* die Steamcrackerprodukte sehr aufwändig in mehreren Anlagen (D1-D6) entsprechend ihrer Siedepunkte destillativ getrennt, da zur Weiterverarbeitung sehr hohe Reinheitsgrade erforderlich sind. Bei Ethylen wird z.B. eine Reinheit von 99,9 Gew.-% und bei Propylen von 99,5 Gew.-%. benötigt, damit diese in einer Polymerisation eingesetzt werden können. Das Gemisch wird entsprechend in die Wertstoffe (auch HVC-High value chemicals genannt)¹⁵ Ethylen, Propylen, C₄-Schnitt und Pyrolysebenzin aufgetrennt. Die Benennung erfolgt

¹⁵ HVC benennt höherwertige Chemikalien, die durch den Cracking Prozess erzeugt werden. Die bekanntesten und meist produzierten HVCs sind Propylen und Ethylen. (Amghizar et al. 2017)

in der Literatur teilweise nach der Kohlenstoff-(C)-Kettenlänge (z.B. Ethylen C₂, Buten C₄) (VCI 2012). Der Energieverbrauch eines Steamcrackers zur Herstellung einer Tonne HVCs beträgt abhängig von den eingesetzten Rohstoffen und dem Verhältnis der eingesetzten Rohstoffe zwischen 12,5 - 23 [GJ/t HVC] (European Commission 2003, 2017b; Ren et al. 2006, 2008; Enviros Consulting 2006).

2.5.2.2 Fluid Catalytic Cracking (FCC)

Das katalytische Cracken wird für die Petrochemie immer wichtiger und setzt sich daher unter den Crackverfahren seit den 1950er Jahren immer mehr durch (Behr et al. 2016). Dies liegt zum einen darin begründet, dass die Umwandlung langkettiger Kohlenwasserstoffe und Kurzkettige nicht nur schneller erreicht wird (MWV 2003), sondern auch weniger gasförmige Produkte und mehr der wichtigen Olefine, Aromaten und verzweigten Alkane entstehen (Latscha et al. 2016). Zum anderen kann das Nebenprodukt Koks, welches im Steamcracker nur schwer gehandhabt werden kann (Behr et al. 2016), beim katalytischen Cracken als Energielieferant verwendet werden (MWV 2003).

Die Verfahrensbeschreibung des katalytischen Crackens folgt Latscha et al. (2016), Behr et al. (2016) und MWV (2003). Beim katalytischen Cracken werden pulverförmige Zeolith-Katalysatoren in einer bewegten Phase eingesetzt, deshalb wird das Verfahren auch als fluid catalytic cracking (FCC) bezeichnet. Im Folgenden wird der Prozessablauf des FCC geschildert; zum besseren Verständnis erfolgt eine Visualisierung in Abbildung 2.15.



Abbildung 2.15: Prinzip des fluid catalytic cracking (FCC) (in Anlehnung an Behr et al. 2016; MWV 2003)

Als Edukte bzw. Einsatzstoffe beim FCC werden vorwiegend Gasöl und Wachsdestillate eingesetzt. Diese Einsatzstoffe werden vorgewärmt in das untere Ende des Reaktorsteigrohrs eingeleitet, wo sie mit dem aktiven Katalysator zusammengeführt werden. Beim Aufeinandertreffen kommt es sofort zur Verdampfung der Einsatzprodukte; der Spaltvorgang beginnt schon im Steigrohr. Das Katalysatorpulver steigt zusammen mit den Kohlenwasserstoffen in den Reaktor auf, dort ist die Reaktion bei ca. 500 °C nach wenigen Sekunden abgeschlossen. Die gecrackten Produkte verlassen den Reaktor und werden im mehrstufigen Fraktionierturm in Gase, Benzine und Gasöle zerlegt. Dieser Fraktionierung ist ähnlich der Steamcracker-Anlage eine Destillation nachgeschaltet, um die Produkte weiter aufzutrennen (vgl. Abbildung 2.14 cold section). Wie beim Steamcracken bildet sich auch beim katalytischen Cracken Koks. Die Koksbildung führt hier dazu, dass der Katalysator seine Aktivität verliert, weil sich der Koks während des Spaltvorgangs auf dem Katalysator absetzt und ihn unwirksam macht. Um den Katalysator wieder zu regenerieren, wird der mit Koks beladene Katalysator in einen Regenerator geleitet, wo der Koks durch das Einblasen von Luft abgebrannt wird.

Im Regenerator entstehen dabei Temperaturen von ca. 600 °C, die im Prozess energetisch nutzbar gemacht werden. Die entstehende Wärmeenergie wird als Energielieferant für den Crackprozess verwendet. Der entstehende Koks kann beim FCC somit als Produkt zur Wärmegewinnung bilanziert werden. Der regenerierte Katalysator wird zurück in das Steigrohr geleitet und steht nun erneut für das Verfahren zur Verfügung, das somit kontinuierlich abläuft. Der Energieverbrauch einer FCC-Anlage zur Herstellung einer Tonne HVCs beträgt abhängig von den eingesetzten Rohstoffen und dem Verhältnis der eingesetzten Rohstoffe 8 - 12 [GJ/t HVC] (European Commission 2003, 2017b; Ren et al. 2006, 2008; Enviros Consulting 2006) und damit nur etwas mehr als die Hälfte des Energieverbrauchs eines Steamcrackers (vgl. Kapitel 2.5.2.1).

2.5.3 Herstellung von Chlor

Chlor ist der meisthergestellte anorganische Grundstoff in Deutschland (Statistisches Bundesamt 2018a). Dies liegt vor allem in seiner hohen Reaktionsfähigkeit begründet, weshalb Chlor zur Herstellung vieler Zwischenprodukte genutzt und später häufig wieder abgespalten wird und somit im Endprodukt nicht mehr enthalten ist. Die bekanntesten Beispiele sind PUR (z.B. Schaumstoff) und Polycarbonat (z.B. Autoscheinwerfer). Das wichtigste bzw. meisthergestellte Endprodukt, in dem Chlor nicht abgespalten wird, ist PVC. Ansonsten wird Chlor nach wie vor zur Wasserdesinfektion eingesetzt. (Behr et al. 2016)

Die Herstellung von Chlor erfolgt hauptsächlich durch Elektrolyse, der sogenannten "Chloralkali-Elektrolyse". In der Industrie werden derzeit drei Verfahrensvarianten dieser Elektrolyse eingesetzt: Das Amalgam-Verfahren, das Diaphragma-Verfahren und das Membran-Verfahren. (Fleiter et al. 2013) Allerdings wird seit mehr als 20 Jahren nur noch das Membran-Verfahren bei der Errichtung von Neuanlagen eingesetzt, und ältere Diaphragma-Verfahren und vor allem Amalgam-Anlagen werden sukzessive zu Membran-Anlagen umgerüstet. Aufgrund dieser Entwicklung hatte das Membran-Verfahren schon 2012 einen Anteil von 69 % an der weltweiten Chlor-Produktionskapazität (Behr et al. 2016). Das Membran-Verfahren wurde erst 1975 entwickelt und ist damit deutlich jünger als das Diaphragma-Verfahren (1890) und das Amalgam-Verfahren (1892). Die beiden alten Verfahren gerieten allerdings unter Umweltgesichtspunkten in die Kritik: das Diaphragma-Verfahren aufgrund seines Asbestgehalts und das Amalgam-Verfahren aufgrund seines Quecksilbergehalts. (Holleman et al. 2007)

Wegen der aktuellen und weiterwachsenden wirtschaftlichen Bedeutung des Membran-Verfahrens wird die Chloralkali-Elektrolyse im Folgenden anhand des Membran-Verfahren erläutert (vgl. Abbildung 2.16). Die Verfahrensbeschreibung erfolgt nach den Best-Available-Technique Dokumenten zur Chloralkali-Elektrolyse nach European Commission (2014b) sowie nach Holleman et al. (2007) und Behr et al. (2016).



Abbildung 2.16: Schematische Darstellung des Membran-Verfahrens zur Chloralkali-Elektrolyse (in Anlehnung an Holleman et al. 2007)

Bei der Chloralkali-Elektrolyse wird in der Regel Natriumchlorid (NaCl, Kochsalz) und in seltenen Fällen Kaliumchlorid (nur 3-4 % der EU-Produktionskapazität) (European Commission 2014b) elektrolysiert. Dabei muss grundsätzlich verhindert werden, dass die an der Kathode gebildete Lauge (OH-) nicht mit dem an der Anode gebildetem Chlor (Cl₂) in Berührung kommt. Der Wasserstoff würde mit dem Chlor ein Chlorknallgas-Gemisch ergeben. Um dies auszuschließen, werden der Anoden- und Kathodenraum voneinander getrennt. Dazu wird eine ionendurchlässige Scheidewand ("Membran") zwischen den beiden Räumen installiert. Diese Membran ist in der Regel eine 0,2 mm dicke hydraulisch undurchlässige Doppelmembran aus Nafion (Polytetrafluorethylen). Als Anoden werden Elektroden aus aktiviertem Titan verwendet; als Kathoden dienen Stahlelektroden. Während der Elektrolyse sind in der Lösung H+, OH-, Na+ und Cl- Ionen enthalten. Von diesen Ionen werden die H+ und Cl- Ionen am leichtesten entladen und folgen der Bruttogleichung 446,1 kJ + 2 H OH + 2 Na Cl(aq) \rightarrow H₂ + 2 NaOH(aq) + Cl₂. Neben Chlor entstehen bei der Elektrolyse also noch Wasserstoff und Natronlauge als Nebenprodukte.

2.5.4 Herstellung von Toluoldiisocyanat (TDI)

Diisocyanate¹⁶ wie TDI werden mit Polyolen gemischt, um Polyurethan (PUR) herzustellen. PUR-Schaum wird zur Herstellung von Matratzen, gepolsterten Möbeln und Autositzen sowie zur akustischen Dämmung, für Teppichunterbezüge, Haushaltsschwämme, Kleidung und Verpackungen verwendet (Kaiser 2015). In der Automobilindustrie ist PUR mit einem Anteil von 17 % der zweitwichtigste Kunststoff. (Patil et al. 2017)

Die Herstellung von TDI erfolgt gemäß der Best Available Technique Dokumente zur "Large Volume Organic Chemical Industry" nach European Commission (2017b) in drei grundlegenden Schritten.

¹⁶ Neben TDI wird auch MDI (Methylendiphenylisocyanat) verwendet (Ceresana Market Research 2014).



Abbildung 2.17: Produktionsschema Toluoldiisocyanat (TDI)(in Anlehnung an European Commission 2017b; Lorenz et al. 2006)

Im ersten Schritt erfolgt die Nitrierung von Toluol zu Dinitrolouol (DNT). Dazu werden zunächst Salpetersäure (HNO₃) und Schwefelsäure (H₂SO₄) zu Nitriersäure vermischt. Das Toluol wird daraufhin durch die Nitriersäure in einem ersten Prozessschritt zu Mononitrotoluol (MNT) (C₇H₅N₃O₆) nitriert. Das MNT wird anschließend zu DNT (C₇H₆N₂O₄) nitriert. Im zweiten Schritt wird DNT durch einen kontinuierlichen Hydrierungsprozess unter Verwendung eines Metallkatalysators zu Diaminotoluol (TDA) (C₇H₆N₂H₄) reduziert. Im letzten Schritt wird aus TDA in einem Phosgenisierungsprozess TDI erzeugt. Das dafür notwendige Phosgen wird aus Kohlenstoffmonoxid und Chlor herstellt. Bei der Phosgenisierung von TDA entsteht als Nebenprodukt in großen Mengen Salzsäure (HCI), die in anderen chemischen Prozessen weiterverwendet werden kann. Für eine detaillierte Beschreibung der einzelnen Prozesse bzw. der chemischen Reaktionen wird auf die Fallstudie in Kapitel 5.2.6 verwiesen oder auf entsprechende Fachliteratur oder Firmenpatente (z.B. in European Commission (2017b); Büttner et al. (2005); Lorenz et al. (2006)). Zur Herstellung von TDI werden 2,76 [GJ/t TDI] Strom und zwischen 21,7 und 31,68 [GJ/t TDI] Dampf benötigt (IEA 2009; Fleiter et al. 2013).

2.6 Fertigungsverfahren zur Metall- und Kunststoffverarbeitung

In diesem Unterkapitel werden die Grundlagen der Fertigungsverfahren nach DIN-Norm 8580 zur Metall- und Kunststoffverarbeitung kurz erläutert, die in Kapitel 6 im Rahmen des Teilmodells B (Weiterverarbeitung) ökonomisch und ökologisch bewertet werden können.

2.6.1 Grundlagen der Produktion und Fertigungsverfahren

Produktion bezeichnet den gelenkten "Einsatz von Gütern und Dienstleistungen, den sogenannten Produktionsfaktoren, zum Abbau von Rohstoffen oder zur Herstellung bzw. Fertigung von Gütern und zur Erzeugung von Dienstleistungen" (Bloech et al. 2014). So werden Inputfaktoren wie menschliche Arbeit, Werkstoffe oder Betriebsmittel zu Outputfaktoren wie Sachgütern, Dienstleistungen oder unerwünschtem Output (z.B. Ausschuss) transformiert (Blohm et al. 2008). Die Zielsetzungen für solche Produktionsbzw. Verarbeitungsprozesse haben sich in den letzten Jahrzehnten verändert. Waren früher ausschließlich Kostensenkung und die Erhöhung der Qualität und Produktivität wichtig, so liegt der Schwerpunkt heute zunehmend auf einer nachhaltigen Produktion (vgl. Kapitel 2.1) mit Einsparung von Energie und Rohstoffen sowie einer erhöhten Flexibilität. Dabei ist zu beachten, dass sich der Energie- und Ressourcenverbrauch bei einem komplexen Produktionsverfahren aus einer Vielzahl von Einzelverbräuchen zusammensetzt. (Fritz und Schulze 2015) Jede Produktion und jeder Produktionsprozess mit den dazugehörigen Einzelverbräuchen basiert auf so genannten Fertigungsverfahren. Diese beschreiben gemäß der DIN Norm 8580 des Deutschen Instituts für Normung (DIN) die Behandlung eines Stoffes von seiner Formung, über die Veränderung seiner Form bis hin zum Ändern seiner Stoffeigenschaften. Sämtliche Fertigungsverfahren werden nach dieser DIN 8580, in Abhängigkeit der Art und Weise ihrer Einwirkung auf den Stoff, in Hauptgruppen unterteilt. Die DIN-Norm unterscheidet die sechs Hauptgruppen 1-Urformen, 2-Umformen, 3-Trennen, 4-Fügen, 5-Beschichten und 6-Stoffeigenschaften ändern, die im Folgenden kurz erläutert werden. (DIN 8580)

2.6.2 Urformen

Die Hauptgruppe "Urformen" enthält alle Verfahren, die aus formlosen Stoffen wie z.B. Flüssigkeiten, Gase, Granulate, Pulver und Späne einen festen Körper mit einer geometrisch definierten Form fertigen (Böge 2011). Abbildung A.2 im Anhang zeigt die sieben Untergruppen der Verfahren in Abhängigkeit des formlosen Stoffes. Liegt ein Stoff in flüssigem, plastischem oder breiigem Zustand vor, so werden Gießtechniken verwendet, um dem Körper eine feste zuvor definierte Form zu geben. Ist der Ausgangsstoff bereits fest, jedoch formlos, wie Pulver oder Span, so wird der Stoff vermischt und durch eine Kombination aus Pressen und Wärmebehandlung in die gewünschte Form gebracht. Dieser Vorgang nennt sich Sintern. (Böge 2011)

2.6.3 Umformen

In der Hauptgruppe 2, den Umformverfahren, werden Verfahren eingesetzt, bei denen Rohteile aus plastischen Werkstoffen, wie z.B. Metallen oder thermoplastische Kunststoffen, gezielt in eine andere Form gebracht werden, ohne dass dabei die Masse oder der Zusammenhalt des Rohteils verändert werden. Es wird also kein Material vom Rohteil entfernt oder hinzugegeben. (DIN 8580; Doege und Behrens 2018). Die Umformverfahren gliedern sich grob in die fünf Untergruppen Druckumformen, Zugdruckumformen, Zugumformen, Biegeumformen und Schubumformen (vgl. Tabelle 2.2). Diese Untergruppen der zweiten Ebene gliedern sich erneut in weitere spezifische Untergruppen einer dritten Ebene, die in Tabelle 2.2 exemplarisch genannt sind (z.B. Walzen als ein mögliches Druckumformverfahren der Gruppe 2.1). Zur Übersicht aller Untergruppen der Umformverfahren wird auf DIN 8582 verwiesen.

Umformgruppen	Definition
2.1 Druckumformen	Umformen eines festen Körpers, wobei der plastische Zustand im
	Wesentlichen durch Druckbeanspruchung herbeigeführt wird (z.B.
	Walzen oder Eindrücken)
2.2 Zugdruckumformen	Umformen eines festen Körpers, wobei der plastische Zustand im
	Wesentlichen durch kombinierte Zug- und Druckbeanspruchung
	herbeigeführt wird (z.B. Tiefziehen oder Durchziehen)
2.3 Zugumformen	Umformen eines festen Körpers, wobei der plastische Zustand im
	Wesentlichen durch Zugbeanspruchung herbeigeführt wird (z.B.
	Weiten)
2.4 Biegeumformen	Umformen eines festen Körpers, wobei der plastische Zustand im
	Wesentlichen durch Biegebeanspruchung herbeigeführt wird (z.B.
	Biegeumformung mit geradliniger Werkzeugbewegung)
	Umformen eines festen Körpers, wobei der plastische Zustand im
2.5 Schubumformen	Wesentlichen durch Schubbeanspruchung herbeigeführt wird (z.B.
	Schubumformung mit geradliniger Werkzeugbewegung)

Tabelle 2.2:	Definitionen der Umformgruppen	(in Anlehnung an DIN 8582)
1000110 2.2.	Deminitionen der onnormgruppen	(In American and an Div 0502)

2.6.4 Trennen

In der dritten Hauptgruppe, den Trennverfahren, werden alle Fertigungsverfahren aufgeführt, die den Zusammenhalt von Körpern vermindern oder aufheben (DIN 8580). Die Trennverfahren untergliedern sich gemäß DIN 8580 in die sechs Untergruppen Zerteilen, Spanen mit geometrisch bestimmten Schneiden, Spanen mit geometrisch unbestimmten Schneiden, Abtragen, Zerlegen und Reinigen (siehe Anhang Abbildung A.3). Das Spanen mit geometrisch bestimmten Schneiden (Gruppe 3.2) stellt gemessen am industriellen Einsatz die wichtigste Untergruppe der Trennverfahren dar (Fritz und Schulze 2015). Zu den spanenden bzw. zerspanenden Verfahren zählen alle mechanischen Bearbeitungsverfahren, bei denen der gegenüber dem Rohteil überflüssige Werkstoffanteil in Form von Spänen abgetragen wird (Heisel 2014). Vorgreifend auch auf die Fertigungsprozesse der Fallstudie in Kapitel 6 zur Weiterverarbeitung von Stahl soll hier erwähnt werden, dass die Entwicklung bei spanenden Verfahren hin zu höherer Energie- und Ressourceneffizienz bei gleichbleibender oder steigender Produktivität geht. Dies soll insbesondere durch die Reduzierung des Einsatzes von Kühlschmierstoffen (z.B. durch Trockenbearbeitung) realisiert werden.

2.6.5 Fügen

Die vierte Hauptgruppe "Fügen" enthält alle Fertigungsverfahren, mit denen zwei oder mehrere Werkstücke geometrisch bestimmter Form oder auch ebensolche Werkstücke aus formlosem Stoff auf Dauer miteinander Verbunden oder zusammengebracht werden (Feldmann et al. 2014). Die Einteilung der verschiedenen Fügeverfahren in entsprechende Untergruppen nach der DIN 8580 erfolgt auf Basis der Art des geschaffenen Zusammenhalts und dessen Lösbarkeit (vgl. Tabelle 2.3). Auch diese neun Gruppen werden weiter in eine Vielzahl weiterer Untergruppen unterteilt. Auf diese wird wegen fehlender Relevanz für den weiteren Verlauf der Arbeit nicht eingegangen. Zur Übersicht aller Untergruppen der Fügeverfahren wird auf die DIN 8593 verwiesen.

Fügegruppe	Art des Zusammenhalts	Lösbarkeit
4.1:	Schwerkraft, Formschluss	Ohne Schädigung der Fügeteile lös-
Zusammensetzen	oder Federkraft	bar
4.2:	Finachluss	Ohne Schädigung der Fügeteile lös-
Füllen	EINSCHIUSS	bar
4.3	Kraftechluce	I.A. ohne Schädigung der Fügeteile
Anpressen, Einpressen	Kraitschluss	lösbar
4.4	Formschluss, hervorgerufen	I.A. ohne Schädigung der Fügeteile
Fügen durch Urformen	durch Urformen	lösbar
4.5	Formschluss, hervorgerufen	I.A. ohne Schädigung der Fügeteile
Fügen durch Umformen	durch Umformen	lösbar
4.6	Chaff, and in duran	Nur durch Schädigung oder Zerstö-
Fügen durch Schweißen	Stonverbindung	rung der Fügeteile lösbar
4.7	Stoffvorbindung	I.A. nur mit, teils auch ohne Schädi-
Fügen durch Löten	Stonverbindung	gung der Fügeteile lösbar
4.9		I.A. nur mit Schädigung oder Zer-
4.0 Klahon	Adhäsion	störung der Fügeteile lösbar. (Nur
Kieben		in Sonderfällen ohne Schädigung)
4.0	Formschluss und/oder Kraft-	Löson ohno Schödigung der Eüge
4.9 Toxtilos Eügen	schluss bei textilen Faser-	toilo möglich
Textiles Fugeri	stoffen	telle moglich

Tabelle 2.3:Einteilung der Fügegruppen nach Art des Zusammenhalts und dessen
Lösbarkeit (in Anlehnung an DIN 8593)

2.6.6 Beschichten

Die Hauptgruppe "Beschichten" umfasst Fertigungsverfahren, die eine fest haftende Schicht aus formlosem Stoff auf einen Werkstoff aufbringen. In Abbildung A.4 im Anhang A.1 ist eine Übersicht über die Einteilung der Beschichtungsverfahren zu sehen. Die Untergruppen des Beschichtens gliedern sich nach dem Zustand des Beschichtungsstoffes unmittelbar vor dem Beschichtungsvorgang. (DIN 8580) Auf diese Weise wird in der DIN-Norm 8580 zwischen Beschichten aus dem flüssigen, plastischen, breiigen, pulverförmigen, gasförmigen und ionisierten Zustand sowie Beschichten durch Schweißen oder Löten unterschieden.

2.6.7 Stoffeigenschaften ändern

Hautpgruppe 6 enthält alle Verfahren zum Ändern der Eigenschaften des verarbeiteten Stoffs. Solche Veränderungen geschehen vor allem im atomaren Bereich, beispielsweise durch chemische Reaktionen und Versetzungen im Atomgitter, die durch Temperatureinwirkung induziert werden (DIN 8580). Die Verfahren des "Stoffeigenschaften Änderns" gliedern sich in sieben Gruppen, die nach der DIN 8580 teilweise in weitere Untergruppen eingeteilt werden (vgl. Tabelle 2.4). Vorgreifend sei im Kontext des Fallbeispiels zur Materialverarbeitung in Kapitel 6 an dieser Stelle exemplarisch die Gruppe "Wärmebehandeln" genannt, die u.a. die Verfahren Glühen, Härten, Vergüten und Aushärten umfasst.

Stoffeigeschaftenänderungssgruppe	Untergruppen
6 1:Verfectigen durch Umfermen	Verfestigungsstrahlen, Verfestigen durch
6.1. Verlestigen durch omformen	Walzen, durch Ziehen oder Schmieden
	Glühen, Härten, Isothermisches Umwandeln,
6.2: Wärmebehandeln	Anlassen/Auslagern, Vergüten, Tiefkühlen,
	Thermochemisches Behandeln, Aushärten
C. 2. Thermomechanisches Debandeln	Austenitformhärten, Heißisostatisches Nach-
6.3. mermomechanisches Behandeln	verdichten
6.4: Sintern/Brennen	-
6.5: Magnetisieren	-
6.6: Bestrahlen	-
6.7: Photochemische Verfahren	Belichten

 Tabelle 2.4:
 Übersicht über die Einteilung der Hauptgruppe 6 Stoffeigenschaften ändern (in Anlehnung an DIN 8580)
2.7 Anforderungen an die Planung und Bewertung nachhaltiger Wertschöpfungsketten

Die Identifizierung der Treiber der THG-Emissionen in Kapitel 2.3 zeigt, dass vor allem die Stahl- und Aluminiumindustrie sowie die chemische Grundstoffindustrie für die industriellen THG-Emissionen in Deutschland verantwortlich sind. Planungswerkzeuge zur Bewertung der THG-Emissionen sollten sich demnach vorzugsweise auf diese Branchen bzw. Produkte dieser Branchen konzentrieren.

Metalle und chemische Grundstoffe werden, wie in den vorherigen Kapiteln erläutert, durch komplexe und energieintensive Prozesse erzeugt. Da Materialhersteller in der Regel über unterschiedliche Produktionsanlagen mit unterschiedlichen Kapazitäten verfügen und häufig eine unterschiedliche Prozesskenntnis aufweisen, liegt die Vermutung nahe, dass unterschiedliche Hersteller unterschiedlich energie- und treibhausgaseffizient produzieren. Unterschiedliche Werke würden dementsprechend einen unterschiedlichen werksspezifischen CO₂e-Fußabdruck pro normierter Outputeinheit (z.B. t Rohstahl) aufweisen. Demnach ist ein Materialhersteller treibhausgaseffizienter als ein anderer, wenn die Erzeugung eines identischen Produkts mit geringeren Treibhausgasemissionen einhergeht. Um diese hersteller-, bzw. werksspezifischen Unterschiede bei der Wertschöpfungskettenplanung im Rahmen der Materialbeschaffung berücksichtigen zu können, sollte die Modellierung und Bewertung der THG-Emissionen der Materialerzeugung werksspezifisch erfolgen. Um den CO₂e-Fußabdruck eines erzeugten Materials beziffern zu können, sollten zugleich auch die THG-Emissionen bilanziert werden, die noch vor der Rohstoffverarbeitung in vorgelagerten Lieferketten, der sogenannten Vorkette, anfallen.

Entsprechend zur Materialerzeugung, bei der je nach Herstellungsverfahren und Prozesskenntnis unterschiedliche Mengen an Treibhausgasen emittiert

werden, muss ebenso berücksichtigt werden, dass ein Material durch unterschiedliche Fertigungsverfahren (vgl. Kapitel 2.6) zu einem Produkt verarbeitet werden kann. Ein Werkzeug zur Planung der THG-Emissionen einer Wertschöpfungskette sollte folglich ebenfalls die Modellierung der Bauteilfertigung ermöglichen. Bei der Bewertung der THG-Emissionen ergibt sich zudem die Anforderung, wissenschaftliche anerkannte Methoden zu identifizieren und zu verwenden, mit denen THG-Emissionen einheitlich und standardisiert bilanziert werden können.

Bei der Bewertung der Bauteilfertigung und im Hinblick auf die ökonomische Dimension der nachhaltigen Planung der Wertschöpfungskette sind ebenfalls anerkannte wissenschaftliche Methoden vonnöten, anhand derer die Kosten des Produkts entlang der Fertigungskette einheitlich bilanziert werden können. Bezüglich der sowohl ökologischen als auch ökonomischen Zielsetzung dieser Arbeit ergibt sich ein Entscheidungsproblem mit mehreren Zielgrößen. Auch hierfür gilt es, wissenschaftliche Methoden zu identifizieren und exemplarisch umzusetzen, mit denen ein Entscheider unter Berücksichtigung mehrerer Kriterien und seiner Präferenzen eine für sein Unternehmen optimale Entscheidung zur Gestaltung einer nachhaltigen Wertschöpfungskette herbeiführen kann. Da immernoch viele Unternehmen ökonomisch getrieben entscheiden, ist es erforderlich die jeweiligen THG-Emissionen auch durch Monetarisierung in unternehmerische Entscheidungen integrieren zu können und damit eine optimale anstatt paretooptimale Lösung des multikriteriellen Entscheidungsproblems zu erreichen.

Je nach Produkt ist es ferner sinnvoll, auch die THG-Emissionen der Nutzungs- und Entsorgungsphase abzuschätzen und in die Planung zu integrieren. Dies betrifft im Wesentlichen Produkte, die in mobile Verkehrsmittel wie Land-, Wasser- oder Luftfahrzeuge verbaut werden und durch die Motorisierung des Fahrzeugs direkt oder indirekt Treibhausgase während der Nutzung emittieren. So kann es bezüglich des CO₂e-Fußabdrucks eines Produkts z.B. vorteilhaft sein, ein in der Herstellung zwar sehr treibhausgasintensives, aber dafür leichtes Ausgangsmaterial für das Produkt zu wählen, um aufgrund der Gewichtsersparnis THG-Emissionen während der Nutzungsphase einzusparen. Um die THG-Emissionen der Wertschöpfungskette eines Produkts ganzheitlich zu planen, sollte ein Planungswerkzeug daher auch eine Bewertung der möglichen Nutzungs- und Entsorgungsphase umfassen. Es ist auf diese Weise je nach Antriebsart und Laufleistung abzuwägen, welches Material und welcher Lieferant/Materialhersteller (bzw. dessen Werk) die nachhaltigsten Alternativen darstellen.

Zusammenfassend können im Hinblick auf die Zielsetzung dieser Arbeit (vgl. Kapitel 1.2) **acht Anforderungen** an die Planung und Bewertung nachhaltiger industrieller Wertschöpfungsketten abgeleitet werden.

- Die Werkstoffe Stahl und Aluminum sowie chemische Grundstoffe sollten detailliert bewertet werden, da diese den größten Anteil an den THG-Emissionen haben, die aufgrund von Materialherstellungsprozessen emittiert werden.
- 2. Die Modellierung und Bewertung der erwähnten Materialherstellungsprozesse sollte werksspezifisch erfolgen, da Hersteller unterschiedliche Produktionsanlagen verwenden.
- 3. Bei der Modellierung und Bewertung von THG-Emissionen der Materialverarbeitung muss berücksichtigt werden, dass unabhängig vom Werkstoff verschiedene Fertigungsverfahren zur Herstellung eines Produkts eingesetzt werden können. Das Bewertungstool für die Materialverarbeitung sollte demnach generisch aufgebaut sein, sodass jede mögliche Fertigungskette modelliert werden kann.
- Um eine ganzheitliche Planung und Bewertung der THG-Emissionen eines Produkts zu ermöglichen, sollten auch die THG-Emissionen der Nutzungs- und Entsorgungsphase des Endprodukts abgeschätzt werden.

- 5. Zur ganzheitlichen Bewertung sollten überdies auch die THG-Emissionen in der Bilanzierung berücksichtigt werden, die noch vor der Rohstoffverarbeitung, also in den "Vorketten" anfallen.
- 6. Die Bilanzierung von THG-Emissionen entlang der Wertschöpfungskette sollte auf Basis einer standardisierten wissenschaftlich anerkannten Methode erfolgen.
- 7. Analog dazu sollte auch die Bewertung der ökonomischen Dimension auf einer standardisierten wissenschaftlich anerkannten Methode basieren.
- 8. Aufgrund der (mindestens) sowohl ökologischen als auch ökonomischen Zielsetzung und im Hinblick auf die Vergleichbarkeit alternativer Herstellungs-/Fertigungsverfahren, muss eine möglichst transparente, wissenschaftlich anerkannte Methode zur multikriteriellen Entscheidungsunterstützung eingesetzt werden, um eine für den Modellanwender optimale Konfiguration der Wertschöpfungskette zu berechnen.

3 Ansätze zur ökonomischen und ökologischen Planung industrieller Wertschöpfungsketten

Das vorliegende Kapitel beginnt mit einer kurzen Einführung in das industrielle Stoffstrommanagement (Kapitel 3.1), das die Grundlage der ökonomischen und ökologischen Bewertung industrieller Wertschöpfungsketten darstellt. Zur Bewertung ökonomischer und ökologischer Ziele eines Unternehmens eignen sich vor allem Methoden des Umweltcontrollings, die in Kapitel 3.2 ausgewählt und diskutiert werden. Daran anschließend werden in Kapitel 3.3 Methoden der multikriteriellen Entscheidungsanalyse vorgestellt und ausgewählt, um Entscheidungen entlang industrieller Wertschöpfungsketten sowohl auf Basis von ökologischen als auch ökonomischen Kriterien treffen zu können. Als weitere Bewertungsmöglichkeit zur ökonomischen und ökologischen Planung wird in Kapitel 3.4 der Schadensund Vermeidungskostenansatz vorgestellt. An die Methodendiskussionen der Kapitel 3.2 bis 3.4 schließt sich in Kapitel 3.5 eine umfangreiche Literaturanalyse an. Kapitel 3.6 schließt mit einer Zusammenfassung des Forschungsbedarfs, der sich auf Basis der Methoden- und Literaturdiskussion ergibt.

3.1 Industrielles Stoffstrommanagement

Die methodische Grundlage für ökologisch-orientierte und vor allem integrierte Ansätze bildet das industrielle Stoffstrommanagement. Dieses berücksichtigt zusätzlich zum konventionellen Produktionsmanagement, welches üblicherweise auf monetäre Regelgrößen wie Gewinn, Deckungsbeitrag und Herstellkosten bzw. auf deren Ersatzgrößen wie Durchlaufzeiten, Kapazitätsauslastung und Bestände abzielt, auch sämtliche umweltrelevanten Stoffflüsse. Das umfasst auf der Inputseite den Einsatz sämtlicher Primär- und Sekundärressourcen und outputseitig die Emissionen in die Medien Luft, Wasser und Boden. Die Enquete-Kommission "Schutz des Menschen und der Umwelt" des Deutschen Bundestages definiert Stoffstrommanagement als "zielorientierte, verantwortliche, effiziente und ganzheitliche Beeinflussung von Stoffströmen und Stoffsystemen, wobei die Zielvorgaben aus den ökologischen und ökonomischen Bereichen kommen, unter Berücksichtigung von sozialen Aspekten." (Enquete-Kommission 1994) Neben den produktionswirtschaftlichen Kenngrößen stehen im industriellen Stoffstrommanagement also auch die Stoff- und Energiebilanzen des gesamten Produktionssystems im Blickpunkt. (Spengler 1998)

Ein Produktionssystem kann dabei gleichermaßen einen Produktionsstandort, einen einzelnen Prozess oder auch den gesamten Herstellungsprozess eines Produktes über mehrere Standorte hinweg repräsentieren (Dyck hoff und Souren 2008). Die Grenzen des Produktionssystems werden je nach Zielsetzung festgelegt, und die Bilanzierung der Stoff- und Energieströme erfolgt im Rahmen dieser Systemgrenzen (Tschandl und Posch 2012). Auf diese Weise können unterschiedliche Konfigurationen eines Systems miteinander verglichen werden.

Die Bilanzierung der Stoff- und Energieströme basiert auf Massen- und Energieerhaltungssätzen und kann in unterschiedlichen Detaillierungsstufen erfolgen. Unterschieden wird zwischen der reinen Bilanzierung der Inputs und Outputs, der Berechnung von Stoffstromnetzen und die Modellierung oder Simulierung aller Elementarprozesse. (Radloff 2016) Im Rahmen des Umweltmanagements wird insbesondere den Input-Output-Analysen, wie z.B. bei der Ökobilanzierung, große Bedeutung beigemessen. Beispielsweise stützt sich Heijungs (1994) bei seinen Forschungstätigkeiten zur Entwicklung der Ökobilanzierung wesentlich auf das Modell der Input-Output-Relation nach Leontief (Prammer 2009). Die Grundlage der Input-Output-Relation bildet die lineare-limitationale Produktionsfunktion nach Leontief, die von einem konstanten Verhältnis der Faktoreinsatzmenge und Ausbringungsmenge ausgeht. (Leontief 1986)

Die Ziele der integrierten Betrachtung bzw. die Aufgabenbereiche des industriellen Stoffstrommanagements lassen sich nach Spengler (1998), in Anlehnung an die Planungsebenen des Produktionsmanagements, in strategische, taktische und operative Aufgaben einordnen.

- (1) Strategische Aufgaben (Planungshorizont größer als 5 Jahre)
 - 1. Konzeption globaler, nationaler oder regionaler Strategien und langfristiger Unternehmenskooperationen zur Erreichung der strategischen Produktions- und Umweltschutzziele
 - 2. Planung des strategischen (umweltfreundlichen) Produktionsprogramms
 - Wahl der Produktionsstandorte und -verfahren unter Berücksichtigung der erwarteten (globalen/regionalen) Stoff- und Energieströme
- (2) Taktische Aufgaben (Planungshorizont 1-5 Jahre)
 - 1. Planung und Gestaltung umweltfreundlicher Produkte durch:
 - Design recyclingfreundlicher Produkte, Wahl recyclingfreundlicher Werkstoffe und demontagefreundlicher Verbindungstechniken
 - Verlängerung der Produktlebensdauern
 - 2. Technisch-organisatorische Gestaltung der zu ihrer Herstellung erforderlichen Produktionssysteme durch:
 - Konzeption inputseitiger Umweltschutzmaßnahmen wie Auslegung auf umweltfreundliche Einsatzstoffe oder Einsatz von Sekundärrohstoffen

- Konzeption verfahrensseitiger Umweltschutzmaßnahmen wie Erhöhung energetischer/stofflicher Wirkungsgrade oder Vermeidung/Verminderung unerwünschter Schadstoffemissionen in die Medien Luft, Wasser und Boden
- Konzeption outputseitiger Umweltschutzmaßnahmen wie Implementierung von End-of-Pipe-Techniken zur Emissionsminderung, Anlagen zur Abwasserreinigung oder Aufbereitungsanlagen für Abfälle
- Konzeption einer umweltverträglichen Beschaffungs-, Produktions-, Vertriebs-, Rücknahme- und Entsorgungslogistik

(3) Operative Aufgaben (Planungshorizont bis zu 1 Jahr)

Optimale Durchführung der Produktion und des Recyclings bei vorgegebener technisch-organisatorischer Systemstruktur unter Beachtung der aktuell gültigen rechtlichen, technischen, ökonomischen und ökologischen Rahmenbedingungen durch:

- 1. Kurzfristige Planung eines umweltfreundlichen Produktionsprogramms, bspw. weniger Nebenprodukte oder Abfälle
- Umweltfreundliche Auswahl und Bereitstellung der benötigten Roh-, Hilfs- und Betriebsstoffe bzw. deren Substitution durch Sekundärstoffe
- Weitestgehenden Einsatz demontierter und aufgearbeiteter Baugruppen und Bauteile aus zurückgenommenen Altprodukten
- 4. Emissions- und abfallarme Ablaufplanung der Produktion
- 5. Optimalen Einsatz verfügbarer Anlagen zur Emissionsminderung, Abwasserreinigung und Abfallaufbereitung
- 6. Optimale Nutzung bestehender Logistiksysteme zur Beschaffung, Produktion, Distribution, Entsorgung und Redistribution

Zur Verbindung produktionswirtschaftlicher und ökologischer Ziele eines Unternehmens eignet sich das sogenannte Umweltcontrolling (vgl. Kapitel 3.2.1) und die dazugehörigen Instrumente, die im Rahmen der integrierten Planung und Steuerung mit den produktionswirtschaftlichen Planungsund Steuerungsgrößen des Unternehmens zu verknüpfen sind (Spengler 1998). Schrack (2016) und Nertinger (2015) verbinden dazu die Methoden der Materialflusskostenrechnung mit der Ökobilanzierung, um Kosten und Emissionen der Herstellung integriert zu betrachten (vgl. Kapitel 3.2.2).

3.2 Grundlagen und Diskussion ausgewählter Methoden des Umweltcontrollings

3.2.1 Einführung in das Umweltcontrolling

Um die Wirkung des betrieblichen Handelns im Sinne einer ökologischen Nachhaltigkeit bewerten und umweltwirtschaftlich rationale Entscheidungen treffen zu können, müssen die erforderlichen Informationen transparent aufbereitet und geeignete Informations- und Entscheidungsunterstützungssysteme zur Verfügung gestellt werden. Aus diesen Anforderungen hat sich das betriebliche Umweltcontrolling entwickelt, das sich im Spannungsfeld zwischen betriebswirtschaftlichen und ökologischen Zielvorstellungen bewegt, da die Ziele beider Bereiche nicht immer miteinander kongruieren. (Kramer 2010; Tschandl und Posch 2012; Dyck hoff und Souren 2008; Baum et al. 2007) Abgeleitet aus dem Verständnis des Finanzcontrollings unterstützt das Umweltcontrolling das Management bei der Zielerreichung durch Informationen aus Soll-Ist-Analysen sowie aus der Planung, Steuerung, Kontrolle und Koordination von Maßnahmen. Es dient zugleich als Institution zur Rationalitätssicherung des Managements. (Tschandl und Posch 2012; Dyck hoff und Souren 2008) Das Umweltcontrolling arbeitet dabei nicht nur mit der Unternehmensführung, sondern bereichsübergreifend mit sämtlichen Abteilungen wie Entwicklung, Einkauf, Produktion und Logistik zusammen.

Es ist dadurch in der Lage, mittels geeigneter methodischer Instrumente, Einsparpotenziale entlang der Wertschöpfungskette zu identifizieren (z.B. Energieeinsparpotenziale), geeignete Maßnahmen einzuleiten und auch deren ökologischen oder finanziellen Erfolg zu bewerten. (Tschandl und Posch 2012)

Seit der Entstehung des Umweltcontrollings wurden zahlreiche solcher Instrumente entwickelt, die sich entsprechend ihres Controllingsverständnisses und ihrer grundsätzlichen Orientierung anhand von drei grundlegenden Ansätzen klassifizieren lassen. Dabei handelt es sich um den finanziell- bzw. ökonomisch-orientierten Ansatz, den ökologisch-orientierten Ansatz und den integrierten ökonomisch-ökologischen Ansatz, der die jüngste Entwicklungsstufe der Umweltcontrolling-Instrumente darstellt.¹ (Kramer 2010; Burschel et al. 2004; Schaltegger et al. 2003) Abbildung 3.1 zeigt die drei Ansätze am Beispiel einiger Umweltcontrolling-Instrumente.

¹ Der Vollständigkeit halber sei erwähnt, dass die Umweltcontrolling-Instrumente neben der Unterscheidung in die drei genannten Ansätze, auch in strategische und operative Instrumente eingeteilt werden können (Tschandl und Posch 2012).

Ökonomisch-orientierte Ansätze	Ökologisch-orientierte Ansätze	Integrierte Ansätze			
 Lebenszykluskosten- rechnung (LCC) Zielkostenrechnung Sustainable Value added 	 Ökobilanz (LCA) Produktlinienanalyse Öko-Checklisten Ökologische Buchhaltung 	 Materialflusskosten- rechnung (MFKR) Umweltkennzahlen Ressourcenkosten- rechnung Reststoffkosten- rechnung 			

Abbildung 3.1: Klassifikation ausgewählter Instrumente des Umweltcontrollings (in Anlehnung an Burschel et al. 2004)

Eine Auswahl für diese Arbeit geeigneter Methoden und deren Beschreibung erfolgt in den Kapiteln 3.2.2 bis 3.2.5. Zur Vertiefung weiterer Instrumente wird auf Spengler (1998), Tschandl und Posch (2012) und Burschel et al. (2004) verwiesen.

3.2.2 Methodenauswahl

Gemäß aktueller Dissertationen und Zeitschriftenartikel über die Entwicklung integrierter ökonomischer und ökologischer Ansätze hat sich vor allem eine Kombination der Ökobilanzierung (engl. Life Cycle Assessment - LCA) mit der Materialflusskostenrechnung (MFKR) etabliert (z.B. Schrack 2016; Nertinger 2015; Rieckhof und Guenther 2018, Viere et al. 2011; Viere et al. 2010b).

Die Ökobilanzierung ist eine weitverbreitete Methode zur Bilanzierung von THG-Emissionen und anderer Umweltauswirkungen von Produkten (Rieckhof und Guenther 2018; Rebitzer 2002; Klöpffer und Renner 2008). LCA ist in der Norm DIN EN ISO 14040 beschrieben und standardisiert. Nach der Norm umfasst eine Ökobilanz den gesamten Lebensweg eines Produktes, von der Rohstoffgewinnung und -erzeugung über die Energieerzeugung und Materialherstellung bis zur Anwendung, Abfallbehandlung und endgültigen Beseitigung. Dabei bezieht sich die Ökobilanz auf die Umweltaspekte und wirkungen eines Produktsystems. (DIN EN ISO 14040:2006)

Im Rahmen der Materialflusskostenrechnung (MFKR, engl. Material flow cost accounting - MFCA) werden Materialflüsse- und bestände sowie der Energieeinsatz in einem Unternehmen erfasst, modelliert und in physikalischen Einheiten (z.B. Masse) guantifiziert. In diesem Zusammenhang werden auch die mit den Material- und Energieflüssen verbundenen Kosten ermittelt. (DIN EN ISO 14051:2011) Die grundlegende Idee ist dabei, dass sämtliche, im betrieblichen Leistungsprozess entstehenden Herstellkosten verursachungsgerecht auf die Outputkategorien "Produkt" und "Non-Produkt" allokiert werden (Strebel 2003).² So wird bei der Anwendung der MFKR das übergeordnete Ziel der Quantifizierung des "Non-Produkt-Output" verfolgt, um Kosten aufzuzeigen, die nicht direkt mit dem Produkt zusammenhängen. Bei diesem Non-Produkt-Output handelt es sich beispielsweise um Verschnitt, Ausschuss fehlerhafter Produkte oder Abfälle. Dadurch können Entscheidungsträgern in Betrieben Möglichkeiten aufgezeigt werden, wie unerwünschte Umweltauswirkungen reduziert und zugleich Kosten reduziert werden können. (DIN EN ISO 14051:2011) Durch die Anwendung der MFKR kann auch die Transparenz von Materialflüssen und Energieverbräuchen inklusive damit verbundener Kosten und Umweltaspekte verbessert werden. Durch die gewonnene Transparenz können Material- und Energieverbräuche besser im Betrieb koordiniert und kommuniziert werden. Die MFKR wird in den verschiedensten Bereichen wie der Verfahrenstechnik, Qualitätssteuerung, Fertigungsplanung oder dem Lieferkettenmanagement zur Entscheidungsunterstützung verwendet. (DIN EN ISO 14051:2011)

² Flusskosten sind die "internen Kosten, die für den Einsatz, die Transformation und die Entsorgung von Materialflüssen entstehen. Die Summe der Flusskosten ist weitgehend deckungsgleich mit den Herstellkosten." (UBA 2003)

Schrack (2016) stellt zunächst fest, dass die beiden vorgestellten Verfahren (LCA, MFKR) auf den ersten Blick keine Gemeinsamkeiten haben und nur wenige Anknüpfungspunkte bieten. Auf der einen Seite steht das LCA, das eine Produktperspektive einnimmt und auf den gesamten Lebenszyklus ausgerichtet ist. Auf der anderen Seite steht die MFKR, die Kosten von Ineffizienzen in der Produktion, insbesondere die Kosten von Materialverlusten oder Abfällen, identifizieren soll. Auf den zweiten Blick jedoch wird offensichtlich, dass beide Verfahren im unternehmerischen Kontext gemeinsame Zielsetzungen verfolgen. Als Gemeinsamkeiten zwischen LCA und MFKR identifiziert Schrack (2016):

- Beide Instrumente schaffen Transparenz hinsichtlich betrieblicher Stoff- und Energieflüsse.
- Bei beiden Instrumenten liegt eine zeitraumbezogene Systemgrenze vor und nicht eine zeitpunktbezogene und vergangenheitsorientierte Systemgrenze.
- Beides sind Instrumente des Umweltcontrollings.
- Beide Instrumente haben die gleiche Berechnungsbasis in Form von Stoff- und Energieflüssen.
- Beide Instrumente benötigen Regeln zur zweckgebundenen Allokation der Umweltwirkungen (LCA) bzw. Kosten (MFKR).

Auch Nertinger (2015) befasste sich intensiv mit der Integrationsfähigkeit der Verfahren und stellte zur Bewertung sogar Anforderungskriterien im Kontext eines nachhaltigen Unternehmenserfolgs auf. In Übereinstimmung mit Kokubu et al. (2009) wird der MFKR die größte Offenheit und Integrationsfähigkeit hinsichtlich der Systemgrenzen, der Einheit bzw. Währung (z.B. THG-Emissionen) und Komplementarität zu anderen Methoden, besonders der THG-Bilanzierung attestiert. Zuvor konnten Viere et al. (2009) in vorherigen Untersuchungen schon herausfinden, dass die MFKR über die notwendige Anschlussfähigkeit an das LCA verfügt. Daneben ist eine Verknüpfung dieser beiden Instrumente sinnvoll, um so den Schwächen der isolierten Anwendung zu begegnen (Schrack 2016). Gleichzeitig wird das LCA durch die Kombination beider Verfahren aufgewertet, da sich die Relevanz der LCA-Ergebnisse für die unternehmerische Tätigkeit noch weiter erhöht, indem die ökologischen Ergebnisgrößen mit ökonomischen Ergebnisgrößen in Zusammenhang gebracht werden. (Viere et al. 2009; Viere et al. 2010b) Überdies bewerten Viere et al. (2010b) die Kombination beider Verfahren als sehr geeignet, insbesondere zur Analyse von Produktionssystemen, da sich die einzelnen Bilanzierungsschritte bei der Durchführung in vielen Bereichen überschneiden. So kann die MFKR als Ausgangsbasis für die Ökobilanzierung dienen, oder auch andersherum.

Aufbauend auf den genannten Vorarbeiten basiert die vorliegende Arbeit ebenfalls auf einer Kombination der MFKR und des LCA. Im Folgenden werden daher beide Methoden ausführlich vorgestellt und kritisch beurteilt. Außerdem erfolgt eine kurze Einführung in die Lebenszykluskostenrechnung, die sich im Rahmen der Arbeit als adäquates Instrument zur lebenszyklusbasierten Berechnung von Maschinenstundenkostensätzen von Fertigungsmaschinen herausgestellt hat.

3.2.3 Ökobilanzierung (LCA)

3.2.3.1 Definition und Beschreibung

Eine weitverbreitete Methode zur Analyse und Bewertung von THG-Emissionen und anderer Umweltauswirkungen von Produkten ist die Ökobilanzierung bzw. ins Englische übersetzt das "Life Cycle Assessment (LCA)" (Rieckhof und Guenther 2018; Rebitzer 2002; Klöpffer und Renner 2008). LCA ist standardisiert in den Normen ISO 14040 und 14044 und wird definiert als eine Methode des Umweltmanagements, die auf systematische Weise die Umweltaspekte und potenziellen Umweltwirkungen von Produktsystemen im Verlauf ihres Lebensweges von der Rohstoffgewinnung über Produktion, Anwendung, Abfallbehandlung, Recycling bis zur endgültigen Beseitigung, d.h. "von der Wiege bis zur Bahre" (engl. "cradle-to-grave") abschätzt. (DIN EN ISO 14040:2006; DIN EN ISO 14044:2006)

3.2.3.2 Aufbau einer Ökobilanz

In diesem Abschnitt wird die Vorgehensweise zur Erstellung einer Ökobilanz gemäß DIN EN ISO 14040:2006 und DIN EN ISO 14044:2006 dargestellt. Den Normen zu Folge gliedert sich eine Ökobilanz grundsätzlich in vier iterativ aufgebaute Phasen. 1. Festlegung des Ziels und des Untersuchungsrahmens, 2. Erstellen der Sachbilanz, 3. Wirkungsabschätzung und 4. Auswertung.



Abbildung 3.2: Phasen einer Ökobilanz (in Anlehnung an DIN EN ISO 14040:2006)

Das bedeutet, dass die Ergebnisse einer Phase in den jeweils anderen Phasen verwendet werden. Das Vornehmen von Änderungen in einer Phase, z.B. durch das Verschieben des Untersuchungsrahmens oder die Verwendung anderer Daten, hat also unmittelbaren Einfluss auf alle anderen Phasen. Der iterative Ansatz zwischen und auch innerhalb der Phasen trägt somit zur Ganzheitlichkeit und Konsistenz von Ökobilanzstudien bei (DIN EN ISO 14040:2006). Zur Veranschaulichung der Phasen und deren wechselseitigen Beeinflussungen und Zusammenhänge siehe Abbildung 3.2. Im Folgenden werden die vier Phasen in ihren Grundzügen beschrieben.

3.2.3.3 Festlegung des Ziels und des Untersuchungsrahmens

In der ersten Phase werden zunächst die Ziele der Ökobilanzierung für den konkreten Anwendungsfall dargelegt. Die beabsichtigte Anwendung der Studie, die Gründe für deren Durchführung und die angesprochene Zielgruppe werden erläutert. Anschließend wird der Untersuchungsrahmen definiert. Wesentlich ist dabei die Definition der funktionellen Einheit, auf die sämtliche Input- und Outputströme normiert sind und die so als Bezugsgröße zur Vergleichbarkeit der Ergebnisse dient. Ebenso werden die Systemgrenzen der Bilanzierung festgelegt. Das heißt, es wird definiert, welche Prozesse Teil der Bilanzierung sein sollen und welche davon ausgeschlossen werden. Dabei finden häufig sogenannte "Abschneidekriterien" Anwendung. Damit wird festgelegt; welche Lebenswegabschnitte, Prozesse oder teilweise nur Input- und Outputströme bewusst vernachlässigt und aus der Betrachtung ausgeschlossen werden. Dieses "Abschneiden" des Systems ist häufig zweckmäßig, da dies zu einer erheblichen Reduktion der Komplexität der Ökobilanz führen kann. Zulässig ist es allerdings nur dann, wenn die ausgelassenen Stoff- oder Energieflüsse der Lebenswegabschnitte oder Prozesse keinen signifikanten Einfluss auf das Ergebnis der Analyse haben. (DIN EN ISO 14040:2006) Als grober Richtwert wird in der Literatur vorgeschlagen, Materialflüsse wegzulassen, die jeweils weniger als 1 % der Umweltaspekte am Gesamtsystem ausmachen (Klöpffer und Grahl 2009).

Außerdem erfolgt in der Beschreibung des Untersuchungsrahmens bereits eine Auswahl der Methoden für die Phasen der Wirkungsabschätzung und Auswertung sowie eine Dokumentation der getroffenen Annahmen bzw. Einschränkungen der Ökobilanz-Studie. Darüber hinaus kann die Beschreibung des Untersuchungsrahmens noch um Angaben über die vorhandenen bzw. erhobenen Daten und deren Qualität erweitert werden. (DIN EN ISO 14040:2006).

3.2.3.4 Sachbilanz

Bei der Erstellung der Sachbilanz (life cycle inventory - LCI) werden alle umweltrelevanten Input- und Outputflüsse des betrachteten Produktsystems zunächst im Rahmen einer Datenerhebung/-erfassung ermittelt und anschließend mittels Berechnungsverfahren quantifiziert. Typische Inputflüsse sind Rohstoffe, Hilfs- und Betriebsstoffe, Vorprodukte und Energie. Typische Outputflüsse sind Produkte, Kuppelprodukte und Abfall sowie Emissionen in Boden, Wasser und Luft. Mit der Quantifizierung der Flüsse ist eine Normierung der Daten auf die in Schritt 1 (vgl. Kapitel 3.2.3.3) festgelegte funktionelle Einheit gemeint. Das bedeutet, die Flussgrößen entsprechen dem Produktlebenszyklus von genau einer funktionellen Einheit. Die Normierung auf die funktionelle Einheit dient der Vergleichbarkeit verschiedener Produkte.

Falls nötig erfolgt die Normierung unter Einsatz sogenannter Allokationsverfahren. (DIN EN ISO 14040:2006) Klöpffer und Grahl (2009) definieren die Allokation als "Zuordnung der über den Lebensweg auftretenden Umweltbelastungen bei Kuppelproduktion, Recycling und Abfallentsorgung". Zur Anwendung von Allokationsverfahren kommt es, wenn die Zuordnung von Inputflüssen auf die Outputflüsse nicht eindeutig ist. Das ist vor allem dann der Fall, wenn ein Prozess mehrere Produkte hervorbringt, also bei Kuppelprozessen. In diesem Fall müssen Verfahren zur Zuordnung der Flüsse festgelegt werden, mit denen die Zuordnung möglichst "gerecht" erfolgt. (Klöpffer und Grahl 2009; DIN EN ISO 14040:2006) Für die Ökobilanzierung wird in der Regel eine Allokation nach Masse, ökonomischem Wert oder physikalischen Kriterien wie Molmasse oder Brennwert angewendet (Klöpffer und Grahl 2009).

3.2.3.5 Wirkungsabschätzung

In der Phase der Wirkungsabschätzung (life cycle impact assessment - LCIA) werden die Auswirkungen des untersuchten Produktsystems auf die Umwelt ermittelt (DIN EN ISO 14040:2006). Zur Berechnung bzw. Bewertung von Umweltauswirkungen existieren verschiedene Wirkungsmodelle in der

Literatur. Eine ausführliche Betrachtung verschiedener Modelle kann Prammer (2009) entnommen werden, der eine umfangreiche Analyse verfügbarer naturwissenschaftlich fundierter ökologischer Wirkungsmodelle durchführte. Das Verfahren der Wirkungsabschätzung des in Leiden beheimateten "Centrum voor Milieukunde" (CML-Methode) ist hier als Beispiel zu nennen, da dieses auch im Rahmen der hier vorgestellten ISO 14040er Reihe Anwendung findet. Die CML-Methode hat sich seit Mitte der 1990er Jahre in der Praxis durchgesetzt und findet auch in der Wissenschaft unter den Wirkungsmodellen die breiteste Akzeptanz. (Schrack 2016; Prammer 2009) Die CML-Methode wurde Anfang der 1990er Jahre vor allem von Heijungs entwickelt und erfolgt in den auch in der DIN EN ISO 14040:2006 erwähnten Teilschritten (1) Klassifizierung, (2) Charakterisierung und (3) Berechnung der Wirkungsindikatorergebnisse (Heijungs und Guinée 1992).

(1) Klassifizierung: Im ersten Schritt der Wirkungsabschätzung werden die zuvor ermittelten Sachbilanzen zunächst verschiedenen Wirkungskategorien zugeordnet. Wirkungskategorien werden als Klassen interpretiert, die verschiedene spezifische Umweltthemen bzw. Umweltprobleme repräsentieren (DIN EN ISO 14040:2006). Heijungs und Guinée (1992) führen in der CML-Methode über ein Dutzend Wirkungskategorien ein. Die davon relevantesten bzw. am häufigsten untersuchten sind Ozonschichtzerstörung, Eutrophierung, Versauerung, direkte Gesundheitsschädigung und vor allem der Treibhauseffekt (Global Warming Potential - GWP) bzw. die Klimaerwärmung (Stibbe 2017). Die Norm DIN ISO 14040:2006 beinhaltet diesbezüglich allerdings keine Vorgaben, wie viele oder welche Wirkungskategorien zu betrachten sind.

(2) Charakterisierung: Im Rahmen der Charakterisierung werden die Sachbilanzergebnisse in gemeinsame Einheiten umgewandelt und anschließend innerhalb derselben Wirkungskategorien zusammengefasst (DIN EN ISO 14044:2006). Für die Umwandlung der Ergebnisse werden sogenannte Charakterisierungsfaktoren verwendet, die auch unter den Begriffen Äquivalenz- oder Gewichtungsfaktoren bekannt sind (Heijungs und Guinée 1992).

Mittels dieser Charakterisierungsfaktoren wird berücksichtigt, dass sich unterschiedliche Stoffflüsse in unterschiedlichem Ausmaß auf die Umwelt auswirken und daher unterschiedlich umweltschädlich sind (Klöpffer und Grahl 2009). Bei der Umwandlung werden die Sachbilanzergebnisse mit wirkungskategorieabhängigen Charakterisierungsfaktoren multipliziert, um diese so auf die oben genannte gemeinsame Einheit zu normieren. Zur Bestimmung der Charakterisierungsfaktoren werden Charakterisierungs-Modelle herangezogen, die je nach Wirkungskategorie Konversions- oder Äquivalenzfaktoren bilden, die als die beschriebenen Charakterisierungsfaktoren zusammengefasst werden. Für die Wirkungskategorie Treibhauseffekt hat sich diesbezüglich der Charakterisierungs- bzw. Äquivalenzfaktor kgCO₂-Äquivalente/Gas (kgCO₂e) des IPCC-Modells (International Panel on Climate Change) in der Praxis durchgesetzt (Prammer 2009; IPCC 2001). Dieser Äquivalenzfaktor für das Treibhauspotenzial wird typischerweise über einen Zeitraum von 20, 50 oder 100 Jahren betrachtet. Im Kyoto-Protokoll wurde das Treibhauspotenzial über einen Zeitraum von 100 Jahren (GWP100) als die maßgebende Kennzahl festgelegt. (IPCC 2013) Methan hat beispielsweise einen Äguivalenzfaktor von 25, d.h. es ist also 25-mal so schädlich wie CO₂ (IPCC 2007a) (vgl. Kapitel 2.2).

(3) Berechnung der Wirkungsindikatorergebnisse: Nach der Umwandlung werden die nun normierten Sachbilanzergebnisse innerhalb ihrer Wirkungskategorien aufsummiert, um auf diese Weise die Wirkungsindikatorwerte zu ermitteln. Am Beispiel der Wirkungskategorie Treibhauseffekt (GWP) wird das Wirkungsindikatorergebnis schließlich in kgCO₂e/funktioneller Einheit angegeben (DIN EN ISO 14040:2006).

Die wichtigsten Begriffe zur Wirkungsabschätzung wurden am Beispiel der in dieser Arbeit wichtigen Wirkungskategorie Treibhauseffekt in Tabelle 3.1 zusammengefasst.

Tabelle 3.1:	Wichtige Begriffe der Ökobilanzierung am Beispiel der Wirkungskategorie
	Klimaerwärmung (in Anlehnung an DIN EN ISO 14044:2006)

Begriff	Beispiel
Wirkungskategorie	Treibhauseffekt/Klimaerwärmung
Sachbilanzergebnisse	Menge an Treibhausgas je
(LCI results)	funktioneller Einheit
Charakterisierungsmodell	IPCC-Modell
Charaktericierungsfakter	Treibhauspotenzial (GWP100) für jedes Treibhausgas
Charakterisierungstaktor	in kgCO₂e/kg Gas
Wirkungsindikatorwert	kgCO2e/funktioneller Einheit

3.2.3.6 Auswertung

Im letzten Schritt der Ökobilanzierung werden die Erkenntnisse aus Sachbilanz und Wirkungsabschätzung im Kontext des festgelegten Ziels und des Untersuchungsrahmens zusammengeführt, um Schlussfolgerungen, Handlungsansätze oder Empfehlungen abzuleiten (DIN EN ISO 14044:2006; European Commission 2010). Dabei soll die Aufbereitung der Ergebnisse transparent, verständlich und strukturiert erfolgen, um möglichst nachvollziehbar zu sein (DIN EN ISO 14040:2006). Im Wesentlichen geht es bei der Auswertung darum, signifikante Parameter zu identifizieren und zu gewährleisten, dass die Schritte der Ökobilanzierung vollständig und konsistent durchgeführt wurden und die Ergebnisse somit zuverlässig und belastbar sind. Im Fokus der Überprüfung steht eine kritische Prüfung ergebniswirksamer Annahmen bzw. Einschränkungen, die Vollständigkeits- und Konsistenzprüfung verwendeter Methoden und Daten und eine Zuverlässigkeitsprüfung der Ergebnisberechnungen z.B. durch eine Sensitivitätsanalyse (DIN EN ISO 14044:2006). In diesem Zusammenhang sei nochmals erwähnt, dass die Schritte der Ökobilanzierung nicht sequentiell erfolgen müssen, vielmehr kann die Auswertung als iterativer Lernprozess verstanden werden, bei dem Erkenntnisse aus einer Phase es erforderlich machen können, vorgelagerte Schritte erneut zu berechnen. In der DIN EN ISO 14044:2006

steht entsprechend geschrieben, dass zu vorherigen Schritten stets zurückzukehren ist, wenn Schlussfolgerungen in sich nicht stimmig sind. Zur Übersicht über die Beziehung der Auswertungsphase zu den anderen Phasen der Ökobilanz und dem iterativen Prozessablauf siehe das Schema in Abbildung 3.3.



Abbildung 3.3: Die Auswertungsphase in Beziehung zu den anderen Phasen der Ökobilanz (in Anlehnung an DIN EN ISO 14044:2006)

3.2.3.7 Kritische Einordnung der Ökobilanzierung

In der Literatur werden im Wesentlichen zwei LCA-Methoden unterschieden und häufig diskutiert: die Prozessmethode (bottom-up) und die Input-Output-Analyse (top-down). Bei der Prozessmethode werden alle umweltbezogenen Input- und Outputflüsse produktspezifischer Prozesse ermittelt und durch ein Prozessflussdiagramm und die definierte funktionale Einheit quantitativ beschrieben (Kndungu und Molavi 2014; Sonnemann et al. 2004). Im Gegensatz dazu geht der von Leontief (1936) entwickelte topdown Input-Output-Ansatz von einer bestehenden Interdependenz zwischen den Sektoren einer Volkswirtschaft aus und verwendet ökonomische Input-Output-Daten einer Nation in Kombination mit Umweltauswirkungen auf Sektorebene (Bilec et al. 2006; Leontief 1936; Suh et al. 2004). Durch die Verwendung einer ganzen Volkswirtschaft als Systemgrenze sind die Daten allerdings auch nur auf Sektorebene aggregiert, sodass sich dieser Ansatz nicht für einen direkten Vergleich einzelner Produkte oder Produktionsstandorte eignet (Bilec et al. 2006; Suh et al. 2004; Zimmer et al. 2017). Die bottom-up Prozessmethode hat wiederum den Nachteil, dass das Gesamtergebnis der Ökobilanz maßgeblich von der Verfügbarkeit und Qualität der Daten abhängt (Bilec et al. 2006; Hendrickson et al. 1997; Yellishetty et al. 2011; Vigon 1994). Hinzu kommt, dass die Recherche der benötigten Daten mit viel Zeitaufwand verbunden ist (Guinée et al. 1993), da die Primärdaten der Prozesse aufwändig zusammengetragen werden müssen oder häufig gar nicht vorliegen und verschiedenste Quellen konsultiert werden müssen, um das Produktsystem ganzheitlich abbilden zu können (Saygin 2012). Aus diesem Grund ist eine konstant hohe Datengualität schwer zu realisieren und es müssen oft Vereinfachungen bzw. Annahmen getroffen werden. Auch DIN EN ISO 14040:2006 weist diesbezüglich darauf hin, dass es zu Einschränkungen bei der Datenerhebung kommen kann. In diesem Zusammenhang sei betont, dass der mit der Durchführung verbundene zeitliche und finanzielle Aufwand der am häufigsten genannte Kritikpunkt an der Ökobilanz ist (Seuring 1999). Grundsätzlich können die bottom-up und top-down-Methoden auch zu sogenannten hybriden Ansätzen miteinander kombiniert werden (Guinée et al. 2011; Feng et al. 2011). Bei hybriden LCA-Ansätzen wird versucht, die Vorteile der bottom-up und top-down Ansätze so zu koppeln, dass trotz des größeren analysierten Betrachtungsraums ein hoher Detaillierungsgrad erreicht werden kann (Zimmer 2016).

Um den erwähnten zeitlichen und ökonomischen Aufwand von LCAs zu reduzieren, haben sich verschiedene Ansätze zur Vereinfachung entwickelt,

die sich zu sogenannten "Simplified LCAs" (hier: S-LCA³) oder "Streamlining LCA" Ansätzen zusammenfassen lassen (Weitz et al. 1996; Graedel und Saxton 2002). Diese S-LCA-Ansätze werden als vielsprechende Weiterentwicklungen angesehen, da ein deutlich verringerter Aufwand zu vergleichbaren Ergebnissen führt (Lang-Koetz et al. 2006). Dabei sei vor allem erzusätzliche sinnvolle Annahmen ressourcenintensive wähnt. dass Datenerhebung und -verarbeitung ersetzen können (Schmidt und Frydendal 2003). Eine Analyse zu knapp 20 vereinfachten Ansätzen der Ökobilanzierung erfolgte durch Pigosso und Sousa (2011), auf die vertiefend verwiesen wird. Auch Arzoumanidis et al. (2017) haben gezeigt, dass die Nachfrage der Industrie und Wissenschaft nach vereinfachten S-LCAs sehr groß ist. In Scopus und Web of Science gab es dazu im Jahr 2016 ca. 80 neue Beiträge, 2006 waren es nur 12. (Arzoumanidis et al. 2017) Obendrein stellten Hur et al. (2005) fest, dass ein vollständiges LCA nie durchgeführt wird, da bei allen LCAs an irgendeinem Punkt eine Vereinfachung vorgenommen wird.

Insgesamt zeigt sich beim S-LCA, dass unter Vereinfachung hauptsächlich das bewusste Weglassen bestimmter Lebensabschnitte oder die Fokussierung auf ausgewählte Wirkungskategorien gemeint ist (Hochfeld und Jenseits 1998). Das sind vor allem die Wirkungskategorien kumulierter Energieaufwand (KEA) und die Klimaveränderung (Treibhauspotenzial) (Schrack 2016). Um das Problem der kosten- und zeitaufwändigen Durchführung, Datenerfassung und teilweise schlechten Datenqualität zu lösen, werden generische Sachbilanzdaten und Wirkungsabschätzungen bestimmter Softwaresysteme genutzt. Allerdings stößt auch diese Vorgehensweise auf Kritik, da es sich bei diesen Werten um Durchschnittswerte handelt, die das Ergebnis der Studie erheblich beeinträchtigen können. (Lang-Koetz et al. 2006) Bekannte Sachbilanz- und Wirkungsabschätzungsdatenbanken sind

³ Abkürzung hier nicht zu verwechseln mit Social Life Cycle Assessment Ansätzen, in denen soziale Wirkungskategorien in die Bewertung integriert werden (z.B. in Chhipi-Shrestha et al. 2015; Zimmer 2016; Zimmer et al. 2017).

u.a. Ecoinvent, GaBi oder ProBas. Ecoinvent ist ein gemeinnütziger Verein mehrerer Institute der ETH Zürich und von Agroscope, dem Kompetenzzentrums der Schweiz für landwirtschaftliche Forschung (Ecoinvent 2019). GaBi ist eine Software der Firma Thinkstep zur Erstellung von Ökobilanzen (Thinkstep 2019) und ProBas ist eine Datenbank für prozessorientierte Basisdaten des deutschen Umweltbundesamtes (UBA 2015).

3.2.4 Materialflusskostenrechnung (MFKR)

3.2.4.1 Definition und Zielvorgaben

Im Rahmen der Materialflusskostenrechnung (MFKR, engl. Material flow cost accounting - MFCA) werden Materialflüsse- und Bestände sowie der Energieeinsatz in einem Unternehmen erfasst, modelliert und in physikalischen Einheiten (z.B. Masse) quantifiziert. In diesem Zusammenhang werden auch die mit den Material- und Energieflüssen verbundenen Kosten ermittelt. Die grundlegende Idee ist dabei, dass die im betrieblichen Leistungsprozess entstehenden Kosten verursachungsgerecht auf die Outputkategorien "Produkt" und "Non-Produkt" allokiert werden. So wird bei der Anwendung der MFKR das übergeordnete Ziel der Quantifizierung des "Non-Produkt-Output" verfolgt, um Kosten aufzuzeigen, die nicht direkt mit dem Produkt zusammenhängen. Dadurch werden Entscheidungsträgern in Betrieben Möglichkeiten aufgezeigt, wie unterwünschte Umweltauswirkungen reduziert und zugleich Gewinne erwirtschaftet werden können. (DIN EN ISO 14051:2011)

Durch die Anwendung der MFKR kann überdies die Transparenz von Materialflüssen und Energieverbräuchen inklusive damit verbundener Kosten und Umweltaspekte verbessert werden. Durch die gewonnene Transparenz können Material- und Energieverbräuche besser im Betrieb koordiniert und kommuniziert werden. Die MFKR wird von verschiedensten Bereichen wie Verfahrenstechnik, Qualitätssteuerung, Fertigungsplanung oder dem Lieferkettenmanagement zur Entscheidungsunterstützung verwendet. (DIN EN ISO 14051:2011)

3.2.4.2 Elemente der MFKR

Bevor das Vorgehen zur Implementierung einer MFKR beschrieben wird, werden zunächst die grundlegenden Elemente einer MFKR vorgestellt. Nach DIN EN ISO 14051:2011 besteht die MFKR aus (1) Mengenstellen, (2) Materialbilanzen, (3) der Kostenrechnung und (4) einem Materialflussmodell.

(1) Eine **Mengenstelle** stellt einen Prozess oder einen Teil-Prozess dar, für den Input- und Outputflüsse in physikalischen und monetären Einheiten quantifiziert werden. Beispielhaft handelt es sich um Bereiche eines Betriebes, in denen Materialien gelagert oder umgewandelt werden wie Lagerräume, Produktionseinheiten und Verladepunkte. Im Rahmen der MFKR stellt eine Mengenstelle den Ausgangspunkt der Datenerhebung dar; das heißt, zuerst werden Materialflüsse und Energieverbräuche in einer Mengenstelle erfasst, dann werden Material-, Energie-, System- und Abfallmanagementkosten der Mengenstelle ermittelt. (DIN EN ISO 14051:2011)

(2) Mit der **Materialbilanz** wird sichergestellt, dass alle Materialflüsse der einzelnen Mengenstellen erfasst wurden. Material, das in eine Mengenstelle eintritt, verweilt entweder innerhalb der Mengenstelle für einen definierten Zeitraum (z.B. Lager) oder verlässt die Mengenstelle in Form eines Produkts oder als Materialverlust. Da Material und Energie nur umgewandelt und nicht zerstört werden können, sollten die Flüsse in ein System, unter Berücksichtigung der Lagerbestandsänderungen innerhalb des Systems, immer gleich der Flüsse sein, die aus dem System herausgehen. Um sicherzustellen, dass im Rahmen der MFKR keine Materialien fehlen, sollte daher immer eine Materialbilanz erstellen werden, die alle Inputs, Outputs und Änderungen im Lagerbestand miteinander vergleicht. Die Quantifizierung und Sicherstellung einer ausgeglichenen Bilanz gelten als wesentliche Anforderungen der MFKR. (DIN EN ISO 14051:2011) Die folgende Abbildung 3.4 veranschaulicht das Prinzip einer Materialbilanz mit sich verändernden Anfangs- und Endbeständen.





Die Daten der Ein- und Ausgangsflüsse liegen häufig in unterschiedlichen Maßeinheiten vor. Bei der Erstellung der Materialbilanzen kann es daher notwendig sein, diese über Umrechnungsfaktoren in genormte Einheiten zu überführen, um die ein- und ausgehenden Flüsse miteinander vergleichen zu können.

(3) In der **Kostenrechnung** werden alle Kosten, die durch das Ein- oder Austreten eines Materialflusses in eine Mengenstelle verursacht wurden, quantifiziert und diesen Materialflüssen zugeordnet. Bei der Quantifizierung der Kosten wird im Rahmen der MFKR grundlegend zwischen Materialkosten, Systemkosten und Abfallmanagementkosten unterschieden. Außerdem werden auch Energiekosten quantifiziert, die je nach Ermessen des Anwenders entweder den Materialkosten zugerechnet werden, oder separat als vierte Kostenart dargestellt werden können. Im internationalen Standard wird letztere Variante verwendet. (DIN EN ISO 14051:2011)

Bei der Zuordnung der Kosten auf Produkt und Non-Produkt spielt die Wahl des Allokationsverfahren eine entscheidende Rolle. Es sollten zwar jegliche

Kosten, die für einzelne Materialflüsse verfügbar sind, berechnet und nicht anhand von Allokationsverfahren abgeschätzt werden. Allerdings sind vor allem Energie- und Systemkosten häufig nur für den Gesamtprozess oder den ganzen Betrieb verfügbar. In der Praxis ist es daher oft notwendig, diese Kosten in einem ersten Schritt auf einzelne Mengenstellen umzulegen und sie anschließend im zweiten Schritt den Produkten und Non-Produkten zuzurechnen. Bei beiden Schritten ist darauf zu achten, jeweils jenes Allokationskriterium zu wählen, das die verursachungsgerechte Kostenzuweisung so gut wie möglich widerspiegelt. Dabei ist zu berücksichtigen, dass sich die am besten geeigneten Allokationskriterien je nach Kostenart unterscheiden können – sie werden also nicht notwendigerweise für alle Kostenarten dieselben sein. Angemessene Allokationskriterien beim Umlegen der Kosten auf Mengenstellen sind z.B. Maschinenlaufzeit, Anzahl durchgeführter Arbeitsschritte, Produktionsumfang, Anzahl der Angestellten oder Arbeitsstunden. Für den zweiten Schritt, der Allokation der Kosten von einer Mengenstelle zu Produkten und Non-Produkten, wird häufig die prozentuale Materialverteilung der Hauptmaterialien oder die prozentuale Gesamtmaterialverteilung gewählt.

Abbildung 3.5 zeigt exemplarisch die Kostenrechnung für die zuvor eingeführte Mengenstelle und Materialbilanz. Von den 100 kg eingesetzten Materials (95 kg + 15 kg – 10 kg) werden 70 kg zu einem Produkt verarbeitet und 30 kg sind Materialverlust, also Non-Produkt. Um nun die Kosten in der Mengenstelle dem Produkt und Non-Produkt Output zuzuordnen, wird der prozentuale Gesamtmaterialverteilungsschlüssel gewählt. Die Material-, Energie- und Systemkosten werden somit im Verhältnis 70 % zu 30 % gemäß der Gewichtsverteilung zwischen Produkt und Non-Produkt zugeordnet. Nicht aufteilt werden die Abfallmanagementkosten, die gemäß der EN ISO 14051 immer dem Materialverlust zuzuschreiben sind, da diese Kosten allein durch diesen Materialfluss verursacht werden. (DIN EN ISO 14051:2011)



Abbildung 3.5: Beispiel einer Kostenberechnung in einer Mengenstelle (in Anlehnung an DIN EN ISO 14051:2011)

In der Regel erfolgt die MFKR über mehrere Prozesse, d.h. über eine Mengenstelle hinaus. Dabei stellt der Output einer Mengenstelle den Input einer anderen Mengenstelle dar. Bei der Übertragung von Kosten in eine folgende Mengenstelle wird unterschieden, ob die folgende Mengenstelle ein gewöhnlicher Prozess oder ein Wiederaufbereitungsprozess ist. Falls keine Wiederaufbereitung betrachtet wird, ergeben sich die Kosten einer zweiten Mengenstelle durch das Übertragen der Produktkosten der ersten Mengenstelle, in Form der berechneten Material-, Energie- und Systemkosten, und das Hinzurechnen der System-, Energie- und Abfallmanagementkosten der zweiten Mengenstelle. Falls in die zweite Mengenstelle neues Material eingeht, müssen dessen Materialkosten hinzuaddiert werden. (DIN EN ISO 14051:2011) Bei der Kostenübertragung in Mengenstellen, die eine interne Wiederaufbereitung darstellen, muss nach DIN EN ISO 14051:2011 noch Folgendes berücksichtigt werden:

- intern rezykliertes Material wird mit dem Einkaufswert des substituierten Materials bewertet, wodurch Kostenersparnis berücksichtigt wird;
- zusätzliche Kosten f
 ür den Wiederaufbereitungsprozess;

 zusätzliche Kosten in anderen Mengenstellen, die ggf. durch den Fluss des wiederaufbereiteten Materials verursacht werden.

(4) Im **Materialflussmodell** wird der Gesamtmaterialfluss innerhalb der für die MFKR gewählten Grenzen visualisiert. Das Modell bildet somit alle Herstellungs-, Wiederaufbereitungs- und sonstige Prozesse bzw. Mengenstellen ab, in denen Material verarbeitet oder aufbewahrt wird, und zeigt wie sich die Materialien zwischen diesen Mengenstellen bewegen. Auf diese Weise geben Materialflussmodelle einen guten Überblick, über die Pfade der Materialien durch das gesamte Unternehmen. Abbildung 3.6 zeigt ein exemplarisches Materialflussmodell in Sankey-Form für einen Betrieb mit fünf verschiedenen Mengenstellen. Im Unterschied zu den anderen Mengenstellen, stellt Mengenstelle 3 einen innerbetrieblichen Aufbereitungsprozess für Reststoffe dar.



Abbildung 3.6: Beispiel eines Materialflussmodells

3.2.4.3 Implementierungsschritte

Die DIN EN ISO 14051:2011 gliedert die Implementierung einer MFKR in 10 Schritte, die übereinstimmend mit dem PDCA-Kreislauf (Plan Do Check Act) zur kontinuierlichen Verbesserung entworfen wurden (vgl. Abbildung 3.7). Die Phasen 1 bis 10 werden anhand der DIN EN ISO 14051:2011 erläutert.



Abbildung 3.7: Implementierungsschritte der MFKR gemäß des PDCA-Kreislaufs (in Anlehnung an DIN EN ISO 14051:2011)

1. Im ersten Schritt muss das Management eines Unternehmens den Aufwand und Nutzen einer MFKR abwägen. (DIN EN ISO 14051:2011) Dabei spielt u.a. die Branche des Unternehmens und die Höhe der Materialkosten eine Rolle. Der Einsatz einer MFKR ist besonders bei Unternehmen des verarbeitenden Gewerbes zu empfehlen, bei denen der Materialkostenanteil größer als 40 % ist. Grundsätzlich ist zu beachten, dass der Aufwand für eine MFKR mit der Größe des Unternehmens und mit der Komplexität des Produktionsbetriebs steigt. Je mehr Abteilungen, Personen und Prozesse involviert sind, desto größer ist der Aufwand für die Durchführung bzw. die Datensammlung. Allerdings können gerade bei sehr großen Unternehmen durch die Erhöhung der Prozesstransparenz Ineffizienzen aufgezeigt werden. (Schrack 2016)

2. Im zweiten Schritt werden notwendige Fach- und Sachkenntnisse über die zu analysierenden Prozesse gesammelt. Dazu bietet sich die Bildung eines Projektteams an, das sich mit Personen aus verschiedenen Unternehmensbereichen zusammensetzt, die Fachwissen in Bereichen wie Produktionstechnik, Chemie, Qualitätsmanagement, Ein- und Verkauf oder Controlling aufweisen.

3. Im dritten Schritt gilt es, das zu analysierende System zu definieren. Die Systemgrenze kann einen einzelnen Prozess, mehrere Prozesse, das ganze Unternehmen oder die gesamte Lieferkette umfassen. Bei Betrachtung der gesamten Lieferkette muss allerdings eine ausreichende Kommunikation und Zusammenarbeit zwischen den Unternehmen der Lieferkette sichergestellt sein und alle Unternehmen sollten der Auswahl der Umsetzungsschritte zustimmen. Neben der Systemgrenze sollte auch ein Zeitraum für die Datensammlung festgelegt werden. Dieser sollte ausreichend groß sein, damit bedeutende Prozessabweichungen oder saisonale Schwankungen in den Daten Berücksichtigung finden. Je nach Analyse können dies ein bis sechs Monate oder ein ganzes Jahr sein.

4. Im vierten und letzten Schritt der Planungsphase werden die Mengenstellen bestimmt. Die Art und Anzahl der zu betrachtenden Mengenstellen hängen von den zur Verfügung stehenden Daten ab. Sind für komplexe Prozesse nur wenig Daten vorhanden, so wird es sinnvoll sein, diese nicht detaillierter zu betrachten, sondern als eine Mengenstelle zu definieren. Existieren jedoch für einige relevante Teilprozesse spezifische Informationen, bietet es sich an, entsprechend weitere Mengenstellen einzurichten.

5. Mit dem fünften Schritt beginnt die Ausführungsphase, in der die In- und Outputs für jede Mengenstelle bestimmt werden. Dabei steht vor allem die Differenzierung zwischen Produkt- und Non-Produkt-Output im Vordergrund. Auf Basis der Materialflüsse aller Mengenstellen können die Materialflüsse zwischen den Mengenstellen auch miteinander verknüpft werden, sodass die Materialflüsse über alle Mengenstellen hinaus auch in ihrer Gesamtheit bewertet werden können. 6. Im sechsten Schritt werden die In- und Outputflüsse in physikalischen Einheiten quantifiziert, damit Materialflüsse vereinheitlicht oder leicht umgerechnet werden können. Je nach Art des Materials sind typische Einheiten z.B. Länge, Gewicht, Stückzahl oder Volumen. Auf diese Weise können für jede Mengenstelle Materialbilanzen erstellt werden, anhand derer Ineffizienzen durch fehlende Mengen identifiziert werden können.

7. Im siebten Schritt werden die In- und Outputflüsse auch in monetären Einheiten quantifiziert. Für jeden In- und Output einer Mengenstelle werden Material-, Energie- und Systemkosten bestimmt. Für die Bestimmung der Materialkosten existieren verschiedene Ansätze wie historische Kosten bzw. Anschaffungskosten, Standardkosten oder Wiederbeschaffungskosten, die als Grundlage der Kostenquantifizierung herangezogen werden können. Die o.g. Norm empfiehlt den Ansatz zu wählen, der bereits im Rahmen bestehender Kostenrechnungsverfahren im Unternehmen verwendet wird. Die Materialkosten für die In- und Outputflüsse werden bestimmt, indem der physikalische Betrag des Materialflusses mit den Stückkosten des Materials multipliziert wird. Anschließend werden die Materialkosten anhand von Allokationskriterien (s.o., z.B. massebasiert) auf Produkt- und Non-Produkt aufgeteilt. Bei der Bestimmung der Energiekosten einer Mengenstelle tritt häufig der Fall ein, dass diese für einzelne Mengenstellen nicht bekannt oder schwierig zu messen sind. Die Gesamtenergiekosten werden dann analog zu den Materialkosten anhand geeigneter Allokationskriterien auf Produktund Non-Produkt verteilt. Alle anderen Kosten, die nicht in den Material-, System- oder Abfallmanagementkosten enthalten sind, die aber durch die innerbetriebliche Handhabung von Materialflüssen verursacht werden, werden durch die Systemkosten erfasst. Darunter fallen Kosten für Arbeit (Lohn), Wartung, Transport und Abschreibungen. Sind die Systemkosten für einzelne Mengenstellen unbekannt, müssen die Gesamtsystemkosten ausgewählten Mengenstellen zugeordnet werden und dann anhand von Allokationskriterien entsprechend auf Produkt und Non-Produkt-Output verteilt werden. Alle Kosten, die mit dem Umgang mit Materialverlusten in Verbindung stehen, werden den *Abfallmanagementkosten* zugeordnet. Sind auch in diesem Fall nur die gesamten Abfallmanagementkosten verfügbar, müssen diese analog zu oben ausgewählten Mengenstellen zugeordnet und auf die Non-Produkt-Outputs allokiert werden.

8. Im achten Schritt werden die durch die MFKR ermittelten Daten zusammengefasst und ausgewertet werden. Dazu bieten sich Materialfluss-Matrizen bzw. -Tabellen oder -Diagramme wie in Abbildung 3.8 an, anhand derer weitere Auswertungen erfolgen können. Durch die Auswertung der ermittelten Daten können schließlich diejenigen Mengenstellen identifiziert werden, die bedeutsame kosten- und umweltbezogene Non-Produkt-Outputs verursachen.

	Mengenstelle 1: Stanzen				Mengenstelle 2: Reinigen					
	Masse [kg/ Outputeinheit]	Material- kosten [€/OE]	Systemkosten inklusive Energiekosten [€/OE]	Abfall- management- kosten [€/OE]	Gesamtkosten [€/OE]	Masse [kg/ Outputeinheit]	Material- kosten [€/OE]	Systemkosten inklusive Energiekosten [€/OE]	Abfall- management- kosten [€/OE]	Gesamtkosten [€/OE]
Material- einsätze vorheriger MS		/				0,384	0,283	0,094	\nearrow	0,354
Neue Material- einsätze	0,530	0,387	0,130	-0,031	0,485	0,074	0,008	0,021	0,002	0,032
Produkte	0,384	0,283	0,094	\nearrow	0,354	0,384	0,008	0,021	\nearrow	0,029
Non-Produkt Output	0,007	0,104	0,035	-0,031	0,130	0,007	0,0001	0,0004	0,002	0,0025
Gesamtkosten des Prozesses	\nearrow	0,387	0,130	-0,031	0,485	\sum	0,299	0,136	0,002	0,386

Abbildung 3.8: Materialflusskostenmatrix zweier Mengenstellen (in Anlehnung an DIN EN ISO 14051:2011)

9. Im neunten Schritt wird die Kommunikation der Ergebnisse der MFKR thematisiert. In der Regel werden die Ergebnisse unternehmensintern adressiert, da die Aufdeckung von Ineffizienzen im Unternehmen im Vordergrund steht. Allerdings bietet es sich für ausgewählte Ergebnisse ebenso an, diese in Umwelt- oder Nachhaltigkeitsberichten der breiten Öffentlichkeit zugänglich zu machen (Schrack 2016). So können die Ergebnisse beim Dialog mit externen Stakeholdern unterstützen, um den Zusammenhang zwischen der Umweltleistung des Unternehmens und der Materialverwendung darzustellen.

10. Im letzten Schritt werden Umsetzungsmaßnahmen zur Verbesserung der Material- und Energieeffizienz abgeleitet. Diese sollte den Austausch oder die Substitution von Materialien, die Änderung von Prozessen, Produktionslinien oder Produkten oder das Neudesign eines Produktsystems umfassen. Die Daten der MFKR oder das Materialflussmodell können dazu verwendet werden, die Kosten-Nutzen-Analyse der möglichen Maßnahmen zu unterstützen.

3.2.4.4 Kritische Einordnung der MFKR und Abgrenzung zur konventionellen Kostenrechnung

Bei der klassischen Kostenrechnung werden sämtliche Material- und Prozesskosten ausschließlich dem Produkt zugewiesen. Materialverluste werden zwar aufgeführt, jedoch nicht die damit in Zusammenhang stehenden Kosten. Diese werden entweder in die Produktkosten oder in übergeordnete Kosten integriert. Klassische Kostenansätze können die Kosten von Materialverlusten und Prozessineffizienzen somit nicht aufzeigen, da keine Kennzahlen für Material- und Energieflüsse existieren, die nicht im Produkt resul-Materialverlustkosten tieren. Die MFKR hingegen kann und Prozessineffizienzen ermitteln und darüber hinaus auch Informationen über mögliche Einsparungen und Effizienzgewinne der im Produkt eingesetzten Materialien liefern. Um die Leistungsfähigkeit des MFKR-Ansatzes noch weiter zu erhöhen, wird noch spezifischer in Energie-, System- und Abfallmanagementkosten unterschieden. (DIN EN ISO 14051:2011)

Wie beschrieben bezieht sich der ökologische Aspekt der MFKR nach DIN EN ISO 14051 allerdings nur auf die mögliche Einsparung von Rohstoffen und Energie auf Basis identifizierter Ineffizienzen. Durch diese Effizienzverbesserungen werden indirekt auch Emissionen in die Umwelt reduziert, die bei der Bereitstellung dieser Ressourcen entstehen. Eine explizite Bilanzierung bzw. Berechnung der während der Produktion verursachten THG-Emissionen oder anderer Wirkungskategorien auf die Umwelt fehlt jedoch. Eine dahingehende Erweiterung kann z.B. durch die Kombination der MFKR mit der Ökobilanz nach DIN EN ISO 14040 und 14044 erfolgen. Eine ausführlichere Diskussion dazu erfolgt in Kapitel 3.5.3.

3.2.5 Lebenszykluskostenrechnung (LCC)

Die Lebenszykluskostenrechnung (engl. Life Cycle Costing - LCC) ist eine Methode des Kostenmanagements, mit der eine Kostenbewertung nicht nur prozess- oder standortbezogen, sondern über den gesamten Lebenszyklus eines Produkts erfolgt. Sämtliche Kosten, die während der Lebensdauer des Produkts anfallen, ergeben kumuliert die Lebenszykluskosten (Faßbender-Wynands 2002). Beim LCC handelt es sich allerdings nicht um eine Kostenrechnungsmethode, sondern um eine Bewertungsmethode (Klöpffer 2008). Auch wird das LCC gewöhnlich nicht der Umweltkostenrechnung zugeordnet, allerdings ist eine Bedeutung des LCCs für die Umweltkostenrechnung nicht abzustreiten, da die Leitidee des LCCs einer Analyse des Produktlebenszyklus und einer umweltgerechten Gestaltung von Produkten folgt (Günther et al. 2005). Die Lebenszykluskostenrechnung wird im Wesentlichen zur Planung von Großprojekten, zur Wirtschaftlichkeitsanalyse von Produkten oder als Entscheidungshilfe zur Auswahl zwischen Investitionsalternativen verwendet. (Kádárová et al. 2015; DIN EN 60300-3-3; Coenenberg et al. 2016) Neben dem Begriff Lebenszykluskostenrechnung bzw. Life Cycle Costing werden in der Literatur häufig auch die Bezeichnungen "Product Life Cycle Costing", "Life Cycle Cost Analysis" und "Lebenszyklusrechnung" synonym verwendet (Blanchard 1978; Riezler 1996). Günther (2008) fasst die Vorgehensweise des LCC, die auch in der DIN EN 60300-3-3 in gleicher, aber etwas ausführlicheren Weise definiert wird, folgendermaßen zusammen:
- (1) Zielfestlegung
- (2) Identifikation möglicher Alternativen
- (3) Erfassung der notwendigen Informationen
- (4) Festlegung der Zielkosten
- (5) Ergebnisanalyse

Zunächst ist das Ziel der LCC-Analyse zu formulieren. Häufig handelt es sich hierbei um die Festlegung der Funktion oder Leistung, die ein zu erwerbendes Investitionsgut erbringen soll. Anhand der Funktionen bzw. Leistungen lassen sich anschließend Alternativen ermitteln, für die der Vergleich der Lebenszykluskosten stattfinden soll. Des Weiteren müssen Ressourcen festgelegt, Annahmen und Einschränkungen formuliert und entsprechende Finanzparameter, wie die Steuer, Inflation oder das Basisjahr, festgelegt werden. Anschließend lassen sich die notwendigen Informationen für die Kostenberechnung erfassen, wie Ein- und Auszahlungen sowie deren Höhe und Zeitpunkt über den Lebenszyklus hinweg. Hier empfiehlt es sich, mit einer Kostenaufbruchstruktur⁴ zu arbeiten, um eine Übersicht über alle anfallenden Kosten zu erhalten und sie den verschiedenen Kostenarten zuordnen zu können (Chu Hui und Mohammed 2015). Außerdem sind ungewisse Bereiche zu bestimmen, welche mittels einer Risikobeurteilung genauer untersucht oder deren Auswirkung durch Sensitivitätsanalysen ermittelt werden können. Danach werden die Zielkosten, die in den verschiedenen Phasen des Lebenszyklus zu erfüllen sind, festgelegt. Diese werden entsprechend der DIN EN 60300-3-3 bereits in der Zielfestlegung definiert. Nach der Berechnung der im gesamten Lebenszyklus anfallenden und diskontierten Kosten können die Ergebnisse analysiert und das Lebenszyklusmodell bewertet werden. Damit lassen sich Folgetätigkeiten aufgrund der Ergebnisse definieren, zum Beispiel die Entscheidung für eine Alternative oder die Ermittlung

⁴ Siehe vertiefend z.B. Kostenaufbruchstruktur nach Lebenszyklusphasen im Anhang der DIN EN 60300-3-3.

eines Kostentreibers. Außerdem lassen sich auch Maßnahmen zur Verbesserung der LCC-Analyse treffen. (Günther 2008)

Die Bewertung der Lebenszykluskosten kann aus unterschiedlichen Perspektiven heraus erfolgen. Eine Perspektive stellt die Kunden- bzw. Konsumentensicht zur Unterstützung einer Kaufentscheidung dar. Vor allem aus Kundensicht ist das LCC sehr interessant, da es Kunden ermöglicht, zwischen den Anfangs- und Folgekosten Trade-offs zu erkennen und auf diese Weise die kostengünstigste Alternative zu wählen (Günther und Kriegbaum 1999). Die Herstellungsprozesse des Produkts werden dabei als *Black Box* betrachtet, sodass hauptsächlich die Kosten und Erlöse der Produktnutzung, wie Anschaffungskosten, Betriebs- und Energiekosten oder Instandhaltungskosten im Fokus stehen. Die Durchführung eines LCC empfiehlt sich insbesondere dann, wenn das Produkt mit hohen Anschaffungs- oder Folgekosten verbunden ist und gleichzeitig eine hohe Lebensdauer aufweist (Wuebbenhorst 1984). Diese Art von LCC ist auch unter der Bezeichnung Total Cost of Ownership (TCO) bekannt.

Eine andere Perspektive ist die Sicht des Herstellers, der den gesamten Lebenszyklus, von der Entwicklung, über die Rohstoffentnahme, der Verarbeitung und Nutzung bis hin zur Entsorgung, bewerten möchte. Im Unterschied zum Kunden sind für den Hersteller jedoch vor allem die Kosten des Herstellungsprozesses interessant. Für eine detaillierte Analyse und Optimierung der Prozesskosten ist laut Schrack (2016) die oben vorgestellte und später angewendete Materialflusskostenrechnung jedoch besser geeignet. Für Hersteller besteht auch die Möglichkeit, das LCC im Rahmen der Berechnungen von Maschinenkostensätzen zu verwenden, um auf diese Weise die gesamten Kosten einer Maschine zu berücksichtigen. Bornschlegl et al. (2015) führten diesbezüglich ein Lebenszykluskostenmodell zur Bewertung der Kosten von Maschinen unter Einbezug des Zeitwertes des Geldes ein, das später auch in dieser Arbeit Berücksichtigung finden wird (vgl. Kapitel 6.3.2.3).

3.3 Grundlagen und Diskussion der multikriteriellen Entscheidungsanalyse

3.3.1 Grundlagen

Durch die Berücksichtigung sowohl ökologischer als auch ökonomischer Ziele ergeben sich komplexe, multikriterielle Problemstellungen für deren Lösung Entscheidungsträger methodische Unterstützung benötigen, um fundierte Entscheidungen treffen zu können. Eine solche Eingliederung von ökologischen, ökonomischen und weiteren Entscheidungsmerkmalen in ein Entscheidungsunterstützungsmodell gilt als sinnvoll, da so ökonomisch-ökologische Interdependenzen mathematisch abgebildet werden können. Außerdem können gesammelte Daten in brauchbare Informationen und Produktkenntnisse umgewandelt werden. (Karakoyun und Kiritsis 2014) Für die Lösung derartiger Entscheidungsprobleme werden Ansätze der multikriteriellen Entscheidungsunterstützung (engl. Multi Criteria Decision Making -MCDM) eingesetzt. (Hwang und Masud 1979; Hwang und Yoon 1981; Zimmermann und Gutsche 1991; Belton und Stewart 2002; Stewart 1992; Götze und Bloech 2002; Walther 2010; Greco et al. 2016). Dabei wird aus einer Menge möglicher Entscheidungsoptionen entweder die beste Option, eine Teilmenge guter Optionen oder eine Rangfolge der Optionen von der besten bis zur schlechtesten, ermittelt (Roy und Bouyssou 1993).

Je nach Art der Problemstellung wird beim MCDM grundsätzlich zwischen zwei Klassen unterschieden. Dem Multi-Attribute Decision Making - MADM (dt. multiattributive Entscheidungsmodelle) und dem Multi-Objective Decision Making - MODM (dt. multi-objektive Entscheidungsfindung). Beim MADM liegen die möglichen Entscheidungs- bzw. Handlungsalternativen bereits vor, sodass aus einer diskreten (endlichen) Menge an Handlungsalternativen, unter Berücksichtigung mehrerer Attribute (Entscheidungskriterien), eine geeignete Handlungsalternative ausgewählt wird (Triantaphyllou et al. 1998). Im Unterschied zum MADM ist die Menge möglicher Handlungsalternativen beim MODM unendlich. Es gibt also einen kontinuierlichen Lösungsraum mit einer Vielzahl an möglichen Handlungsalternativen. Eine geeignete Handlungsalternative kann dabei nur durch mathematische Modelle ermittelt werden. In der Regel wird mittels Methoden der linearen Programmierung auf Basis von Zielfunktionen und unter der Berücksichtigung von Nebenbedingungen ein optimales Ergebnis berechnet. (Hwang und Masud 1979; Hwang und Yoon 1981; Zimmermann und Gutsche 1991; Hillier et al. 2005). Für tiefere Einlicke in das MODM wird auf Fachliteratur wie z.B. Beckmann et al. (1975), Roijers und Whiteson (2017) oder Walther (2010) verwiesen.

Im Kontext dieser Arbeit wird im Folgenden ausschließlich näher auf die Methoden des MADM eingegangen, da die Anzahl der möglichen Konfigurationen einer Wertschöpfungskette diskret ist und sich somit in einem endlichen Lösungsraum befindet. Durch die jeweilige, gegebene Anzahl der zur Verfügung stehenden Materiallieferanten, Fertigungstechniken der Weiterverarbeitung und Produktnutzungsmöglichkeiten kann die Menge theoretisch möglicher Konfigurationen durch Kombinatorik berechnet werden, die ggf. durch technische Restriktionen weiter eingegrenzt wird.

3.3.2 Multiattributive Entscheidungsmodelle (MADM)

Ziel der MADM-Verfahren ist es, aus einer diskreten, klar voneinander abgrenzbaren Menge bekannter Alternativen, die Alternativen zu identifizieren, die den Präferenzen des Entscheidungsträgers am besten entsprechen (Geldermann und Lerche 2014; Zimmermann und Gutsche 1991). Die Ziele des Entscheidungsträgers werden anhand von Kriterien festgelegt, die als Entscheidungs- bzw. Bewertungskriterien zur Bewertung der Alternativen herangezogen werden. Jede Alternative wird dann bezüglich der einzelnen Kriterien beurteilt. Die Kriterien werden zudem gewichtet, wodurch die subjektive Wertvorstellung des Entscheidungsträgers ausgedrückt werden kann. Für die Gesamtbewertung einer Alternative auf Basis der Kriterienbewertung und Gewichtung existieren verschiedene mathematische Aggregationsmodelle, die angewendet werden können. (Zimmermann und Gutsche 1991) Bei den Methoden wird im Allgemeinen zwischen zwei Schulen des MADM unterschieden: klassische Ansätze der amerikanischen Schule und Outranking-Ansätze der europäischen Schule (vgl. Tabelle 3.2) (Geldermann und Rentz 2001; Geldermann und Lerche 2014).

	Amerikanische Schule	Europäische Schule
Grundsätzliche Annahmen	Der Entscheidungsträger kann seine Präferenz klar for- mulieren	Der Entscheidungsträger ist sich seiner Präferenzen nicht vollständig bewusst und kann diese nicht eindeutig ausdrücken
Ziel	Offenlegung und Interpretation der Einstellung und Präferenzvorstellung des Entscheidungsträgers	Unterstützung des Entscheidungsprozesses durch die Verarbeitung widersprüchlicher Informationen und der Darstellung des Ein- flusses unterschiedlicher Kriterien-Gewich- tungen
Methoden	Weighted Sum Method Nutzwertanalyse AHP	ELECTRE TOPSIS PROMETHEE

 Tabelle 3.2:
 Abgrenzungen MADM Methoden amerikanischer und europäischer Schule (in Anlehnung an Oberschmidt 2010)

Klassische Methoden der amerikanischen Schule basieren auf der Annahme, dass sich der Entscheidungsträger seiner Präferenzen bewusst ist und diese in einer Nutzenfunktion dargestellt werden können (Geldermann und Lerche 2014). Auf Basis der Nutzenfunktion kann jeder Ausprägung, die eine Alternative hinsichtlich eines Kriteriums aufweist, ein Nutzwert zugeordnet werden. Mittels dieser ermittelten Teilnutzwerte kann durch Addition aller Teilnutzwerte einer Alternative ein Gesamtnutzwert je Alternative berechnet werden. Die Alternative mit dem höchsten Gesamtnutzwert ist die zu präferierende Alternative, da sie über sämtliche Kriterien hinweg am besten den Präferenzen des Entscheidungsträgers entspricht. (Oberschmidt 2010) Häufig verwendete Verfahren sind die Nutzwertanalyse (MAUT/MAVT -Multi Attribute Utility/Value Theory), der Analytische-Hierarchie-Prozess (AHP) oder die Weighted Sum Methode (Walther 2010; Zimmermann und Gutsche 1991).

Diese klassischen Ansätze zeichnen sich dadurch aus, dass sie einfach nachzuvollziehen sind, weshalb sie den europäischen Methoden in der Praxis noch häufig vorgezogen werden (Oberschmidt et al. 2010). Andererseits weisen die klassischen Ansätze auch eine Reihe an Nachteilen auf:

- Die Annahme, dass Präferenzen durch eine Nutzenfunktion abgebildet werden können, spiegelt die Realität nur unter sehr restriktiven Bedingungen wider (Figueira et al. 2005).
- Durch die Aggregation der Teilnutzwerte herrscht großer Informationsverlust, so ist zum Beispiel eine vollständige Kompensation von Kriterien möglich (Geldermann und Lerche 2014). Auf diese Weise könnte eine Alternative am Ende den höchsten Nutzwert aufweisen, auch wenn sie bei einem Kriterium die schlechteste Ausprägung im Vergleich aller Alternativen hätte.
- Zugleich gilt es als fraglich, ob der Entscheider stets um seine Präferenzen weiß und diese auch korrekt wiedergeben kann (Geldermann und Lerche 2014).

Um diese Kritikpunkte zu überwinden, wurden in Europa die Outranking-Verfahren entwickelt. Diese fußen auf der gegensätzlichen Annahme, dass sich der Entscheidungsträger seiner Präferenzen nicht eindeutig bewusst ist und seine Präferenzen somit nicht exakt abbilden kann (Geldermann und Lerche 2014). Ziel dieser Outranking-Verfahren ist es, Informationen zur Entscheidungsfindung zu generieren, zu verarbeiten und den Entscheidungsprozess zu strukturieren, um diesen für den Entscheidungsträger transparenter zu gestalten (Oberschmidt 2010). Transparenz wird vor allem im Vergleich der Alternativen zueinander geschaffen, indem diese paarweise pro Kriterium miteinander verglichen werden. Im Wesentlichen können die folgenden Vorteile der Outranking-Methoden gegenüber den klassischen Ansätzen herausgestellt werden:

- Eine vollständige Kompensation der Kriterien kann vermieden werden. So ist es möglich, Regeln zu implementieren mit denen festgelegt werden kann, dass eine Kompensation nur möglich ist, wenn die Differenzen der Kriterien-Ausprägungen definierte Schwellenwerte nicht über- oder unterschreiten. (French et al. 2009; Geldermann et al. 2000)
- Für die Auswahl der optimalen Alternative werden weniger Informationen vom Entscheidungsträger als bei den klassischen Verfahren benötigt, und quantitative und qualitative Kriterien können simultan einbezogen werden (Haralambopoulos und Polatidis 2003; Loken 2007).
- Bei der Abbildung der Rangfolge der Alternativen können strikte Präferenz, schwache Präferenz, Indifferenz und Unvergleichbarkeiten zwischen den Alternativen dargestellt werden (Rogers und Bruen 1998; Topcu und Ulengin 2004; Roy 1980).
- Unsichere Informationen können durch Wahrscheinlichkeiten und Schwellenwerte berücksichtigt werden. Das ist vor allem vorteilhaft, wenn keine strikten Präferenzen angegeben werden können (Araz et al. 2007; Haralambopoulos und Polatidis 2003; Loken 2007; Ren et al. 2009).
- Im Vergleich zu klassischen AHP-Ansätzen müssen die paarweisen Vergleiche nicht von den Entscheidungsträgern durchgeführt werden. Darüber hinaus sind die Vergleiche nicht auf Saaty's neunstufige Skala begrenzt (Albadvi et al. 2007; Anand und Kodali 2008).

Zu den bekanntesten Outranking-Methoden gehören ELECTRE, TOPSIS und PROMETHEE (Loken 2007; Geldermann und Lerche 2014; Oberschmidt 2010).

3.3.3 Methodenauswahl

Die obige Diskussion zeigt, dass sowohl die klassischen (amerikanischen) als auch die modernen (europäischen) Ansätze des MADM Vor- und Nachteile aufweisen. Um je nach Anwendungsfall und Präferenzen des Modellanwenders ein geeignetes Verfahren zur Entscheidungsfindung auswählen zu können, werden in dem zu entwickelnden Entscheidungsunterstützungssystem sowohl ein klassisches als auch ein modernes Verfahren implementiert.

Methodenunabhängig erfolgt beim MADM stets ein Schritt der Zielgewichtung. Dabei werden die zu bewertenden Kriterien nach den Präferenzen eines Entscheiders gewichtet, um unter den möglichen Lösungen eines Lösungsraums die beste Lösung unter Berücksichtigung der Kriteriengewichtungen zu identifizieren (vgl. Kapitel 3.3.2). Allerdings können im diskreten Lösungsraum des MADM bereits einige Lösungen existieren, die andere Lösungen dominieren. Diese Menge der dominanten bzw. optimalen Lösungen kann durch das Konzept der *Pareto Optimalität* nach Vilfredo Pareto bestimmt werden (Marler und Arora 2004). Vor der Anwendung der MADM-Verfahren werden also zunächst die pareto-optimalen Lösungen bzw. Wertschöpfungskettenkonfiguration en bestimmt (vgl. Anwendungsbeispiel in Kapitel 8.2.4). Auf diese Weise gehen nur die besten Lösungen in die Entscheidungsfindung ein und durch den reduzierten Rechenaufwand können schneller Ergebnisse erzielt werden.

Unter den klassischen Verfahren gilt die *Weighted Sum Method (WSM)*, auch bekannt als Simple Additive Weighting Method (SAW) (Afshari et al. 2010), als eine populäre Methode zum Lösen multiattributiver Entschei-

dungsprobleme, die in einer Vielzahl von Anwendungsfällen eingesetzt werden kann (Kim und Weck 2005). Durch die vielfältigen Einsatzmöglichkeiten und zahlreichen Anwendungen, beispielsweise in Koski (1988), Schy und Giesy (1988) und Kim und Weck (2005), gilt die WSM als die am weitesten verbreitete Methode im Bereich des MADM (Hwang und Yoon 1981; Chang und Yeh 2001; Virvou und Kabassi 2004; Chou et al. 2008) Wegen ihrer weiten Verbreitung und des hohen Bekanntheitsgrades wird die WSM auch in der vorliegenden Arbeit als ein klassisches MADM-Verfahren zur Entscheidungsfindung eingesetzt.

Im Rahmen der europäischen Outranking-Ansätze haben in den letzten Jahren insbesondere die Verfahren ELECTRE (Eliminiation Et Choice Translation Reality) (Roy 1991) und PROMETHEE (Preference Ranking Organisation Method for Enrichment Evaluation) (Brans 1982) an Bedeutung gewonnen (Spengler 1998; Oberschmidt et al. 2010). Spengler (1998) analysiert bezüglich beider Verfahren, dass der große Nachteil von ELECTRE gegenüber PRO-METHEE im Einsatz von Schwellenwerten besteht. Würde eine Entscheidungsalternative einen zuvor definierten Schwellenwert in einem Kriterium überschreiten, so würde diese Alternative dominiert werden. Eine Kompensation wäre somit nicht möglich. Das ist vor allem nachteilig, da Schwellenwerte oftmals willkürlich festgelegt werden. (Spengler 1998) Vor allem im Hinblick auf die in dieser Arbeit betrachteten THG-Emissionen ist es schwierig, markt- und branchenspezifische Schwellenwerte für Produkte festzusetzen. Aufgrund der zunehmenden Bedeutung von ELECTRE und PROMETHEE gegenüber TOPSIS, und der methodischen Überlegenheit von PROMETHEE im Hinblick auf den Anwendungsfall dieser Arbeit, wird als Outranking-Verfahren die PROMETHEE-Methode für das zu entwickelnde Entscheidungsunterstützungssystem ausgewählt.

3.3.4 Pareto-Optimum

Die Pareto-Optimalität wird wie folgt definiert (Pareto 1906): Ein Punkt $x^* \in X$ ist pareto-optimal, falls kein anderer Punkt $x \in X$ existiert, für den $F(x) \leq F(x^*)$ und $F_i(x) \leq F_i(x^*)$ für mindestens eine Funktion gilt. Ein Punkt ist also pareto-optimal, falls keine weiteren Punkte existieren, die mindestens einen Zielfunktionswert verbessern, ohne einen anderen Zielfunktionswert zu verringern. (Marler und Arora 2004; Ngatchou et al. 2005; Coello et al. 2002)



Abbildung 3.9: Mögliche Konfigurationsalternativen einer Wertschöpfungskette zur Herstellung eines Bauteils – Darstellung pareto-optimaler und sonstiger Lösungen

Übertragen auf den Anwendungsfall dieser Arbeit (vgl. Abbildung 3.9) beschreibt jeder Punkt eine mögliche Lösung bzw. mögliche Wertschöpfungskettenkonfiguration. Eine Wertschöpfungskettenkonfiguration x_1 ist pareto-optimal, wenn keine andere Kette $x \in X$ existiert, für die Herstellkosten $(x) \leq$ Herstellkosten (x_1) und THG-Emissionen $(x) \leq$ THG-Emissionen (x_1) gilt, also wenn keine andere Wertschöpfungskettenkonfiguration existiert, für die

1. die Herstellkosten gesenkt werden können, ohne dass sich die THG-Emissionen erhöhen,

oder

2. die THG-Emissionen verringert werden können, ohne dass sich die Herstellkosten erhöhen.

Alle pareto-optimalen Punkte liegen auf der Grenze des zulässigen Lösungsraums und bilden eine Menge von optimalen Kompromiss-Lösungen (Ngatchou et al. 2005). Bei einem zweidimensionalen Problem wird diese Menge der pareto-optimalen Lösungen als Pareto-Front (vgl. Abbildung 3.9) und bei Problemen höherer Dimensionen als Pareto-Oberfläche bezeichnet (Kim und Weck 2005; Ngatchou et al. 2005). Die Anzahl pareto-optimaler Lösungen kann grundsätzlich unendlich groß sein (Marler und Arora 2004), richtet sich aber nach dem vorgegebenen Lösungsraum.

Durch die Berechnung der Pareto-Front kann der Lösungsraum verkleinert werden, um die Rechenzeit für die Durchführung der Berechnung der Vermeidungskosten, der WSM und PROMETHEE zu verkürzen.

3.3.5 Weighted Sum Method (WSM)

Erste methodische Ansätze der Weighted Sum Method (WSM) sind in Zadeh (1963) zu finden (Afshari et al. 2010). Das Grundprinzip der Methode besteht darin, gewichtete Summen zur Bewertung der bestehenden Alternativen unter Berücksichtigung aller Attribute zu berechnen. Zur Vergleichbarkeit werden dafür die Werte aller Attribute normiert. Die normierten Werte werden mit Gewichten multipliziert und die Produkte aufsummiert. Das Ergebnis ist eine Bewertungspunktzahl N_i (Performance Score, in dieser Arbeit WSM-Score genannt) für jede Alternative i (vgl. Formel (3.1)). Die Gewichte ω_j (j = 1, ..., m) repräsentieren die relative Bedeutung der Attribute r_{ij} und werden vom Entscheidungsträger festgelegt. (Hwang und Yoon 1981; Kim und Weck 2005)

$$N_{i} = \omega_{1}r_{i1} + \omega_{2}r_{i2} + \dots + \omega_{m}r_{im}$$
(3.1)

Bei Entscheidungsproblemen haben einige der Entscheidungskriterien bzw. Attribute in der Regel unterschiedliche Eigenschaften. In der Literatur wird zunächst zwischen qualitativen und quantitativen Attributen unterschieden. Falls qualitative Attribute in der Entscheidungsmatrix enthalten sind, werden diese über Methodiken der Quantifizierung in quantitative Variablen überführt (Memariani et al. 2009; Rao 2013; Vogl 2017). Unter den quantitativen Attributen bzw. Kriterien der Entscheidungsmatrix wird zwischen "beneficial" und "non-beneficial" Kriterien unterschieden (Chatterjee und Chakraborty 2014). Beneficial Kriterien sind alle Kriterien, deren Nutzen maximiert werden soll (z.B. Ladevolumen eines Lkws), das heißt je höher der Wert des Kriteriums desto besser. Bei non-beneficial Kriterien hingegen gilt, je niedriger der Wert desto besser (z.B. Kaufpreis eines Lkws). (Chatterjee und Chakraborty 2014) Im Rahmen der Definition von "beneficial" und "nonbeneficial" Kriterien wird deshalb auch von Kosten- und Nutzenkriterien gesprochen (Vafaei et al. 2018).

Um eine Entscheidung durch ein MCDM-Verfahren herbeiführen zu können, müssen diese Kriterien wie bereits erwähnt in einem ersten Schritt durch Normierungsverfahren vergleichbar gemacht werden (Triantaphyllou 2010). Dabei spielt die Wahl des Normierungsverfahrens eine entscheidende Rolle, da verschiedene Normierungsverfahren unterschiedliche Ergebnisse erzeugen und ungeeignete Normierungsverfahren dazu führen können, dass die beste Lösung übersehen wird (Chatterjee und Chakraborty 2014). Vafaei et al. (2018) stellen die sechs geläufigsten Normierungsverfahren der Literatur vor (vgl. Abbildung 3.10) und berechnen für die WSM, welches dieser Normierungsverfahren die Ergebnisse mit der größten Robustheit erzeugt. In der Studie schneidet das Linear-Sum-Verfahren (N3) am besten ab. Auf Platz zwei liegen das Linear-Max (N1) und das Vector (N4) Verfahren.

Normierungsverfahren	Nutzungsbedingung	Formel
Linear: May (N1)	Nutzenkriterium	$n_{ij} = \frac{r_{ij}}{r_{max}}$
	Kostenkriterium	$n_{ij} = 1 - \frac{r_{ij}}{r_{max}}$
Linear: May Min (N2)	Nutzenkriterium	$n_{ij} = \frac{r_{ij} - r_{min}}{r_{max} - r_{min}}$
Linear: Max-Min (NZ)	Kostenkriterium	$n_{ij} = \frac{r_{max} - r_{ij}}{r_{max} - r_{min}}$
	Nutzenkriterium	$n_{ij} = \frac{r_{ij}}{\sum_{i=1}^{m} r_{ij}}$
Linear: Summe (N3)	Kostenkriterium	$n_{ij} = \frac{\frac{1}{r_{ij}}}{\sum_{i=1}^{m} \frac{1}{r_{ij}}}$
Volton Nerminung (NA)	Nutzenkriterium	$n_{ij} = \frac{r_{ij}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{m} r_{ij}^2}}$
vektor-Normierung (N4)	Kostenkriterium	$n_{ij} = 1 - \frac{r_{ij}}{\sqrt{\sum_{i=1}^m r_{ij}^2}}$
Logarithmische Normierung	Nutzenkriterium	$n_{ij} = \frac{\ln(r_{ij})}{\ln(\prod_{i=1}^m r_{ij})}$
(N5)	Kostenkriterium	$n_{ij} = rac{1 - rac{\ln(r_{ij})}{\ln(\prod_{i=1}^{m} r_{ij})}}{m - 1}$
Unscharfe Trapezfunktion (N6)	Nutzen- und Kostenkriterium	Nutzen von Zugehörigkeitsfunktionen, z.B. trapezförmig $f(x,a,b,c,d) = \begin{cases} 0, falls \ x \le a \\ b-a, falls \ a \le x \le b \\ \frac{d-x}{d-c}, falls \ c \le x \le d \\ 0, falls \ d \le x \end{cases}$

Abbildung 3.10: Normierungsverfahren im Bereich der multikriteriellen Entscheidungsunterstützung (in Anlehnung an Vafaei et al. 2018)

Nach Vafaei et al. (2018) werden die Sum (N3) und Linear-Max (N1) Normierungsmethodiken in das Entscheidungsunterstützungsmodell der vorliegenden Arbeit implementiert. Welches Normierungsverfahren in der Anwendung letztlich eingesetzt wird, kann der Modellanwender entscheiden.

3.3.6 PROMETHEE I und II

Die Preference Ranking Organisation Method for Enrichment Evaluation (PROMETHEE) nach Brans (1982) ist ein Outranking-Verfahren (vgl. Kapitel 3.3.1), das zur Lösung von MADM-Modellen herangezogen werden kann (Geldermann und Lerche 2014). Outranking-Verfahren unterstützen die Strukturierung von Entscheidungssituationen, wenn sich Entscheidungsträger ihrer Präferenzen nicht vollständig bewusst sind (Geldermann und Rentz 2001). Das Ziel von PROMETHEE ist es daher, bei jedem Entscheidungsschritt weitere Informationen aufzudecken und dem Entscheider fundierte Entscheidungen zu ermöglichen. Das Ergebnis ist die Identifikation einer Alternative, die einen Kompromiss darstellt und eine Rangfolge, die auch Unvergleichbarkeiten abbildet. (Geldermann und Lerche 2014) Für die Entscheidungsunterstützung in dieser Arbeit werden die beiden Verfahrensvarianten PROMETHEE I und II genauer untersucht, da diese gängige Anwendung in der Praxis finden (Behzadian et al. 2010; Geldermann und Lerche 2014).

PROMETHEE analysiert eine bekannte Anzahl an diskreten Alternativen auf Basis von Paarvergleichen. Dabei werden die Differenzen der Ausprägungen zweier Alternativen für jedes Entscheidungskriterium bestimmt. Durch das Berücksichtigen sogenannter Präferenzfunktionen wird eruiert, inwieweit die ermittelten Differenzen der Alternativen innerhalb eines Kriteriums zu einer Präferenz führen.

In Abgrenzung zu den klassischen MADM-Methoden wird bei PROMETHEE nicht angenommen, dass sich der Entscheider seiner Präferenzen bewusst ist und diese ausdrücken kann. Ein großer Vorteil von PROMETHEE ist daher die Möglichkeit, durch die Verwendung der Präferenzfunktionen schwache Präferenzen ausdrücken zu können. Auch Unvergleichbarkeiten können durch das Bilden von Rangfolgen abgebildet werden. (Geldermann und Lerche 2014) PROMETHEE zeichnet sich zudem dadurch aus, dass keine vollständige Kompensation zwischen den Kriterien erfolgt. (Greco et al. 2016; Geldermann und Lerche 2014). Spengler et al. (1998) erklären die fehlende vollständige Kompensation so, dass positive Werte eines Kriteriums negative Werte eines anderen Kriteriums nur ausgleichen können, falls die Differenz der Ergebnisse einen bestimmten Schwellenwert überschreiten. Diese Teilkompensation ist besonders vorteilhaft bei Entscheidungen, die ökologische Herausforderungen betreffen, da den verschiedenen Dimensionen der Nachhaltigkeit die gleiche Bedeutung zuteil werden sollte. (Schröder et al. 2019)

3.3.6.1 Verallgemeinerte Präferenzfunktionen

Für jedes zu beurteilende Kriterium muss sich der Entscheidungsträger also auf eine Präferenzfunktion festlegen, die seine Präferenzen am besten abbildet (Geldermann und Lerche 2014). Um es dem Entscheidungsträger dabei möglichst einfach zu machen, schlagen Brans und Vincke (1985) sechs allgemeine Präferenzfunktionen vor, die hier gemäß Brans et al. (1986), Geldermann und Lerche (2014) und Zimmer (2016) vorgestellt werden. Dabei sind A_{ik} und A_{jk} die Ausprägungen der Alternativen $i, j \in M$ hinsichtlich des Kriteriums $k \in K$. $d_{A_{ik},A_{jk}}$ ist die Differenz der beiden Ausprägungen, mit deren Hilfe die Präferenzwerte $p_{A_{ik},A_{ik}}$ je nach Kriterium mit einer der folgenden Präferenzfunktionen $p\left(d_{A_{ik},A_{ik}}\right)$ ermittelt werden können. Auf der x-Achse wird die Differenz d abgetragen, und auf der y-Achse die Präferenz $p\left(d_{A_{ik},A_{ik}}\right)$, die zwischen 0 und 1 liegt. Bei einem Wert von Null liegt Indifferenz vor. Ist der Wert 1. so herrscht strikte Präferenz. Werte zwischen 0 und 1 drücken schwache Präferenz aus. Je näher der Wert dabei an der 1 liegt, desto stärker wird die Alternative präferiert. Je nach Funktion existieren bis zu drei Arten von Schwellenwerten (q, p, σ) . Der Parameter q stellt den Indifferenzschwellwert dar, bis zu welchem Indifferenz vorliegt. Entsprechend steht p für den Präferenzschwellwert, ab dem strikte Präferenz vorliegt. Der Wert σ ist nur für das Gauß'sche Kriterium relevant und markiert den Wendepunkt. (Geldermann und Lerche 2014)

(1) Gewöhnliches Kriterium

Bei einem *gewöhnlichen Kriterium* werden keine Schwellwerte angesetzt, und es gibt keine Möglichkeit schwache Präferenzen abzubilden. Indifferenz zwischen zwei Alternativen herrscht nur, wenn und nur wenn ihre Funktionswerte gleich sind. Sobald die Ausprägung einer Alternative gegenüber einer anderen Alternative größer ist, liegt strikte Präferenz vor, egal wie geringfügig die Differenz des Paarvergleichs ist.



(2) Quasi-Kriterium

Im Vergleich zum gewöhnlichen Kriterium wird beim *Quasi-Kriterium* ein Indifferenzschwellwert q eingeführt. Dadurch liegt eine strikte Präferenz erst dann vor, wenn die Differenz der Ausprägungen d des Paarvergleichs den Schwellwert q überschreitet. Liegt die Differenz der Ausprägungen unterhalb des Schwellwerts, liegt Indifferenz vor.



(3) Kriterium mit linearer Präferenz

Beim *Kriterium mit linearer Präferenz* wird ein Bereich schwacher Präferenz eingeführt. In diesem Bereich steigt die Präferenz linear mit zunehmender Differenz an. Ab Überschreiten des Präferenzschwellwerts *p* herrscht strikte Präferenz.



(4) Stufen-Kriterium

Präferenzfunktionen mit *Stufen-Kriterium* zeichnen sich durch das simultane Definieren der Indifferenz- und Präferenzschwellwerte q bzw. p aus. Ist die Differenz d kleiner q, so liegt Indifferenz vor. Bei einem Wert von d größer p herrscht strikte Präferenz. Für alle Differenzen im Bereich zwischen q und p gibt es eine Stufe, die einen konstanten Präferenzwert aufweist, der normalerweise bei 0,5 liegt.



(5) Kriterium mit linearer Präferenz und Indifferenzbereich

Beim Kriterium mit linearer Präferenz und Indifferenzbereich wird wie auch beim Stufen-Kriterium sowohl ein Indifferenzschwellwert q als

auch Präferenzschwellwert p definiert. Allerdings wird der Präferenzbereich zwischen q und p bei dieser Präferenzfunktion nicht über eine Stufe, sondern linear bestimmt. Der Präferenzwert steigt in diesem Bereich also mit zunehmender Differenz d an.



(6) Gauß'sches Kriterium

Beim Gauß'schen Kriterium orientiert sich der Verlauf der Präferenzfunktion am Verlauf der Gauß'schen Normalverteilung. Um diese Präferenzfunktion zu definieren, muss lediglich der Wendepunkt σ festgelegt werden. Die Präferenz steigt monoton entsprechend der Normalverteilung an. Eine strikte Präferenz kann bei dieser Funktion nie erreicht werden, unabhängig davon, wie groß die Differerenz *d* ist.



3.3.6.2 Festlegung der Präferenzfunktionen in dieser Arbeit

Präferenzfunktionen für Kriterien sollten in Übereinstimmung mit der Art des Kriteriums, der Unentschlossenheit des Entscheidungsträgers bezüglich seiner Einstellungen und der Unsicherheit der Daten festgelegt werden (Oberschmidt et al. 2010). Für qualitative Kriterien eignen sich die Präferenzfunktionen (1), (2) oder (4); für quantitative Kriterien die Funktionen (3), (5) oder (6) (Anand und Kodali 2008). Für beispielhafte Kriterien eines jeden Funktionstyps wird auf Geldermann und Lerche (2014) verwiesen.

Eine im Rahmen dieser Arbeit durchgeführte Literaturrecherche zur Verwendung von Präferenzfunktionen für quantitative ökologische und ökonomische Kriterien zeigt, dass sich vor allem die Funktionen (3) (Kriterium mit linearer Präferenz) und (6) (Gauß'sches Kriterium) in der Wissenschaft etabliert haben (vgl. Tabelle 3.3). Für die ökologischen Kriterien lag der Fokus der Recherche auf dem Kriterium THG-Emissionen. Für ökonomische Kriterien wurden vor allem Kriterien bzw. Studien betrachtet, in denen Kosten beziffert wurden.

Dass sich neben der Präferenzfunktion mit linearem Kriterium vor allem auch das Gauß'sche Kriterium durchgesetzt hat, wird durch die immense Robustheit gegenüber Variationen in den Input-Daten begründet (Brans et al. 1986; Queiruga et al. 2008). Daneben müssen keine Schwellenwerte für Präferenz oder Indifferenz festgelegt werden (Oberschmidt et al. 2010). Ein Aspekt, der vor allem auch in dieser Arbeit im Hinblick auf THG-Emissionen oder Herstellkosten im Vordergrund steht, da je nach Anwendungsfall gegebenenfalls unklar ist, in welcher Höhe minimale oder maximale Ausprägungen eines Kriteriums überhaupt möglich sind.

	Typ der Präferenzfunktionen	
	Ökologische Attribute	Ökonomische
Studie	(THG-Emissionen)	Attribute
Anand und Kodali (2008)	-	3
Doukas et al. (2006)	5	5
Geldermann et al. (2003)	3	3
Markl-Hummel und Geldermann (2014)	6	6
Oberschmidt (2010)	5	6
Oberschmidt et al. (2010)	6	6
Queiruga et al. (2008)	-	6
Ren et al. (2009)	3	3
Safaeimohamadabadi et al. (2009)	5	3
Schröder et al. (2019)	3	3
Steinhilper et al. (2013)	5	5
Sultana und Kumar (2012)	3	3
Ziolkowska (2013)	3	3

Tabelle 3.3: Präferenzfunktionen für ökonomische und ökologische Kriterien in der Literatur

Da sich gemäß der Recherche sowohl der Funktionstyp (3) als auch der Funktionstyp (6) in der Wissenschaft behauptet haben, werden beide Funktionen im Entscheidungsunterstützungsmodell dieser Arbeit implementiert, um dem Entscheidungsträger ein möglichst mächtiges Modell zur Verfügung zu stellen. Für die gezeigten Berechnungen bzw. Auswertungen in dieser Arbeit (vgl. Kapitel 8.2.6.2) wird allerdings eine Vorauswahl getroffen:

Das Entscheidungskriterium THG-Emissionen wird als Gauß'sches-Kriterium definiert. Dies wird damit begründet, dass die Präferenz für eine Konfiguration einer Wertschöpfungskette mit geringen THG-Emissionen sehr viel stärker ist als für eine Wertschöpfungskettenkonfiguration mit hohen THG-Emissionen. Zudem sind die Präferenzunterschiede bei zwei Konfigurationen, die beide sehr geringe oder sehr hohe THG-Emissionen aufweisen, sehr schwach bzw. nahezu indifferent. Beides wird durch die Funktion mit Gauß'schem Kriterium durch die unterschiedlich starken Gradienten entlang der Funktion am besten abgebildet (Queiruga et al. 2008). In Abgrenzung dazu werden die Herstellkosten als Kriterium mit linearer Präferenz festgelegt, da eine Geldeinheit für ein Unternehmen immer den selben Wert hat, unabhängig davon, ob die Herstellkosten sehr niedrig oder sehr hoch sind.

3.3.6.3 Methodik

Nachdem die Präferenzfunktion für jedes Entscheidungskriterium festgelegt ist (vgl. Kapitel 3.3.6.1 und 3.3.6.2), erfolgt die Anwendung von PROMETHEE je nach Verfahrensvariante in vier (PROMETHEE I) bzw. fünf (PROMETHEE II) Schritten. Der Verfahrensablauf wird im Folgenden detailliert nach Behzadian et al. (2010), Zimmer (2016) und Dağdeviren (2008) erläutert.

Schritt 1: Zunächst werden für alle Alternativen pro Kriterium die Differenzen $d_{A_{ik},A_{jk}}$ der Ausprägungen zweier Alternativen A_{ik} und A_{jk} auf Basis des paarweisen Vergleichs ermittelt:

$$d_{A_{ik},A_{jk}} = A_{ik} - A_{jk}$$
(3.2)

Schritt 2: Die Differenzen werden dann mittels der zuvor für das jeweilige Kriterium festgelegten Präferenzfunktion $p(d_{A_{ik},A_{jk}})$ in einen Präferenzwert $p_{A_{ik},A_{jk}}$ überführt:

$$p_{A_{ik},A_{jk}} = p(d_{A_{ik},A_{jk}})$$
 (3.3)

Schritt 3: Anschließend wird mithilfe der Präferenzwerte und der Kriteriengewichtungen w_k der globale Präferenzindex π_{A_i,A_j} als Outranking-Relation einer Alternative A_i über einer Alternative A_j berechnet (vgl. Formel (3.4)). Für die Gewichtungen der Kriterien gilt in der Regel: $\sum_{k=1}^{m} w_k = 1$

$$\pi_{A_{i,A_{j}}} = \sum_{k=1}^{m} p_{A_{ik,A_{jk}}} \cdot w_{k}$$
(3.4)

Schritt 4: Der letzte Schritt von PROMETHEE I beinhaltet die Berechnung der Ausgangsflüsse $\Phi^+(A_i)$ und Eingangsflüsse⁵ $\Phi^-(A_i)$ als Maß für die Stärke bzw. Schwäche einer Alternative *i* im Vergleich zu allen anderen Alternativern:

$$\Phi^{+}(A_{i}) = \frac{1}{n-1} \sum_{j=1, j \neq i}^{n} \pi_{A_{i}, A_{j}}$$
(3.5)

$$\Phi^{-}(A_{i}) = \frac{1}{n-1} \sum_{j=1, j \neq i}^{n} \pi_{A_{j}, A_{i}}$$
(3.6)

Auf Basis der Ausgangs- und Eingangsflüsse kann in PROMETHEE I nun die sogenannte partielle Präordnung aller Alternativen gebildet werden, d.h. die Alternative A_i ist gegenüber Alternative A_j überlegen, wenn eine der Bedingungen (3.7), (3.8) oder (3.9) erfüllt ist.

$$\Phi^{+}(A_{i}) > \Phi^{+}(A_{j}) \text{ und } \Phi^{-}(A_{i}) < \Phi^{-}(A_{j})$$
(3.7)

$$\Phi^{+}(A_{i}) > \Phi^{+}(A_{j}) \text{ und } \Phi^{-}(A_{i}) = \Phi^{-}(A_{j})$$
 (3.8)

⁵ Für die Berechnung der Eingangsflüsse müssen die vorherigen Berechnungen analog durchgeführt werden, nur das in diesem Fall die Alternative A_j gegenüber der Alternative A_i betrachtet wird.

$$\Phi^{+}(A_{i}) = \Phi^{+}(A_{j}) \text{ und } \Phi^{-}(A_{i}) < \Phi^{-}(A_{j})$$
(3.9)

Gilt Bedingung (3.10) herrscht Indifferenz zwischen den beiden Alternativen.

$$\Phi^+(A_i) = \Phi^+(A_j) \text{ und } \Phi^-(A_i) = \Phi^-(A_j)$$
 (3.10)

Treffen die Bedingungen (3.11) oder (3.12) zu, kann in PROMETHEE I keine Aussage zur Überlegenheit getroffen werden. Die betrachteten Alternativen A_i und A_j sind dann nicht vergleichbar.

$$\Phi^{+}(A_{i}) > \Phi^{+}(A_{j}) \text{ und } \Phi^{-}(A_{i}) > \Phi^{-}(A_{j})$$
 (3.11)

$$\Phi^{+}(A_{i}) < \Phi^{+}(A_{j}) \text{ und } \Phi^{-}(A_{i}) < \Phi^{-}(A_{j})$$
 (3.12)

Schritt 5: Um im Unterschied zu PROMETHEE I eine vollständige Präordnung aller Alternativen zu ermöglichen, wird in PROMETHEE II der Nettofluss der Ausgangs- und Eingangsflüsse berechnet (vgl. Formel (3.13)). Auf Basis der Nettoflüsse kann so eine vollständige Rangfolge aller Alternativen erzeugt werden. Diese vollständige Präordnung nach PROMETHEE II ist vor allem auch für diese Arbeit von hoher Relevanz, um eine eindeutige Rangfolge der Wertschöpfungsketten-Alternativen angeben zu können (vgl. Kapitel 8.2.6.2 und Kapitel 8.2.7).

$$\Phi^{Netto}(A_i) = \Phi^+(A_i) - \Phi^-(A_i)$$
(3.13)

3.4 Schadens- und Vermeidungskostenansatz

Die Forschungsstelle für Energiewirtschaft (2009) definiert CO₂-Vermeidungskosten wie folgt: "CO₂-Vermeidungskosten beschreiben die Kosten, die für die Reduzierung einer bestimmten CO₂-Menge gegenüber einer Referenztechnologie (oder einem Referenzzeitpunkt) aufzubringen sind. Hierin sind jeweils die Investitions- und Betriebskosten sowie verbrauchsgebundenen Kosten angegeben. Vermeidungskosten werden üblicherweise spezifisch *in* € *pro t CO*² *angegeben."* Ähnlich wird der Begriff der Vermeidungskosten auch vom Umweltbundesamt definiert. Diesem zufolge werden mit dem Vermeidungskostensatz die Kosten geschätzt, die getragen werden müssen, wenn der Klimawandel, bzw. die Treibhausgasemissionen auf ein bestimmtes Ziel begrenzt werden sollen. (UBA 2019b) Die Höhe der geschätzten Vermeidungskosten ist branchenspezifisch und kann stark schwanken (Weimann 2019). In Übereinstimmung dazu und zu den genannten Definitionen werden Vermeidungskosten im Rahmen dieser Arbeit als diejenigen branchen- sogar unternehmensspezifischen Kosten verstanden, die für ein Unternehmen zusätzlich anfallen, wenn statt der aktuellen Wertschöpfungskettenkonfiguration eine Konfiguration verwendet wird, die weniger THG-Emissionen als die vorherige verursacht.

Im Unterschied zum Vermeidungskostenansatz schätzt der Schadenskostenansatz, die Höhe der Schäden (Klimakosten), die der Gesellschaft durch THG-Emissionen und dem daraus resultierenden Klimawandel entstehen (UBA 2019b). Den Schadenskostenansatz zugrunde legend schätzt das Umweltbundesamt im Jahr 2013 die Klimakosten für das Emittieren von CO₂ und anderer Kyoto-Treibhausgase für das Jahr 2010 im Mittel auf 80 €/tCO₂e. In der Prognose für 2030 werden die mittleren Klimakosten auf 145 € und langfristig für das Jahr 2050 auf 260 €/tCO₂e geschätzt. (UBA 2013) In der Methodenkonvention 3.0⁶ aus dem Jahr 2019 wurden vom Umweltbundesamt auf Grundlage der Arbeiten zahlreicher Forschungsinstitute erneut Umweltkostensätze erarbeitet. Die UBA-Empfehlung zu den Klimakosten betragen darin für 2016 180 €/tCO₂e, für 2030 205 €/tCO₂e und für 2050 240 €/tCO₂e. Die 180 €/tCO₂e für 2016 kommen auch dem Schätzwert des IPCC aus dem 5. Sachstandsbericht nahe, der aufgezinst auf das Jahr 2016 173,5 €/tCO₂e beträgt (UBA 2019b), wodurch sich beide Schätzungen gegenseitig plausibilisieren. Da die Empfehlungen des UBA und des IPCC somit in etwa übereinstimmen, wird diese Größenordnung der Klimakosten (in dieser Arbeit auch **Schadenskosten** genannt) auch für diese Arbeit verwendet.

Möchte ein Unternehmen für die durch seine Tätigkeiten verursachten Klimaschäden finanziell aufkommen, müsste es also die Höhe der Schadenskosten tragen. Teilweise kann es aber für das Unternehmen billiger sein, die Wertschöpfungskette entsprechend ökologischer zu konfigurieren (Vermeidung), um weniger Schaden an der Umwelt zu erzeugen. Wählt der Entscheider bzw. Nutzer des Entscheidungsunterstützungssystems die Vermeidungskosten als Entscheidungsgrundlage (vgl. Kapitel 8.1), so kann für ein nachhaltig agierendes Unternehmen abgeleitet werden, dass eine Wertschöpfungskette immer dann ökologischer konfiguriert werden sollte, wenn die entsprechenden Vermeidungskosten unter den Schadenskosten liegen (vgl. Kapitel 8.2.5).

⁶ "Die Methodenkonvention 3.0 enthält Empfehlungen für Methoden zur Ermittlung von Umweltkosten (Teil "Methodische Grundlagen") sowie neue Kostensätze zu den Themen Treibhausgase, Luftschadstoffe, Lärm, Verkehr und Energie…" (UBA 2019b).

3.5 Literaturübersicht

3.5.1 Analysemerkmale der Literaturanalyse

Bevor in Kapitel 3.5.2 das entwickelte systematische Rechercheverfahren vorgestellt wird, das sämtliche methodisch und thematisch relevanten Literaturbeiträge identifiziert, wird in diesem Kapitel zunächst hergeleitet und beschrieben, auf welchen methodischen und thematischen Schwerpunkten der Fokus der Literaturanalyse liegt. Dazu wurden aus den Forschungsfragen in Kapitel 1.2, aus den in Kapitel 2.7 aufgestellten Anforderungen an eine nachhaltige Planung und Bewertung industrieller Wertschöpfungsketten und aus den oben durchgeführten Methodendiskussionen **vier** übergeordnete **Analyse-Schwerpunkte** (im Folgenden fett gedruckt) herauskristallisiert, anhand derer wichtige *Analysemerkmale* (im Folgenden kursiv gedruckt) für eine Literaturanalyse abgeleitet wurden.

1. Verwendete wissenschaftliche Methoden: Den ersten Schwerpunkt stellen die in Veröffentlichungen verwendeten wissenschaftlichen Methoden dar.

Im Blickpunkt der ökologischen Analyse und Bewertungsmethoden steht dabei das Life Cycle Assessment, das hierbei auch repräsentativ für sämtliche Simplified LCA-Ansätze (SLCA), wie die Bilanzierung von THG-Emissionen bzw. Carbon Footprinting, steht. Es wird im Besonderen analysiert, ob bei der Bilanzierung ein werksspezifischer Ansatz entwickelt wurde, der einer generischen Logik folgt, sodass unterschiedliche Materialien, Lieferanten und Fertigungsverfahren modelliert und bewertet werden können oder nicht. Es wurde also differenziert betrachtet, ob sich die durchgeführte Modellierung und Bilanzierung nur auf ein Material, einen Lieferanten oder eine Fertigungskette anwenden lässt, oder ob verschiedene Materialen, Lieferanten und Fertigungsketten wertschöpfungskettenspezifisch bewertet wurden. Im Folgenden wird die Eignung eines Ansatzes oder Tools zur generischen Berechnung bzw. Bilanzierung material-, lieferanten- oder fertigungsspezifischer Wirkungskategorien des LCA als "werksspezifisch" betitelt. Gleichzeitig bedeutet dies, dass die Wirkungskategorie dadurch immer auch, "herstellerspezifisch", "lieferantenspezifisch" und "standortspezifisch" bilanziert wird.

- Aus ökonomischer Perspektive liegt der Fokus auf den lebenszyklusbzw. materialflussorientierten Analyse- und Bewertungsverfahren des *Life Cycle Costing* und der *Materialflusskostenrechnung*. In diesem Kontext werden auch Veröffentlichungen ausführlicher betrachtet, in denen Ansätze zur Berechnung produktspezifischer Treibhausgasvermeidungskosten aufgestellt wurden.
- Hinsichtlich der Anwendung von MCDM-Verfahren wurde im ersten Schritt untersucht, ob eine Methode des MCDM angewendet wurde. Im zweiten Schritt wurde aufgrund des MADM-Schwerpunkts dieser Arbeit gesondert ermittelt, ob es sich dabei um PRO-METHEE oder die Weighted Sum Method handelte. Ansonsten sind Beiträge von Interesse, in denen zur Vorauswahl der optimalen Lösungen die Pareto-Front erzeugt wird bzw. die pareto-optimalen Lösungen berechnet werden.
- Bezüglich der Umsetzung des entwickelten Ansatzes wurde analysiert, ob dieser zu einer Software bzw. zu einem Tool weiterentwickelt wurde.

2. Betrachtete Lebenszyklusphasen bzw. Systemgrenzen: Im zweiten Schwerpunkt wurden die in einer Veröffentlichung betrachteten Lebenszyklusphasen bzw. die Systemgrenzen herausgearbeitet, um zu prüfen, ob alle Lebenszyklusphasen berücksichtigt wurden und in welchem Maß somit eine Bewertung der gesamten Wertschöpfungskette möglich ist. Der Theorie zu den Lebenszyklusphasen einer Wertschöpfungskette und der Definition der Lebenszyklusphasen in dieser Arbeit folgend (vgl. Kapitel 2.1.4), wurden die existierenden Beiträge hinsichtlich der Phasen

- Vorkette,
- Rohstoffverarbeitung/Materialherstellung,
- Bauteilfertigung,
- *Nutzung* und *End-of-Life* untersucht.

3. Anwendungsgebiete/mögliche Adressaten: Im dritten Schwerpunkt-Bereich wurde analysiert, wer die Adressaten der relevanten existierenden Publikationen sind, also für welchen Anwendungsfall die Ansätze zur ökonomischen und ökologischen Planung entwickelt wurden. Im Kontext einer nachhaltigen Produktion und dem übergeordneten Ziel des Designs einer "grünen" Wertschöpfungskette sind dabei insbesondere die folgenden Aspekte zu unterscheiden:

- Materialwahl (Produktentwicklung, Produkt Design),
- Lieferantenwahl (Einkauf, Supply Chain Management),
- Fertigungsplanung, bzw. die Wahl der Fertigungstechnik (Produktionsplanung, Produktionsmanagement),
- Herstellkosten des Produkts (Produktionsmanagement),
- Carbon Footprint des Produkts,
- politische oder gesellschaftliche Sichtweise (Handlungsempfehlungen für den *Gesetzgeber*).

4. Anwendungsbeispiel/Zielindustrie: Zusätzlich wird hier hinsichtlich der Adressaten des Beitrags analysiert, in welchen Industriesektoren sich die entwickelten Ansätze anwenden lassen bzw. welcher Industriesektor der

Veröffentlichung thematisch zugrunde liegt. Im Kontext der vorliegenden Arbeit stehen die treibhausgasintensivsten Industriesektoren im Fokus, sodass insbesondere Beiträge interessant sind, die sich mit der

- Stahlindustrie,
- Aluminiumindustrie,
- Chemieindustrie und
- Automobilindustrie befassen.

Die Analysemerkmale der durchgeführten Literaturanalyse sind zusammengefasst in Abbildung 3.13 in Kapitel 3.5.3 tabellarisch dargestellt.

3.5.2 Identifizierung relevanter Literatur

Zur nachhaltigen Produktion bzw. die in dieser Arbeit im Vordergrund stehende ökologische und ökonomische Planung industrieller Wertschöpfungsketten existieren nach eigenen Recherchen eine Vielzahl an Veröffentlichungen (vgl. Abbildung 3.12). Um die Literatur auf die relevanten Publikationen einzugrenzen, werden zunächst drei für diese Arbeit inhaltlich relevante Themenbereiche zur Entwicklung eines Entscheidungsunterstützungssystems zur ökonomischen und ökologischen Konfiguration von Wertschöpfungsketten definiert (vgl. Abbildung 3.11).



Abbildung 3.11: Themenbereiche der Literaturrecherche

Den ersten Themenbereich stellt der ökologische Entscheidungsansatz dar, der den Umweltaspekt des Modells abbildet. Der zweite Themenbereich handelt vom ökonomischen Entscheidungsansatz, der den Wirtschaftlichkeitsansatz des Modells berücksichtigt. Der dritte Themenbereich umfasst die multikriterielle Entscheidungsunterstützung. Darin wird untersucht, welche MCDM-Methoden in den bisherigen Ansätzen verwendet wurden. Im Rahmen dieser inhaltlichen Einordnung sind tendenziell diejenigen Beiträge von hoher Relevanz, die zwei oder sogar alle drei Themenbereiche umfassen.

Zur Kategorisierung werden die Beiträge dazu in die diesbezüglichen Schnittmengen der Themenkreise "a), b), c) und d)" eingeordnet. Sinnbildlich werden beispielsweise in Schnittmenge a) alle Beiträge einsortiert, die sich mit integrierten ökonomischen und ökologischen Ansätzen befassen. Dabei beinhaltet Schnittmenge d) diejenigen Beiträge, die alle drei Themenbereiche in sich vereinen. Entsprechend der Zielstellung dieser Arbeit stehen vor allem die beiden Schnittmengen a) und d) im Blickpunkt. Dennoch ist es wichtig, dass sich die Literaturrecherche nicht nur auf diese zwei Schnittmengenbereiche respektive auf integrierte LCA- und MFKR-Ansätze sowie die Anwendung von MCDM konzentriert, denn durch die Berücksichtigung der anderen Schnittmengen wird die Wahrscheinlichkeit reduziert, dass relevante Literaturbeiträge herausgefiltert werden. Das zielt vor allem auf Beiträge ab, in denen nicht alle verwendeten Methoden im Titel oder Abstract erwähnt werden. Benennt der Autor aber mindestens eine ökologische oder ökonomische Methode, ist gewährleistet, dass dieser Literaturbeitrag entdeckt wird und in die Literaturanalyse einfließt.

Um keine relevanten Beiträge zu übersehen, wurde ein mehrstufiges Rechercheschema entworfen und durchgeführt (vgl. Abbildung 3.12). Die Recherche umfasste Dissertationen, Zeitschriftenartikel und Konferenzbeiträge in englischer oder deutscher Sprache. Die Recherche wurde in der wissenschaftlichen Datenbank Scopus durchgeführt, die eine weitreichendere Bandbreite an Zeitschriften als andere Datenbanken wie z.B. Web of Science oder Google Scholar hat (Falagas et al. 2008) und aktuellere Quellen umfasst (Chappin und Ligtvoet 2014).



Abbildung 3.12: Entwickeltes mehrstufiges Rechercheschema zur Vorgehensweise der Literaturrecherche

In **Stufe 1** fand zunächst eine Eingrenzung der Literatur auf die drei spezifischen Themenbereiche statt. Die oben diskutierten Schnittmengenbereiche wurden dabei noch nicht berücksichtigt. Für jeden einzelnen Themenbereich fand dazu eine erste Filterung statt, in der die Literatur auf die zu untersuchenden wissenschaftlichen Methoden reduziert wurde. Das Filtern geschah durch Stichwörter, die über ein alternatives "OR" (dt. "oder") aneinandergereiht wurden und auf diese Weise eine "Suchfunktion" bildeten. Mit diesen Suchfunktionen wurden sämtliche Veröffentlichungen anhand von Titel, Abstract und Keywords durchsucht. Die der Filterung zugrunde gelegten Stichwörter bzw. Suchfunktionen sind in Abbildung 3.12 ersichtlich.

Mithilfe dieser Suchfunktionen konnten im Themenbereich *Ökologie* mit Fokus auf LCA, Carbon Footprinting bzw. Bilanzierung von CO₂- oder THG-Emissionen 76.367 Literaturbeiträge gefunden werden. Im Bereich *Ökonomie*, in dem die Methoden LCC, MFKR, CO₂-Vermeidungskosten und generell die Planung und Analyse von Herstellkosten im Vordergrund standen, ergab die Recherche 127.179 Beiträge. Zum Themenbereich *MCDM* konnten 172.529 Veröffentlichungen ausfindig gemacht werden.

In **Stufe 2** wurden die Treffer aus Stufe 1 weiter eingegrenzt, indem die Stichwortfunktionen der Stufe 1 miteinander kombiniert und weiter präzisiert wurden. Die Kombination geschah über eine Verbindung der relevanten methodischen Suchwörter über ein "AND" (dt. "und") in der Suchfunktion. Dem Schnittmengenbereich **a**) *Ökologie(LCA,etc.)-Ökonomie(MFKR,etc.)* konnten schließlich 602 Beiträge zugewiesen werden. Für den Bereich **b**) *Ökonomie(MFKR,etc.)- MCDM(Promethee,etc.)* waren es 17 Beiträge und für den Bereich **c**) *Ökologie(LCA,etc.)-MCDM(Promethee,etc.)* 318 Beiträge. Eine kombinierte Suche in allen drei Themenbereichen **d**) ergab eine Trefferliste mit 52 Beiträgen. Im Unterschied zu den Schnittmengenbereichen b) und c) wurde bei der Schnittmenge aus allen drei Bereichen (d)) keine zusätzliche Präzisierung der MCDM-Stichwörter im Vergleich zu Stufe 1 vorge-

nommen. Dadurch konnten alle Beiträge ausfindig gemacht werden, in denen über die ökologische und ökonomische Betrachtung hinaus auch generell ein MCDM-Ansatz angewendet wurde.

Im Rahmen von **Stufe 3** findet eine im Vergleich zu Stufe 2 alternative Eingrenzung der in Stufe 1 gefunden Quellen statt. Dafür wurden andere Analysemerkmale aus Kapitel 3.5.1 in die Suchfunktionen integriert, um zu prüfen, ob Beiträge näher betrachtet werden sollten obwohl kein integrierter ökologisch-ökonomischer Ansatz vorliegt. Die weitere Eingrenzung konzentriert sich überwiegend auf die wesentlichen Anwendungsgebiete und Zielindustrien dieser Arbeit. Die spezifische Erweiterung der Suchfunktion kann Abbildung 3.12 entnommen werden. Aus ökologischer Perspektive konnten dadurch 223 weitere eventuell relevante Veröffentlichungen identifiziert werden; aus ökonomischer Perspektive waren es 297 und im Bereich MCDM waren es weitere 218 Publikationen.

In der **4. Stufe** wurden die identifizierten Publikationen der Stufen 2 und 3 manuell auf 15 Publikationen weiter eingegrenzt. Dazu wurde der Abstract und gegebenenfalls auch der gesamte Beitrag gelesen und über die Relevanz des Beitrags für die vorliegende Arbeit entschieden.

In **Stufe 5** wurde über die Methode der aufgestellten Suchfunktionen hinaus eine manuelle Recherche in Scopus und weiteren bekannten wissenschaftlichen Datenbanken durchgeführt, um zu überprüfen, dass wichtige Beiträge nicht übersehen wurden. Auf diese Weise konnten 8 weitere Publikationen identifiziert werden.

In **Stufe 6** erfolgte schlussendlich eine Zusammenführung aus den Ergebnissen der Stufen 4 und 5. Insgesamt konnten die Rechercheergebnisse so auf **23 Veröffentlichungen** beschränkt werden, die methodisch und/oder thematisch von hoher Relevanz für die Zielstellung dieser Arbeit sind. Im Folgenden Kapitel werden diese 23 Beiträge gemäß der Kriterien in Abschnitt 3.5.1 analysiert und diskutiert.

3.5.3 Analyse existierender Ansätze

Hinsichtlich des Fokus auf die ökonomische und ökologische Planung industrieller Wertschöpfungsketten auf Basis von (S)LCA, MFKR und LCC konnten 23 höchstrelevante Beiträge identifiziert werden (vgl. Abbildung 3.13), die sich entweder mit der theoretischen Entwicklung und Weiterentwicklung oder mit der Anwendung dieser Methoden in den untersuchten Industriezweigen befassen.

Bedeutende theoretische Ansätze zur Kombination von SLCA und LCC stammen von Kicherer et al. (2007), Rebitzer und Nakamura (2008), Bierer et al. (2015) und Miah et al. (2017). Kicherer et al. (2007) beschäftigen sich mit einer Kombination von LCA und LCC, um die Ökoeffizienz von Produkten analysieren zu können. Bei dieser Ökoeffizienzanalyse werden über die Ökobilanz hinaus Kosten von Produkten und Prozessen herangezogen, da eine Ökobilanz ohne Berücksichtigung von Kosten für die Unternehmensführung nur von begrenztem Nutzen ist. Aus diesem Grund sollte ein Unternehmen über ein Datenmanagementsystem verfügen, das beide Seiten der Ökoeffizienz (Ökobilanz und Kosten) berücksichtigt (Kicherer et al. 2007). Rebitzer und Nakamura (2008) entwickeln verschiedene eLCC-Modelle (environmental-LCC), die eine Kombination aus LCC und LCA darstellen. Auf Basis dieser Modelle bewerten sie die Lebenszykluskosten und mehrere ökologische Wirkungskategorien einer Waschmaschine unter Berücksichtigung des gesamten Lebenszyklus (cradle-to-grave). Im Rahmen der Ökobilanzierung werden in dieser Publikation die Wirkungskategorien Erderwärmung (in kg CO₂-Äquivalent), Versauerung (in kg SO₂-Äquivalent), Eutrophierung (in kg Stickstoff), Humantoxizität (in kg Benzol) und Ressourcenrückgang (in kg Öl) betrachtet. Bierer et al. (2015) merken im Hinblick auf die Literatur an, dass die beiden Methoden LCA und LCC, wenn diese in Studien kombi-
niert angewendet werden, oft nur parallel oder mit geringer Integration angewendet werden⁷. Dies führt laut Bierer et al. (2015) zu einer Verdopplung des Aufwands bei der Datenerfassung und zu einer mangelnden Konsistenz der Systemgrenze der zugrunde liegenden Analysen. Die Aussagekraft der Analyseergebnisse wird somit eingeschränkt. Sie stellen fest, dass es bislang keinen ausgereiften theoretischen Ansatz für die Integration von LCA und LCC gibt. Zur Lösung des Problems entwickeln sie ein Konzept bzw. ein Vorgehensmodell für die integrierte Nutzung dieser beiden Methoden und schlagen die Materialflusskostenrechnung als Bindeglied der beiden Methoden vor, erweitert um die Anforderungen des Lebenszyklus. Miah et al. (2017) erarbeiteten eine Literaturübersicht zur Kombination von LCA und LCC und identifizierten dabei sechs Integrationsmöglichkeiten. Als Ergebnis stellen die Autoren einen hybridisierten Rahmen zur umfassenden Analyse und Verwaltung der ökologischen und wirtschaftlichen Leistung auf. Das Rahmenwerk ermöglicht, eine der sechs Möglichkeiten der LCA-LCC-Integration vorzunehmen, einen Entscheidungsprozess zur Auswahl verschiedener Methoden der Systemintegration und -analyse aufzustellen, Verfahren für die Umweltlebenszykluskostenrechnung (eLCC) und konventionelle Lebenszykluskostenrechnung (LCC) zu entwickeln und eine Systemoptimierung durch Multi-Objective Linear Programming (MOLP) durchzuführen. Außerdem beinhaltet der hybridisierte Rahmen ein hybrides MCDM-Verfahren zur Entscheidungsfindung, das die Methoden Technique for Order Preference by Similarity to Ideal Solution (TOPSIS) und Analytical Hierarchy Process (AHP) kombiniert.

Bedeutende Veröffentlichungen zur Entwicklung und Weiterentwicklung der methodischen Integration von (S)LCA und der MFKR wurden von Viere et al. (2010a), Nertinger (2015), Schrack (2016) sowie von Rieckhof und

⁷ Siehe diesbezüglich auch die im Folgenden dargestellte Anwendung kombinierter Ansätze (z.B. in Auer et al. 2017, Witik et al. 2011, Shama et al. 2015, Lindner und Schmitt 2015, Delogu et al. 2018, Sell et al. 2014, Simões et al. 2016 und Gantar et al. 2013).

Guenther (2018) verfasst. In ihrer Dissertation fasste Schrack (2016) im Rahmen ihrer Literaturanalyse bereits zusammen, dass sich gemäß Viere et al. (2010a) eine Verbindung der MFKR mit der Ökobilanzierung anbietet, um die MFKR im Hinblick auf die ökologische Dimension aussagekräftiger zu gestalten. Viere et al. (2010a) veranschaulichen ihre Überlegungen anhand eines einfachen Beispiels, dass zur Bewertung von Materialflüssen auch Umweltwirkungen herangezogen werden können. Daneben beschäftigten sich auch Rieckhof und Günther (2013) mit der Integration der beiden Methoden und veranschaulichten den Ansatz an einer ausgedehnten Fallstudie. (Schrack 2016) Trotz dieser Vorarbeiten konstatiert Schrack (2016), dass es bisher an einer detaillierten Arbeit zu den Unterschieden, Gemeinsamkeiten und den Anknüpfungspunkten dieser beiden Instrumente mangelt und möchte diesen beheben. Die Autorin erweitert die klassische Materialflusskostenrechnung nach ISO 14051 zu einer nachhaltigkeitsorientierten Materialflusskostenrechnung, indem sie die MFKR um drei Komponenten erweitert: zum einen ergänzt sie die MFKR um Redukte bzw. "Reduzenda", sodass die MFKR auch von "Reduzenten" verwendet werden kann. Reduzenda charakterisieren sogenannte Übel wie Abfälle oder Abwässer aus vorgelagerten Wertschöpfungsstufen, die inputseitig in das betrachtete Produktionssystem eingehen und sich dadurch auszeichnen, dass ihr Einsatz nicht mit Aufwänden, sondern Erträgen verbunden ist (Dyck hoff 1992; Prammer 2009). Zum anderen weitet sie die MFKR auf die gesamte Lieferkette aus. Diese sogenannte lebenswegbezogene MFKR ist in der Realität aber nicht praktikabel, da die für die Berechnung notwendigen Informationen der vorgelagerten Lieferanten dem Unternehmen meist nicht vorliegen. Der Wettbewerb verhindert die dazu notwendige sehr enge Kooperation und Prozesstransparenz. (Schrack 2016) Des Weiteren integriert die Autorin externe Effekte in die MFKR. Die nachhaltigkeitsorientierte MFKR soll dazu dienen, die Entwicklung hin zu einer geschlossenen Stoffkreislaufwirtschaft zu unterstützen, die Lebenszyklusorientierung mit einzubeziehen und Umweltwirkungen zu integrieren. Für die Entwicklung des Modells zieht Schrack (2016) verschiedene Fallbeispiele wie die Modellierung einer Abfallvergärungsanlage heran. Auch Nertinger (2015) stellt einen integrierten Ansatz auf, indem er die Kohlenstoffbilanzierung in die Materialflusskostenbilanzierung integriert. Als Fallbeispiel dient dem Autor ein vereinfachter ALUET-Herstellungsprozess auf Basis von Aluminium und PET. Darüber hinaus beschäftigt sich der Autor mit einer möglichen Implementierung des Ansatzes in Unternehmen. Als Lösung stellt er eine Vorgehensweise in Anlehnung an den PDCA-(plan-do-check-act)-Zyklus vor. Rieckhof und Guenther (2018) knüpfen an ihre Arbeiten zur Integration der MFKR und des LCAs aus Rieckhof und Günther (2013) an und wenden die integrierte Methodik schließlich an, um den Herstellungsprozess für ein Holzprodukt cradle-to-gate zu modellieren und zu bewerten.

Wie in Kapitel 3.5.1 beschrieben, spielt die werksspezifische Modellierung der Materialherstellung eine besondere Rolle, um im Rahmen der Lieferkette lieferantenspezifische Product Carbon Footprints (PCF) unterscheiden zu können. Auf die Weise kann die Bewertung zur Auswahl "grüner", d.h. klimaschonender Lieferanten beitragen. Dieser werksspezifische Ansatz wurde bisher allerdings nur von Breun (2016) verfolgt. Breun (2016) beleuchtet die Entscheidungsunterstützung in Bezug auf die Entwicklung nachhaltiger Investitionsstrategien für die deutsche Metallindustrie vor dem Hintergrund, dass diese unterschiedlichen politischen Veränderungen im Bereich der Energie- und Klimapolitik standhalten soll. Dafür wird ein akteurorientiertes Entscheidungsunterstützungsmodell vorgestellt; es simuliert die optimalen, zukünftigen Investitionsentscheidungen für alle deutschen Eisen-, Stahl- und Aluminiumwerke unter Berücksichtigung verschiedener politischer Bedingungen auf Basis einer detaillierten anlagenspezifischen, technischen Prozessbeschreibung. Ökonomische und technische Parameter werden dazu in einem interdisziplinären Ansatz kombiniert.

Hinsichtlich der Anwendung der kombinierten oder integrierten Ansätze anhand konkreter Produkte oder Prozesse, sind vor allem die Arbeiten von Auer et al. (2017), Witik et al. (2011), Shama et al. (2015), Lindner und Schmitt (2015), Delogu et al. (2018), Sell et al. (2014), Simões et al. (2016) und Gantar et al. (2013) relevant. Auer et al. (2017) wenden eine Kombination von LCA und LCC zur ökonomischen und ökologischen Beurteilung unterschiedlicher Fertigungsketten zur Herstellung von Glasbehältnissen an. Auch Witik et al. (2011) verwenden eine Kombination dieser beiden Methoden, um Stahl, Magnesium sowie verschiedene Verbundwerkstoffe in der Automobilindustrie zu bewerten und zu vergleichen. Für den Vergleich ziehen sie als Fallbeispiel eine Trennwand zwischen Sitz- und Kofferraumbereich eines Fahrzeugs heran, um leichte Materialien zu bewerten, die Emissionen in der Nutzungsphase eines Fahrzeugs reduzieren können. Witik et al. (2011) bewerten dabei alle Kosten und CO₂-Emissionen, die über den gesamten Lebenszyklus eines Fahrzeugs hinweg anfallen. Zusätzlich nehmen sie drei weitere Einflussgrößen in das Modell mit auf: die Gesundheit des Menschen, die Qualität des Ökosystems und den Ressourcenverbrauch. Eine dazu thematisch sehr verwandte Arbeit wurde von Shama et al. (2015) verfasst, die ein kombiniertes LCA-LCC-Modell aufstellten, um die ökologischen Auswirkungen der Produktherstellung entlang des Lebenszyklus zu reduzieren und gleichzeitig die Kosten zu bewerten. Das Modell und die Fallstudie bezogen sich auf einen indischen Automobilzulieferer mit dem Ziel, verschiedene Konfigurationen eines Fertigungssystems zur Herstellung eines mechanischen Bauteils der Lenkungsbaugruppe zu untersuchen und zu bewerten. Die gleiche Herangehensweise wird auch von Simões et al. (2016) gewählt, die eine integrierte LCA- und LCC-Analyse durchführten, um verschiedene Designs für Multimedia-Lösungen im Fahrzeug in Bezug auf ökologische Aspekte und Kosten zu vergleichen. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der Materialwahl in der Entwicklungsphase der Multimedia-Lösungen, da es Designlösungen auf Polymer- oder auf Metallbasis ohne Schrauben gibt. Ähnlich verfahren Lindner und Schmitt (2015) mit einer LCA- und LCC-Analyse der gesamten Herstellungskette von Automobil-Strukturteilen aus Verbundwerkstoffen im Hinblick auf ihre Umweltauswirkungen und Kosten entlang der Herstellungskette.

Neben den genannten Arbeiten, die sich auf Fallstudien der Automobilindustrie konzentrieren, sind auch zwei Arbeiten von Interesse, die kombinierte LCA- und LCC-Analysen im Bereich der Chemieindustrie und Kunststoffverarbeitung anwenden. Sell et al. (2014) und Sell et al. (2013) widmen sich der Entscheidungshilfe für umweltfreundliche chemische Produktionsprozesse, da diese für eine langfristige Nachhaltigkeit benötigt werden und gleichzeitig zur zukünftigen Wettbewerbsfähigkeit von Unternehmen beitragen. Als geeignete Methoden machen Sell et al. (2014) ebenfalls eine Kombination einer LCC- und LCA-Analyse aus. In ihren Studien vergleichen sie chemische Produktionsverfahren im Batch-Prozess mit Produktionsverfahren im mikroverfahrenstechnischen Betrieb. Gantar et al. (2013) vergleichen drei verschiedene Spritzgusswerkzeuge, mit denen eine Million identische Kunststoffteile erzeugt werden sollen. Die Studie umfasst die Umweltauswirkungen entlang des gesamten Lebenszyklus (cradle-to-grave) und soll Aufschluss bezüglich der Ressourceneffizienz der unterschiedlichen Spritzgussverfahren geben.

Bisher wurden Publikationen vorgestellt, die entweder die theoretische Entwicklung oder Weiterentwicklung integrierter Ansätze oder die Anwendung bestehender Methoden thematisieren. Im Folgenden werden Veröffentlichungen aufgeführt, in denen, über die Anwendung von LCA und LCC oder der MFKR hinaus, zusätzlich eine Entscheidungsunterstützung auf Basis von MCDM-Methoden durchgeführt wurde. Miah et al. (2017) schlagen in dem oben erwähnten hybridisierten Rahmenwerk eine Entscheidungsfindung auf Basis von AHP und TOPSIS vor. Des Weiteren sind in dieser Kategorie die Veröffentlichungen von Chien et al. (2012), Chaabane et al. (2011), Cerri et al. (2013), Kuo und Lee (2019) und Steinhilper et al. (2013) zu nennen.

In dem Artikel von Chien et al. (2012) geht es um das Auswählen des günstigen und umweltfreundlichen Fügens von Blechen unter Berücksichtigung vorgegebener Leistungsstandards. Als mögliche Fügeverfahren werden Schweißen, Kleben und Nieten miteinander verglichen. Chien et al. (2012) stellen ein LCA- und ein LCC-Modell auf und bewerteten die Umweltauswirkungen bzw. die Kosten auf Grundlage des Energieverbrauchs und der Materialzu- und -abflüsse. Die Ergebnisse werden anschließend in einen mehrkriteriellen Entscheidungsalgorithmus übertragen, mit dem die paretooptimalen Lösungen für Anwendungen am Automobil berechnet werden können. Chaabane et al. (2011) stellen eine umfassende Methodik zur Lösung von Problemen bei der Gestaltung nachhaltiger Lieferketten vor, bei der die Kohlenstoffemissionen und die gesamten Logistikkosten, einschließlich der Auswahl von Lieferanten und Subunternehmern, der Technologiebeschaffung und der Wahl der Transportmittel, in der Planungsphase berücksichtigt werden. Weitergehend werden im Modell auch die durchschnittlichen Vermeidungskosten als Funktion der Kohlenstoffemissionsreduktion berechnet. Aus den Vermeidungskosten können Manager ableiten, ob es billiger ist, in emissionsmindernde Technologien zu investieren oder CO₂-Zertifikate zu kaufen. Sämtliche Daten werden im Ansatz als gegeben vorausgesetzt. Die vorgeschlagene Methodik bietet Entscheidungsträgern ein mehrkriterielles, gemischt ganzzahliges lineares Programmierungsmodell zur Bestimmung des Kompromisses zwischen wirtschaftlichen und ökologischen Erwägungen. Die optimalen Lösungen werden mittels Goal Programming bestimmt und anhand einer Pareto-Front dargestellt. Als Fallstudie wird das Optimierungsmodell auf ein Werk eines kanadischen Stahlhersteller angewendet.

Ein ähnlicher linearer Optimierungsansatz wird auch von Cerri et al. (2013) aufgestellt, die jedoch im Unterschied zu Chaabane et al. (2011) zusätzlich eine Entscheidungsunterstützung durch die WSM-Methodik anbieten. Das Modell wird exemplarisch zur Bewertung der Fertigungskette eines Automobilzulieferers angewendet. In ihren Modellberechnungen konzentrieren sich die Autoren ausschließlich auf die Bewertung bzw. Auswahl von Fertigungsverfahren und nicht auch auf die Lieferantenauswahl wie in Chaabane et al. (2011). Auch Kuo und Lee (2019) verwenden die Pareto-Optimierung, um ein Lieferkettennetzwerk auf Grundlage des ökologischen Fußabdrucks

und der Kosten eines Produkts zu entwerfen. Adressaten des Optimierungsmodells sind in erster Linie Produktdesigner und Lieferkettenmanager. Das Modell setzt allerdings voraus, wie andere Arbeiten (Miah et al. (2017), Chaabane et al. (2011) oder Cerri et al. (2013)) auch, dass die zur Berechnung nötigen Daten bereits vorliegen. Veranschaulicht wird das Modell von Kuo und Lee (2019) am Beispiel der Herstellung einer Gartenschere (cradleto-gate). Im Unterschied zu den eben vorgestellten Veröffentlichungen ist der Beitrag von Steinhilper et al. (2013) der einzige unter den relevanten Publikationen, in dem zur Entscheidungsunterstützung die PROMETHEE-Methode verwendet wird, um auch schwache Präferenzen des Entscheidungsträgers berücksichtigen zu können. In Steinhilper et al. (2013) stellen die Autoren im Wesentlichen nur die Vorgehensweise ihres Modells und die angewendeten Methoden vor. Auf eine konkrete Umsetzung der Methoden anhand des gewählten Anwendungsfalls wird jedoch nicht spezifisch eingegangen. So wird auch die Anwendung von PROMETHEE nur skizziert und deren Resultat auf Basis einer Fallstudie präsentiert. Die Autoren kombinieren die Methoden TCO und LCA und nutzen als Grundlage die existierende Methode des Total Cost and Environmental Impact of Ownership (TCEIO). Mittels PROMETHEE wird die Integration der Methoden TCO und LCA in einem Entscheidungsunterstützungsmodell verwirklicht. Das Entscheidungsunterstützungsmodell dient dabei vor allem der Auswahl und Bewertung von Fertigungsverfahren auf Basis ökologischer und ökonomischer Faktoren. Als Fallbeispiel werden die Fertigungsverfahren Stanzen, Laserschneiden und Wasserstrahlschneiden miteinander verglichen.

Vermeidungskosten von THG-Emissionen werden im Rahmen der relevantesten Arbeiten neben der Veröffentlichung von Chaabane et al. (2011) ansonsten nur von Rehl und Müller (2013) berechnet. Rehl und Müller (2013) entwickelten zur Ermittlung der Vermeidungskosten eine integrierte LCA-LCC-Methode. Mithilfe der Vermeidungskostenberechnung beziffern die Autoren die Kosteneffizienz von Technologien zur Reduktion von THG-Emissionen. Beispielsweise zeigen negative Vermeidungskosten finanzielle Einsparungen durch die vorgeschlagenen Technologien an, während positive Vermeidungskosten die Höhe der Investitionen beziffern, um THG-Emissionen einzusparen.

Legende: X = trifft zu		Relevanteste Literatur zur ökologischen und ökonomischen Planung industrieller Wertschöpfungsketten																							
- = trifft nicht zu (X) = trifft teilweise zu		EIGENER ANSATZ	Schrack (2016)	Nertinger (2015)	Rieckhof und Günther (2018)	Viere etal. (2010)	Breun (2016)	Auer et al. (2017)	Witik et al. (2011)	Rebitzerund Nakamura (2008)	Bierer et al. (2015)	Miah et al. (2017)	Rehl und Müller (2013)	Steinhilper etal. (2013)	Chaabane et al. (2011)	Cerri et al. (2013)	Chien et al. (2012)	Kuo und Lee (2019)	Shama et al. (2015)	Delogu et al. (2018)	Kichereret al. (2007)	Sell et al. (2014)	Simões et al. (2016)	Lindnerund Schmitt (2015)	Gantar et al. (2013)
Methodik	(S)LCA (z.B. GWP)	х	х	х	х	(X)	х	х	х	х	х	(X)	х	(X)	х	х	х	(X)	х	х	х	х	х	х	х
	Werksspezifisches (S)LCA in der Lieferkette (Generischer Ansatz)	x		-	-	-	x	-	-	-	-	-	-		-	-	-	-	-	-		-	-	-	
	LCC	х	•	-	-	-	-	х	х	х	х	(X)	х	(X)	(X)	х	х	(X)	х	х	х	х	х	х	х
	MFKR	х	х	х	х	х	•	-	•		х	-		•	-	-		-	•	-	•	•	•	•	•
	Produktherstellerspezifische THG-Vermeidungskosten	x		-		-	-	-		-	-	-	(X)		(X)	-	-	-		-			-	-	
	Anwendung von MCDM	х	•	-	-	-	-	-	-	•	-	(X)	-	(X)	х	х	х	х	-	-	-	-	-	-	-
	Weighted Sum Method (WSM)	x			-			-		-	-	-	-		-	x	-		-	-			-		
	PROMETHEE	х	-	-	-	-	-	-	-	-	•	-	-	х					-	-	•	-	-		-
	Pareto-Optimum/ Pareto-Front	x			-	-	-	-	-	-	-	-	-		x	x	x	x	-	-		-	-		
	Umsetzung als Software/Tool	x	(X)	(X)	(X)	-	x	x	(X)	-	-	-	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
Betrachtete (modellierte) Lebenszyklusphasen	Vorkette	х	•	-	х	(X)	х	х	х	х	(X)	(X)	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х
	Rohstoffverarbeitung/ Materialherstellung	x	x	•	x	(X)	x	x	x	x	(X)	(X)	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
	Bauteilfertigung	х	х	х	х	(X)	•	х	х	х	(X)	(X)	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х
	Nutzung	х	•	-	-	(X)	-	х	х	х	(X)	(X)	х	х	х	х	х	-	-	х	-	х	х	-	х
	End of Life	х	•	-	-	(X)	-	х	х	х	(X)	(X)	х	х	х	х	х	-	-	х	•	х	х	•	х
Anwendungsgebiete	Herstellkosten eines Produkts	x	x	x	x	x	x	x	x	x	(X)	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
	GWP (CO2e) eines Produkts	х	х	х	х	х	х	х	х	х	(X)	х	х	х	х	(X)	х	х	х	х	х	х	х	х	х
	Materialwahl	х	·	-	•	•	•	-	х	-	•	-	•	•	-	-	•	х	х	х	•	-	х	(X)	•
	Lieferantenwahl	х	ŀ	-	•	•	(X)	-	•	•	•	-	•	•	(X)	-	•	х	•	-	•	-	•	•	•
	Wahl der Fertigungstechnik	х	·	-	•	•	•	х	•	-	•	-	х	х	(X)	(X)	х	•	(X)	-	х	-	(X)	(X)	х
	Politik/Gesetzgebung	х	•	-	-	-	х	-	-	-	-	-	(X)	-	(X)	-	-	-	-	-	•	-	-	•	-
Industrie	Eisen- und Stahlindustrie	х	ŀ	-	•	•	х	-	•	-	-	-	•	х	х	-	•	-	-	-	•	•	-	•	•
	Aluminiumindustrie	х	ŀ	(X)	•	•	х	-	•	-	-	-	•	•	-	-	•	•	-	-	•	•	-	•	•
	Chemische Industrie	х	(X)	(X)	•	•	•	-	•	-	-	-	•	•	-	-	•	•	-	-	х	x	-	•	(X)
	Automobil- und Zulieferindustrie	x	·	-	-	-		-	x	-	(X)	-			-	x	x	-	x	x			x	x	

Abbildung 3.13: Ergebnisübersicht der Literaturanalyse der für diese Arbeit relevantesten 23 Veröffentlichungen

Abbildung 3.13 visualisiert das Ergebnis der Literaturanalyse der für die vorliegende Arbeit relevantesten Veröffentlichungen. Es wird nochmals deutlich, dass die Dissertation von Breun (2016) die einzige relevante Veröffentlichung ist, in der ein werksspezifischer Ansatz verfolgt wurde (vgl. Methodik Zeile 2). Die meisten der betrachteten ökonomischen und ökologischen Ansätze befassen sich mit einer Kombination der Methoden LCC und LCA. Bierer et al. (2015) bemängeln diesbezüglich, dass es sich bei der Betrachtung ökonomischer und ökologischer Methoden nur um eine Anwendung zweier Methoden, aber nicht um eine Integration der Methoden ineinander, handelt. Für eine integrierte Bewertung empfehlen sie die MFKR anstelle des LCC. Mit dem theoretischen Vorgehen und den Möglichkeiten der Integration der MFKR mit dem (S)LCA beschäftigten sich bisher jedoch nur Nertinger (2015), Schrack (2016) und Rieckhof und Guenther (2018).

THG-Vermeidungskosten werden nur in den Arbeiten von Rehl und Müller (2013) sowie Chaabane et al. (2011) berechnet. Allerdings sind beide Ansätze zur Ermittlung der Vermeidungskosten nicht wertschöpfungskettenbzw. produktspezifisch, da in beiden Modellen keine Berechnungslogik existiert, mit der die Lieferketten bzw. die Lieferanten spezifisch bewertet werden können. In nur sechs Veröffentlichungen (Miah et al. 2017; Steinhilper et al. 2013; Chaabane et al. 2011; Cerri et al. 2013; Chien et al. 2012; Kuo und Lee 2019) wurde über die ökonomische und ökologische Modellierung und/oder Bewertung hinaus auch eine Methodik zur Entscheidungsunterstützung (MCDM) zur Lösung multikriterieller Entscheidungsprobleme implementiert. Die Beiträge von Steinhilper et al. (2013) und Cerri et al. (2013) sind unter diesen die Einzigen, in denen MADM-Ansätze der Entscheidungsunterstützung verwendet werden. Steinhilper et al. (2013) wählen PROME-THEE und Cerri et al. (2013) die WSM. Fast alle der analysierten Publikationen umfassen den gesamten cradle-to-grave-Produktlebenszyklus. Die übrigen Beiträge konzentrieren sich auf cradle-to-gate (z.B. Breun 2016 oder Lindner und Schmitt 2015) oder auf gate-to-gate-Betrachtungen (z.B. Nertinger 2015).

Bezüglich der Anwendung der entwickelten Ansätze oder Modelle ist zu beobachten, dass sich über die Berechnung der Herstellkosten und CO_2 -Emissionen hinaus, elf der 23 im Detail untersuchten Veröffentlichungen mit der Wahl der Fertigungstechnik befassen (Auer et al. 2017; Rehl und Müller 2013; Steinhilper et al. 2013; Chaabane et al. 2011; Cerri et al. 2013; Chien et al. 2012; Shama et al. 2015; Kicherer et al. 2007; Simões et al. 2016; Lindner und Schmitt 2015; Gantar et al. 2013). Sechs Werke beschäftigen sich mit der Materialwahl (Witik et al. 2011; Kuo und Lee 2019; Shama et al. 2015; Delogu et al. 2018; Simões et al. 2016; Lindner und Schmitt 2015) und drei Werke adressieren die Politik bzw. den Gesetzgeber (Auer et al. 2017, Rehl und Müller 2013 und Chaabane et al. 2011). Die Arbeiten von Rehl und Müller (2013) und Chaabane et al. (2011) wurden als interessant für die Politik eingeordnet, da sowohl die Berechnungslogik als auch die berechneten Vermeidungskosten hilfreich für die Gestaltung zukünftiger CO_2 -Zertifikatspreise sein könnten.

Im Vergleich der adressierten Zielindustrie, beziehen sich acht Beiträge, und damit relativ gesehen die meisten, auf die Automobil- und Zulieferindustrie (Witik et al. 2011; Bierer et al. 2015; Cerri et al. 2013; Chien et al. 2012; Shama et al. 2015; Delogu et al. 2018; Simões et al. 2016; Lindner und Schmitt 2015). Von den übrigen Veröffentlichungen betreffen drei Beiträge die Eisen- und Stahlindustrie (Breun 2016; Steinhilper et al. 2013; Chaabane et al. 2011), zwei die Aluminiumindustrie (Breun 2016 und Nertinger 2015) und fünf die chemische Industrie (Schrack 2016; Nertinger 2015; Kicherer et al. 2007; Sell et al. 2014; Gantar et al. 2013).

3.6 Forschungsbedarf

Auf Basis der in Kapitel 2.7 abgeleiteten Anforderungen an die Planung industrieller Wertschöpfungsketten sowie der in Kapitel 3.2 geführten Methodendiskussion, wurde in Kapitel 3.5 eine Analyse aller relevanten Literaturbeiträge beschrieben und durchgeführt. Die Literaturanalyse zeigt, dass im Bereich der integrierten ökologischen und ökonomischen Planung und Steuerung industrieller Produktionssysteme eine ausgeprägte Forschungslücke existiert, wenn es um die spezifische Modellierung und Bewertung entlang der gesamten Wertschöpfungskette geht (vgl. Abbildung 3.13 und Abbildung 3.14). Aktuell ist kein Entscheidungsunterstützungssystem zur ökonomischen und ökologischen Bewertung von Wertschöpfungsketten veröffentlicht, das die THG-Emissionen der Materialherstellung und -verarbeitung in vorgelagerten Lieferketten werks- bzw. lieferantenspezifisch berücksichtigt. Dieser werkspezifische Ansatz in der Lieferkette würde Endprodukthersteller zukünftig dazu befähigen, ihre Endprodukte mit einem wertschöpfungskettenspezifischen Product Carbon Footprint und ebensolchen Herstellkosten zu versehen. Derzeit basieren Veröffentlichungen zur Materialauswahl oder Lieferantenauswahl hinsichtlich des Kriteriums THG-Emissionen nur auf landesspezifischen Durchschnittswerten aus Ökobilanzdatenbanken. Die Dissertation von Breun (2016) ist die einzige Publikation, in der ein werksspezifischer Ansatz für Stahl- und Aluminiumhersteller entwickelt wurde. Jedoch adressiert die Arbeit eine makroökonomische politische Ebene und keine Unternehmensperspektive der Weiterverarbeitung und Endproduktherstellung. Daher wird der Produktlebenszyklus nicht über die Verarbeitung im Walzwerk hinaus betrachtet. Die Lebenszyklusphasen der Weiterverarbeitung, Nutzung und des End-of-Life entfallen in Breun (2016). Zudem findet in Breun (2016) keine Anwendung der MFKR oder des LCCs statt. Schrack (2016) greift den Gedanken der spezifischen Lieferkette in ihren Ansätzen zur lebenswegbezogenen Analyse zwar ebenfalls auf, allerdings konstatiert sie, dass den Unternehmen die für ihren Ansatz notwendigen Daten der Lieferanten fehlen, da Unternehmen nicht derart eng kooperieren. Der Wettbewerb verhindere diese Kooperation (Schrack 2016). Ohne die Primärdaten⁸ der Lieferanten zu kennen, ist es somit unmöglich, das Gesamtsystem detailliert abzubilden. Dies belegt abermals den Forschungsbedarf nach Abschätzungsverfahren, mit denen die THG-Emissionen der Materialhersteller bzw. ihrer produzierten Materialien je Standort möglichst präzise abgeschätzt werden können, ohne auf Primärdaten angewiesen zu sein. Es bedarf also einer Berechnungslogik, die **nur öffentlich zugänglichen Daten** verwendet, sodass der Ansatz von nahezu jedem Unternehmen oder auch öffentlich/kommunalen Entscheidern verwendet werden kann.

Für die Chemieindustrie gibt es noch keine lieferantenspezifischen Ansätze. Daher haben Unternehmen, z.B. aus der Verpackungs-, Bau- oder Automobilindustrie, derzeit keine Möglichkeit, den werksspezifisch verursachten Carbon Footprint eines Vorprodukts als Kriterium in die Kaufentscheidung zu integrieren. Zusammenfassend liegt dies zum einen darin begründet, dass ein werksspezifischer PCF weder von Chemie-, Stahl- noch Aluminiumherstellern veröffentlicht wird und lediglich europäische Durchschnittswerte verfügbar sind. Zum anderen existieren in der Literatur wie beschrieben keine Modelle, mit denen der PCF werksspezifisch abgeschätzt werden kann, ohne auf vertrauliche, nicht veröffentlichte Primärdaten angewiesen zu sein.

Weitergehend zeigt die Literaturanalyse, dass nach aktuellem Stand kein Ansatz existiert, der sowohl metallische als auch kunststoffbasierte Produkte bewerten kann. Es besteht also auch Forschungsbedarf hinsichtlich eines **generischen Ansatzes**, mit dem nicht nur der gesamte Lebenszyklus, sondern auch verschiedene Produkte aus unterschiedlichen Materialien modelliert und verglichen werden können. Mithilfe eines generischen Ansatz, der für die Materialien Stahl, Aluminium und einige Massenkunststoffe wie Polyp-

⁸ Primärdaten werden in dieser Arbeit als technisch und wirtschaftlich produktionsbezogene Rohdaten eines Herstellers definiert.

ropylen ausgelegt ist, könnten bspw. die THG-Emissionen und Herstellkosten für über 80 % der Produkte bzw. Bauteile für einen Pkw simuliert werden (Martens und Goldmann 2016).⁹ Zudem ist keines der existierenden Entscheidungsunterstützungssysteme so umfassend, dass es zur Materialwahl, zur Lieferantenwahl und zur Wahl der Fertigungstechnik bzw. Fertigungskette eingesetzt werden kann.

Hinsichtlich der Berechnung von THG-Vermeidungskosten eines Industriebetriebs existieren zwei verwandte Veröffentlichungen in der Literatur. Jedoch sind beide Ansätze nicht dazu geeignet, die **spezifischen THG-Vermeidungskosten** eines Produkts zu berechnen, da die Wertschöpfungsketten in diesen Beiträgen nicht lieferanten- und fertigungsspezifisch abgebildet werden können. So ergibt sich auch bzgl. der produktspezifischen THG-Vermeidungskosten eine wesentliche Forschungslücke. Die Berechnung produktspezifischer THG-Vermeidungskosten bietet allerdings einen interessanten Aspekt für die Gesetzgebung, da damit die durchschnittlichen Vermeidungskosten einer Branche berechnet werden können.

Ferner ist, je nach Unternehmen, Land und politischer Entscheidungen unklar, ob THG-Emissionen einen monetären Wert besitzen (z.B. CO₂-Preis) bzw. angerechnet werden können, sodass bislang nur das Entscheidungskriterium Herstellkosten existiert. Ohne entsprechende Kostensätze für THG-Emissionen ist in jedem Fall ein multikriterielles Entscheidungsunterstützungssystem notwendig, mit dem die Entscheidung der Konfiguration der Wertschöpfungskette mindestens auf Basis der Entscheidungskriterien THG-Emissionen und Herstellkosten herbeigeführt werden kann.

⁹ Martens und Goldmann (2016) geben für verschiedene Fahrzeugmodelle der Marken VW und Daimler die Materialzusammensetzungen an. Eine Addition der Gewichtsanteile von Stahl, Aluminium und Polymerwerkstoffen liegt für jedes Modell über 80 %.



Abbildung 3.14: Einordnung des Forschungsansatzes in die Literatur

Zur Veranschaulichung der Forschungslücke wird die vorliegende Arbeit in Abbildung 3.14 von der vorhandenen Literatur abgegrenzt. Zur detaillierten Abgrenzung enthält die Abbildung über die 23 relevantesten Beiträge hinaus (vgl. Kapitel 3.5.2), auch themenverwandte Veröffentlichungen aus den anderen beiden Schnittmengenbereichen der betrachteten Forschungsfelder (Ökonomie, Ökologie, MCDM). Mit themenverwandt ist gemeint, dass es sich beispielsweise um Arbeiten im Bereich Fertigungsplanung, Material- oder Lieferantenauswahl handelt. Im Forschungsfeld Ökonomie und MCDM sind dies Arbeiten von Han et al. (2016), Bradley et al. (2016), Sheikhalishahi und Torabi (2014) und Zhao (2012). Im Bereich Ökologie und MCDM sind die Publikationen von Zimmer (2016), Ma et al. (2018), Geldermann und Rentz (2005), Geldermann et al. (2000), Spengler et al. (1998), Gonzalez-Garay und Guillen-Gosalbez (2018), Kadziński et al. (2017), Nurjanni et al. (2017), Sadrnia et al. (2013), Torres-Ruiz und Ravindran (2018) und Nujoom et al. (2018) zu nennen.

4 Konzept des zu entwickelnden Entscheidungsunterstützungssystems

4.1 Modellanforderungen

Bei der Umsetzung des Entscheidungsunterstützungssystems sind einige Anforderungen zu berücksichtigen, damit das System geeignet ist, die in Kapitel 1.1 formulierten Forschungsfragen zu beantworten und die in Kapitel 3.6 genannten Forschungsbedarfe zu adressieren. Gleichzeitig können durch die Berücksichtigung dieser Anforderungen mehrere methodische Alleinstellungsmerkmale im Vergleich zu in der Literatur verfügbaren Modellen realisiert werden (vgl. Kapitel 3.5.3 und Kapitel 3.6). Die Anforderungen an das zu entwickelnde Entscheidungsunterstützungssystem leiten sich zum einen aus den bereits hergeleiteten Anforderungen an die Planung und Bewertung nachhaltiger Wertschöpfungsketten des Kapitels 2.7 ab. Zum anderen basieren sie auf der Literaturanalyse und dem Forschungsbedarf der Kapitel 3.5.3 bzw. Kapitel 3.6. Überdies werden Modellanforderungen aufgestellt, die notwendig sind, um über die Beantwortung der Forschungsfragen hinaus auch einen praktischen Einsatz des Modells in der Industrie zu ermöglichen. Im Folgenden werden die sich daraus ergebenden Anforderungen an den neuen Entscheidungsunterstützungsansatz und die Modellierung aufgeführt:

 Werksspezifische THG-Emissionen der Materialherstellung: Entwicklung einer Berechnungslogik zur werksspezifischen Abschätzung von THG-Emissionen bei der Herstellung verschiedener Materialien. Diese Anforderung stellt eine der Hauptherausforderungen dar, denn die zu betrachtenden Materialien (z.B. Stahl oder Aluminium) werden durch unterschiedliche Herstellungsprozesse erzeugt, sodass jedes Material eine eigene generische Berechnungslogik erfordert.

- 2. Verwendung öffentlich zugänglicher Daten/Keine Abhängigkeit von Primärdaten: Die Berechnungslogik zur Abschätzung der in Punkt 1 aufgeführten werksspezifischen THG-Emissionen der Materialherstellung soll auf öffentlich zugänglichen Daten beruhen. Auf diese Weise ist gewährleistet, dass jeder Kunde, Modellnutzer bzw. Entscheider die THG-Emissionen des Lieferanten oder Produzenten berechnen und die Datenlage des Modells selbstständig aktualisieren kann.
- 3. Valide Ergebnisse: Die aufgestellte Berechnungslogik soll valide sein, damit die Ergebnisse der werksspezifischen THG-Emissionen, anhand derer die Lieferanten bewertet werden, in Forschung und Praxis verwendet werden können. Dazu wird jedes Teilmodell, das für ein Material Berechnungen durchführt, am Beispiel eines konkreten Werks in Kooperation mit dem Werksbetreiber validiert.
- 4. Kosten des Endprodukts: Das Modell soll es Nutzern und Unternehmen ermöglichen, die wertschöpfungskettenspezifischen Kosten der Leistungserstellung eines Produktes berechnen zu können. Dazu ist eine Materialflusskostenrechnung geeignet, die den gesamten Fertigungsprozess von der Materialbereitstellung bis zum Endprodukt bewertet.
- 5. Product Carbon Footprint ("cradle-to-gate"): Es sollen spezifische PCF-Berechnungen durch die Berücksichtigung werksspezifischer THG-Emissionen des Materialherstellers und fertigungskettenspezifischer THG-Emissionen der Weiterverarbeitung bis zum Endpro-

dukt durchgeführt werden können. Durch das Setzen der Systemgrenze bis zum "gate", also in diesem Fall bis zum Endprodukt, kann der Endprodukthersteller den berechneten PCF den in Punkt 4 berechneten Kosten gegenüberstellen. Das Vorgehen zur Quantifizierung des PCF nach DIN CEN ISO/TS 14067:2013 ist identisch mit der Methodik der Ökobilanz nach DIN EN ISO 14040 und 14044.

- 6. Kontext Kreislaufwirtschaft: Bei der Berechnung der Herstellkosten eines Produkts und der des Product Carbon Footprints sollen Effekte der Weiter- und Wiederverwendung im Modell berücksichtigt werden können.
- 7. Integrierte/gekoppelte Berechnung der Herstellkosten und des Product Carbon Footprints: Es soll eine integrierte Berechnung erfolgen, damit die zugrunde gelegten Daten zu Materialien, Roh-, Hilfsund Betriebsstoffen und den verwendeten Fertigungsmaschinen der Materialverarbeitungsprozesse nicht doppelt eingegeben werden müssen. Dies führt zu einer effizienteren bzw. zeitsparenden Anwendung des Modells und vor allem zu mehr Konsistenz und Transparenz der Ergebnisse (Bierer et al. 2015).
- 8. Product Carbon Footprint ("cradle-to-grave")/nutzungsunabhängig (multi-use): "Cradle-to-grave" Berechnungen sollen möglich sein, um die Konfiguration der Wertschöpfungskette auch unter Berücksichtigung des gesamten Lebenszyklus' beurteilen zu können. Dies beinhaltet vor allem die Berücksichtigung indirekter Emissionen aus der Stromerzeugung oder der Herstellung von Treibstoffen. Dies ist insbesondere für Endprodukte relevant, die im Anschluss an ihre Fertigstellung in einem Kraftfahrzeug verbaut werden. Gerade hinsichtlich der Nutzungsphase und deren Einfluss auf die ganzheitlichen Bewertung ist relevant, mit welcher Antriebstechnik das Fahrzeug ausgestattet ist. Dazu ist es erforderlich, dass mit dem

Modell die Antriebstechniken Verbrennung (Dieselmotor und Ottomotor), BEV (battery electric vehicle) und PHEV (plug-in hybrid electric vehicle) bewertet werden können.

- 9. THG-Vermeidungskosten: Falls ein Preis für THG-Emissionen existiert, kann ein Unternehmen auf Basis der unternehmens- bzw. produktspezifischen THG-Vermeidungskosten entscheiden, ob es billiger ist, die Wertschöpfungskette "grüner" zu konfigurieren oder stattdessen "Strafkosten" bzw. den höheren CO₂-Preis zu zahlen. Falls kein CO₂-Preis vorhanden ist, können die berechneten THG-Vermeidungskosten im Modell als interner Verrechnungssatz genutzt werden, um auf Managementebene zu bestimmen. wie viel dem Unternehmen die Vermeidung von THG-Emissionen wert ist. Gegebenenfalls können dann abhängig von einer internen Kostengrenze Entscheidungen hinsichtlich einer "grüneren" Konfiguration der Wertschöpfungskette getroffen werden. Der Politik bzw. dem Gesetzgeber nutzen die produktspezifischen THG-Vermeidungskosten, um CO₂-Preise festzulegen bzw. steuern zu können. Der Gesetzgeber kann auf Grundlage der Ergebnisse branchenspezifisch überprüfen, in welcher Höhe CO₂-Preise festgesetzt werden können, ohne dass die Unternehmen im nationalen und internationalen Wettbewerb beeinträchtigt werden.
- 10. Barrierefreiheit bzgl. der Anwendung des Modells für Industrieunternehmen: Seitens der Modellanwender wird eine möglichst einfache "barrierefreie" Anwendung des Modells gefordert. Zum einen bezieht sich das auf die Softwareumgebung des Entscheidungsunterstützungssystems. Es soll nur Software verwendet werden, die nahezu jedes Unternehmen bereits verwendet und von der Mehrheit der Mitarbeiter beherrscht wird. Zum anderen soll das Entscheidungsunterstützungssystems über ein Layout bzw. eine Struktur verfügen, die eine intuitive und einfache Anwendung des Systems ermöglicht.

- 11. Baukastenprinzip zur anwendungsorientierten Funktionsweise: Durch eine modularen Aufbau des Entscheidungsunterstützungssystems kann je nach Anwendungsfall/-ziel das passende Systemmodul oder Teilmodul konsultiert werden. Dies trägt zur Verringerung der Komplexität bei der Anwendung des Entscheidungsunterstützungssystems bei. Die Berechnungsmethodik des Systems soll idealerweise so strukturiert sein, dass sich der Lebenszyklus modular aus den einzelnen Phasen zusammensetzt (siehe Modellübersicht in Kapitel 4.2). So ist es möglich, ein Produkt über den gesamten Lebenszyklus zu betrachten oder ggf. einzelne Lebenszyklusphasen, wie die Materialherstellung, Materialverarbeitung oder Produktnutzung, isoliert bewerten zu können.
- 12. Fertigungsanalyse (multi-technology) und Analyse der Effizienzpotenziale: In Verbindung zum vorherigen Punkt 11 bezieht sich diese Anforderung hauptsächlich auf die Lebenszyklusphase bzw. das Systemmodul der Materialverarbeitung. Das Systemmodul zur Materialverarbeitung soll nicht nur das Gesamtergebnis der Herstellkosten und THG-Emissionen der Fertigungskette für ein Endprodukt bestimmen, sondern auch einzelne Fertigungsprozesse analysieren, um innerhalber der Fertigungskette Potenziale zur Effizienzsteigerung zu ermitteln, zum Beispiel über die Bezifferung des Produkt- und Non-Produkt-Outputs eines Prozesses (vgl. Kapitel 3.2.4 zur Materialflusskostenrechnung). Zur Fertigung eines Produkts sind grundsätzlich verschiedene Fertigungsketten unter dem Einsatz alter oder moderner Fertigungsmaschinen denkbar. Im Modell soll ein Vergleich verschiedener Fertigungsketten in Bezug auf THG-Emissionen und Herstellkosten möglich sein.
- 13. Generischer, produkt- und branchenflexibler Modellaufbau: Das Entscheidungsunterstützungssystem sowie seine Teilmodule sollen für verschiedenste Produkte und Branchen anwendbar sein, bei-

spielsweise für Hersteller von Verpackungsmaterialien, Baumaterial/-produkten, Automobilteilen oder gesamten Automobilen. So soll das Entscheidungsunterstützungssystem gemäß der Priorisierung auf die volumenbezogenen, treibhausgasintensivsten Materialien in Kapitel 2.3 von allen Unternehmen eingesetzt werden können, die Stahl, Aluminium oder Kunststoffe weiterverarbeiten.

Die vorgestellten Anforderungen der Materialwahl, Lieferantenwahl, Wahl und Analyse der Fertigungskette und Berechnung der THG-Vermeidungskosten lassen sich teilweise auch in die Ziele und Anforderungen des industriellen Stoffstrommanagements übertragen bzw. integrieren (vgl. Kapitel 3.1). Die vorliegende Arbeit kann zwar einen Beitrag zum industriellen Stoffstrommanagement auf strategischer, taktischer und operativer Ebene leistet, hat aber nicht den Anspruch, alle Fragestellungen des industriellen Stoffstrommanagement zu beantworten. Der Fokus liegt vielmehr auf ausgewählten Fragestellungen, die mit dem modularen Entscheidungsunterstützungssystem beantwortet werden können und dessen Anwendung anhand von Fallstudien demonstriert wird. Hinsichtlich der Fragestellungen bzw. Ziele des Stoffstrommanagements (vgl. Kapitel 3.1) kann die vorliegende Arbeit auf strategischer Planungsebene bspw. bei der Wahl umweltfreundlicher Produktionsstandorte und -verfahren unterstützen. Auf taktischer Ebene trägt das Entscheidungsunterstützungssystem z.B. durch Analysen produktspezifischer Carbon Footprints bei der Planung und Gestaltung umweltfreundlicher Produkte bei. Auf der kurzfristigen operativen Planungsebene ermöglicht die material- und lieferantenspezifische Bewertung des Modells eine umweltfreundliche Auswahl und Bereitstellung der benötigten Roh-, Hilfs- und Betriebsstoffe bzw. deren Substitution durch Sekundärstoffe sowie die dafür notwendige Transparenz. Die Analyse der Fertiabfallarme gungskette ermöglicht zudem eine emissionsund Ablaufplanung der Produktion.

4.2 Modellübersicht

Das in dieser Arbeit entwickelte Entscheidungsunterstützungssystem basiert auf vier Systemmodulen¹: A, B, C und D. Die Systemmodule A, B, und C bilden die wesentlichen Lebenszyklusphasen entlang der Wertschöpfungskette eines Produktes ab und ermöglichen die Berechnung des Carbon Footprints und der Herstellkosten eines Produkts. Systemmodul D nutzt die erzeugten Ergebnisse der Systemmodule A, B und C, um dem Anwender des Entscheidungsunterstützungssystems Empfehlungen zur Konfiguration der Wertschöpfungskette geben zu können. Je nach Anwendungsfall können einzelne Systemmodule von der Berechnung ausgenommen werden. Zur Veranschaulichung der Funktionsweise wird das Modell in die zwei Teile Systemanalyse (I) und Entscheidungsunterstützung (II) gegliedert (vgl. Abbildung 4.1). Die Systemanalyse (Teil I) umfasst die Entwicklung und Anwendung der Systemmodule A, B und C zur Modellierung der untersuchten Wertschöpfungskette. Dies geschieht in enger Kombination mit einer umfassenden Datenrecherche und -beschaffung, damit die in den Modellmodulen hinterlegten entwickelten Berechnungslogiken möglichst plausible Ergebnisse erzeugen. Jedes dieser Systemmodule hat einen immensen Datenbedarf aus unterschiedlichsten Datenguellen. Dies umfasst beispielsweise Treibhauspotenziale von Roh-, Hilfs- und Betriebsstoffen aus Ökobilanzdatenbanken zur Abbildung von Vorketten, Stoffumwandlungskoeffizienten bei Materialherstellungsprozessen oder Produktionszahlen aus den Jahresberichten der Materialhersteller.

¹ Um Irritationen vorzubeugen sei darauf hingewiesen, dass es sich bei der hier gewählten Benennung der Systemmodule nicht um die ähnlich gewählten Modulbezeichnungen aus den Normen für Bauprodukte (EN 15804) und für Bauwerke (EN 15643 und EN 15978) handelt.

Die Systemanalyse erfolgt sukzessive entlang der Wertschöpfungskette und orientiert sich an den drei wesentlichen, in Kapitel 2.1.4 definierten Lebenszyklusphasen Materialherstellung (Systemmodul A), Materialverarbeitung (Systemmodul B) und Nutzung und EoL (Systemmodul C).



Abbildung 4.1: Generelle Funktionsweise und Aufbau des Entscheidungsunterstützungssystems zur ökonomischen und ökologischen Planung und Bewertung von Wertschöpfungsketten

Systemmodul A beinhaltet die *werksspezifische* Modellierung von Materialherstellern zur Abschätzung von THG-Emissionen durch die Entwicklung hybrider S-LCA-Ansätze. Gemäß der Erläuterungen zum S-LCA in Kapitel 3.2.3.7 ist diese Methodik im Rahmen dieser Arbeit besonders geeignet, da der Fokus der ökologischen Betrachtung auf den THG-Emissionen und damit nur auf einer Wirkungskategorie, dem Treibhauspotenzial, liegt. Außerdem geben die Modellanforderungen vor, dass bestenfalls nur öffentlich zugängliche Daten für die Berechnungslogik bzw. das S-LCA verwendet werden sollen. An dieser Stelle leistet der Hybrid-Ansatz Abhilfe, da mithilfe dessen zusätzlicher top-down Betrachtungsweise die Datenlücken der nicht vorhandenen Primärdaten geschlossen werden können (Weidema 2003). Des Weiteren wird bei der Durchführung von LCAs empfohlen, möglichst auf generische Sachbilanzdaten (z.B. aus Ökobilanzdatenbanken) zu verzichten, da solche Durchschnittsdaten die Ergebnisse erheblich beeinträchtigen können (Lang-Koetz et al. 2006) (vgl. Kapitel 3.2.3.7). Auch aus diesem Grund ist ein hybrider S-LCA Ansatz die beste Möglichkeit, verschiedene Materialhersteller werksspezifisch mit einem identischen Modellierungsansatz zu bilanzieren. Detailliertere Erläuterungen zu den entwickelten hybriden S-LCA-Ansätzen folgen in Kapitel 5 zu Systemmodul A.

Durch die Berücksichtigung verschiedener Materialien müssen, wie in Kapitel 4.1 geschildert, materialspezifische Berechnungslogiken entwickelt werden. Systemmodul A umfasst deshalb sechs materialspezifische Untermodule (A1-A6). Diese Untermodule wurden teilweise bereits vom Autor dieser Arbeit veröffentlicht oder mitveröffentlicht und sind unter dem Namen "ECCO₂-Tools" bekannt (ECCO₂-Steel1er in Schiessl et al. (2020)², ECCO₂-Alu1er in Schiessl et al. (2021)³, ECCO₂-HVC und ECCO₂-Basic Chemicals in Müller et al. (2021)⁴). ECCO₂ steht für Evaluation tool to **co**mpare **CO**₂ emissions of the steel/aluminium/chemical industry. In Untermodul **A1** bzw.

² Siehe Schiessl, Andreas; Müller, Richard; Volk, Rebekka; Zimmer, Konrad; Breun, Patrick; Schultmann, Frank (2020): Integrating site-specific environmental impact assessment in supplier selection. Exemplary application to steel procurement. In: J Bus Econ 27.

³ Siehe Schiessl, Andreas; Müller, Richard; Volk, Rebekka; Schultmann, Frank (2021): Site-specific environmental impact assessment as a basis for supplier selections – exemplary application to aluminum In: Journal of Cleaner Production.

⁴ Siehe Müller, Richard; Schiessl, Andreas; Volk, Rebekka; Schultmann, Frank (2021): Assessment of site-specific greenhouse gas emissions of chemical producers: case studies of propylene and toluene diisocyanate In: Journal of Cleaner Production (accepted).

ECCO₂-Steel1er⁵ werden Primärstahlhersteller modelliert, in Untermodul **A2** (ECCO₂-Steel2er) Sekundärstahlhersteller, in **A3** (ECCO₂-Alu1er) Primäraluminiumhersteller, in **A4** (ECCO₂-Alu2er) Sekundäraluminiumhersteller, in **A5** (ECCO₂-HVC) petrochemische Werke, die wertvolle Chemikalien (engl. highvalue chemicals, HVC) erzeugen und in **A6** (ECCO₂-Basic Chemicals) chemische Werke, die chemische Grundstoffe wie Toluoldiisocyanat (TDI) erzeugen. Alle sechs Untermodule (A1-A6) umfassen hinsichtlich dieses werksspezifischen Ansatzes als Systemgrenze das "gate-to-gate"-System eines Materialherstellers. Um den Carbon Footprint eines Produkts eines Werkes auch cradle-to-gate bewerten zu können, werden alle dem Werkstor vorgelagerten Prozesse (Vorkette) durch Ökobilanzdatenbanken abgebildet.

Systemmodul B beinhaltet die "gate-to-gate"-Bilanzierung des Systems "Materialverarbeitung" und bezieht sich somit auf Unternehmen, die Material (z.B. Stahl, Aluminium etc.) einkaufen und es zu Endprodukten weiterverarbeiten. Im Unterschied zu Systemmodul A hat der Anwender des Entscheidungsunterstützungssystems für Systemmodul B Primärdaten zur Verfügung, da der Anwender in der Regel der Endprodukthersteller ist und die Fertigungsprozesse in Systemmodul B somit selbst steuert. Daher kann in Systemmodul B ein Bilanzierungsmodell anstelle eines Abschätzungsmodells entwickelt werden. Über die Bilanzierung der fertigungskettenspezifischen THG-Emissionen der Materialverarbeitung sollen die Primärdaten hinaus dazu verwendet werden, die Herstellkosten eines Produkts entlang der Fertigungskette zu berechnen. Neben den Prozessdaten werden dazu die vom Anwender bzw. Unternehmen gezahlten Einkaufspreise der Materialien der vorgelagerten Prozesse berücksichtigt (z.B. Stahl aus Systemmodul A). Die Berechnungslogik des Systemmodul B besteht aus der Anwendung eines S-LCA gekoppelt mit einer Materialflusskostenrechnung

⁵ Bei der Modellbezeichnung ECCO₂-Steel1er steht das "1er" für Primärstahl. Bei Sekundärmaterial wird entsprechend das Kürzel "2er" verwendet.

(integrierter Ansatz). Entsprechend der oben formulierten Modellanforderungen wird in Systemmodul B zusätzlich die Möglichkeit implementiert, auf die in Systemmodul A berechneten Ergebnisse der Materiallieferanten zuzugreifen; so kann ein Endprodukthersteller die gesamten cradle-to-gate THG-Emissionen seines Produkts bestimmen.

Systemmodul C stellt ein S-LCA-Modul dar, mit dem THG-Emissionen der Nutzungsphase und des Lebensendes (engl. End-of-Life, EoL) eines Produkts abgeschätzt werden können. Die Abschätzung basiert auf unterschiedlichen Parametern und Annahmen, anhand derer die voraussichtliche Nutzungsart detailliert charakterisiert und die THG-Emissionen möglichst präzise prognostiziert werden können. Durch eine Veränderung der Parameter kann zum Beispiel variiert werden, mit welcher Antriebsart ein Kraftfahrzeug betrieben wird oder welche Lebensdauer bzw. Laufleistung für das Kraftfahrzeug zugrunde gelegt wird.

In Teil II des Entscheidungsunterstützungssystem greift das Systemmodul D auf alle Ergebnisse der anderen Systemmodule zu. Es nutzt diese Ergebnisse, um auf Basis der möglichen Materialarten, Lieferanten und Fertigungsverfahren alle kombinatorisch möglichen Konfigurationen der Produkt-Wertschöpfungskette und die zugehörigen THG-Emissionen und Herstellkosten zu berechnen. Die Berechnungslogik berücksichtigt dabei alldiejenigen Materialien, Fertigungsketten und Szenarien der Produktnutzung, die zuvor vom Anwender im Systemmodul aktiviert worden sind. Mit-Berechnung der pareto-optimalen Konfigurationen der hilfe der Wertschöpfungskette können die dominanten Wertschöpfungskettenkonfigurationen und die THG-Vermeidungskosten eines Produkts bestimmt werden. Zur weiteren Entscheidungsunterstützung hinsichtlich der Auswahl einer Wertschöpfungskettenkonfiguration können die multikriteriellen Entscheidungsunterstützungsverfahren WSM oder PROMETHEE durch den Nutzer ausgewählt und eingesetzt werden.

Aus Gründen der Übersichtlichkeit erfolgt die detailliertere Darstellung der Systemmodule A-D in den jeweiligen Kapiteln (Kapitel 5 bis Kapitel 8). Dies schließt vor allem für das Systemmodul A auch Methoden- und Literaturdiskussionen zu material- und werksspezifischen Modellen mit ein, da dies den Rahmen der oben durchgeführten Literaturanalyse sprengen würde.

5 Systemmodul A: Werksspezifische THG-Emissionen der Materialherstellung

In Kapitel 5.1 werden die Teilmodule A1, A2, A3 und A4 zur Abschätzung werksspezifischer THG-Emissionen der Stahl- und Aluminiumherstellung sowie in Kapitel 5.2 die Teilmodule A5 und A6 zur werksspezifischen Abschätzung der THG-Emissionen der Herstellung von HVC und sonstiger chemischer Grundstoffe vorgestellt. Alle Teilmodule werden am Beispiel nationaler und/oder internationaler Materialhersteller angewendet. Das Kapitel schließt in Kapitel 5.3 mit einem Zwischenfazit zu den wichtigsten Erkenntnissen aus der Konzeptionierung, Entwicklung und Anwendung der Teilmodule sowie einer kritischen Würdigung der entwickelten werksspezifischen Modellansätze.

5.1 Stahl- und Aluminiumherstellung: Teilmodule A1-A4

Nach der allgemeinen Problemstellung und Zielsetzung der Modellansätze für die Teilmodule zur Stahl- und Aluminiumherstellung (A1-A4) (Kapitel 5.1.1), wird in Kapitel 5.1.2 das Vorhaben des werksspezifischen Ansatzes in die Literatur eingeordnet und wesentliche Forschungslücken herausgearbeitet. Daran schließt sich in Kapitel 5.1.3 die Entwicklung eines generischen Bilanzierungsansatzes an, der für alle Metalle angewendet bzw. auf sämtliche Herstellungsverfahren von Metallen übertragbar sein soll. Die für diesen Forschungsansatz notwendigen Daten werden in Kapitel 5.1.4 beschrieben. Anknüpfend an diese allgemeinen Kapitel wird in Kapitel 5.1.5 das erste Teilmodul A1 bzw. das darin inbegriffene ECCO₂-Steel1er-Modell vorgestellt, mit dem die THG-Emissionen der Primärstahlerzeugung in integrierten Hüttenwerken werksspezifisch abgeschätzt werden können. Entsprechend thematisieren die Kapitel 5.1.6, 5.1.7 und 5.1.8 die Teilmodule A2, A3 und A4 zur werksspezifischen Abschätzung der Sekundärstahlerzeugung (ECCO₂-Steel2er-Modell), Primäraluminiumherstellung (ECCO₂-Alu1er-Modell) und Sekundäraluminiumherstellung (ECCO₂-Alu2er-Modell).

Teile dieses Kapitels 5.1 wurden bereits vom Autor dieser Arbeit in Schiessl et al. (2020)¹, Schiessl et al. (2021)² und Müller et al. (2021)³ veröffentlicht. An manchen Stellen wird auf Details in diesen Veröffentlichungen verwiesen. Entsprechende Hinweise erfolgen zu Beginn der jeweiligen Kapitel.

5.1.1 Problemstellung und Zielsetzung

Aus Kapitel 2.3 ist bekannt, dass Metalle und Metallerzeugnisse 28 % der jährlichen industriebedingten THG-Emissionen in Deutschland verursachen, wovon 92 % allein auf die Erzeugung von Rohstahl und Rohaluminium entfallen. In diesem Teil der Arbeit wird ein Ansatz entwickelt, mit dem die THG-Emissionen der Rohstahl- und Rohaluminiumerzeugung werksspezifisch abgeschätzt werden können, um effiziente und weniger effiziente Werke iden-

¹ Siehe Schiessl, Andreas; Müller, Richard; Volk, Rebekka; Zimmer, Konrad; Breun, Patrick; Schultmann, Frank (2020): Integrating site-specific environmental impact assessment in supplier selection. Exemplary application to steel procurement. In: J Bus Econ 27.

² Siehe Schiessl, Andreas; Müller, Richard; Volk, Rebekka; Schultmann, Frank (2021): Site-specific environmental impact assessment as a basis for supplier selections – exemplary application to aluminum In: Journal of Cleaner Production.

³ Siehe Müller, Richard; Schiessl, Andreas; Volk, Rebekka; Schultmann, Frank (2021): Assessment of site-specific greenhouse gas emissions of chemical producers: case studies of propylene and toluene diisocyanate In: Journal of Cleaner Production (accepted).

tifizieren zu können (vgl. Forschungsbedarf in Kapitel 3.6). Spezifische Legierungen werden aus Gründen der Vergleichbarkeit dabei bewusst vernachlässigt, da die verschiedenen Werke aufgrund von Kundenanforderungen häufig unterschiedliche Legierungen produzieren. Die Berücksichtigung des Legierungsprozesses bei der Abschätzung der THG-Emissionen würde ohnehin keinen Einfluss auf die CO₂-Effizienz eines Werkes haben, da die Herstellung der notwendigen Legierungselemente, wie z.B. Chrom, Molybdän, Mangan, Magnesium, Kupfer, Silicium oder Zink, außerhalb der Systemgrenze des Stahl- oder Aluminiumwerkes bei anderen Metallherstellern erfolgt. Die Bewertung von THG-Emissionen erfolgt hier nach der CML-Methode für die Wirkungskategorie Treibhauseffekt (Klimaerwärmung) anhand des Charakterisierungsfaktors "Treibhauspotenzial" (GWP) über 100 Jahre (GWP100) in CO₂e (vgl. Kapitel 3.2.3.5).

Bei der Entwicklung des neuen Ansatzes gilt es vor allem, die Hindernisse zu überwinden, die sich aus der mangelnden Datenlage und Datentransparenz ergeben. Diese liegen darin begründet, dass es sich vor allem bei werksspezifischen Produktionsdaten in der Regel um unternehmensinterne Daten handelt, die dem Industriegeheimnis unterliegen und daher nicht öffentlich zugänglich sind (vgl. Kapitel 3.6). Gemäß der Modellanforderungen in Kapitel 4.1 soll der Ansatz daher auf öffentlich verfügbaren Daten aufbauen und zudem so generisch entwickelt werden, dass dieser auf unterschiedliche Materialien (Primär- und Sekundärstahl sowie Primär- und Sekundaluminium) und deren Hersteller übertragbar ist. Sowohl in integrierten Stahlwerken als auch in Aluminium-Hüttenwerken existiert eine hohe Komplexität aufgrund der Material- und Energieströme und des Handels mit Zwischenprodukten unterschiedlicher Fertigungstiefen zwischen Werken verschiedener Hersteller. Dies erschwert zusätzlich eine werksspezifische Modellierung bzw. Zuordnung der Material- und Energieströme.

Im Rahmen der Literaturanalyse in Kapitel 3.5.3 konnte bereits herausgearbeitet werden, dass die Dissertation von Breun (2016) der einzige Beitrag in der Literatur ist, in dem THG-Emissionen verschiedenster Metallhersteller werksspezifisch modelliert werden und gleichzeitig auch die ökonomische Perspektive bewertet wird. In Kapitel 5.1.2 wird eine zusätzliche, spezifischere Literaturanalyse durchgeführt, die in Abgrenzung zur obigen Literaturanalyse nun sämtliche Beiträge zur Bilanzierung von THG-Emissionen in der Metallindustrie berücksichtigt und sich nicht wie bisher auf kombinierte ökologisch-ökonomische Beiträge fokussiert. Auf diese Weise soll untersucht werden, ob weitere Beiträge existieren, die Potenziale zur Erweiterung oder Übertragbarkeit enthalten, um die gesetzten Ziele der Teilmodule A1-A4 zu erfüllen.

5.1.2 Literaturdiskussion und Forschungslücken

Im letzten Jahrzehnt wurde häufig die Methode des Life Cycle Assessments verwendet, um die THG-Emissionen der Stahl- und Aluminiumindustrie zu evaluieren (Burchart-Karol 2011; 2013; Bieda 2014; Gielen und Moriguchi 2002; Huang et al. 2010). Entsprechend existieren in der Literatur sowohl zahlreiche landesspezifische als auch werksspezifische LCA-Studien, in denen eine Wirkungsabschätzung der Wirkungskategorie GWP (vgl. Kapitel 3.2.3) oder auch weiterer Wirkungskategorien durchgeführt wurde.

Landesspezifische LCA-Studien zur Stahlindustrie auf Basis landesspezifischer Durchschnittswerte stammen beispielsweise von Li et al. (2016) für China, Scaife et al. (2002) und Norgate et al. (2007) für Australien oder von Burchart-Korol (2013) für Polen. Mit LCA-Studien auf Werksebene befassten sich unter anderen Huang et al. (2010), Bieda (2012a; 2012b; 2018), Olmez et al. (2016) oder Renzulli et al. (2016). Huang et al. (2010) untersuchten ein Werk in China, Bieda (2012a; 2012b; 2018) und Bieda et al. (2018) ein Werk in Polen, Olmez et al. (2016) ein Werk in der Türkei und Renzulli et al. (2016) ein Werk in Italien. Bis auf die Studien von Bieda (2012a; 2012b; 2018) und Bieda et al. (2018), die eine gate-to-gate-Betrachtung durchgeführt haben, wurden alle anderen Studien cradle-to-gate bilanziert.

Mit der cradle-to-gate-Bewertung des GWPs in der Aluminiumerzeugung befassten sich auf Landesebene z.B. Tan und Khoo (2005), Norgate et al. (2007), Ciacci et al. (2014), Suciati und Goto (2014), Yang et al. (2019), Farjana et al. (2019), Kovács und Kiss (2016), Nunez und Jones (2016) und Paraskevas et al. (2016). Tan und Khoo (2005) und Norgate et al. (2007) konzentrierten sich auf die Bewertung der Aluminiumerzeugung in Australien, Ciacci et al. (2014) auf die in Italien, Suciati und Goto (2014) auf die in Indonesien, Yang et al. (2019) auf die in China und Farjana et al. (2019) auf die in den USA. Die Studien von Kovács und Kiss (2016), Nunez und Jones (2016) und Paraskevas et al. (2016) befassen sich nicht mit einem spezifischen Land, sondern ermöglichen länderspezifische Vergleiche, indem beispielsweise landesspezifische Strommixe berücksichtigt werden können. Paraskevas et al. (2016) vergleichen auf diese Weise die THG-Emissionen der Aluminiumherstellung 29 verschiedener Länder. Auf werksspezifischer Ebene existieren unter anderen die cradle-to-gate LCA-Studien von Kornelíusdóttir (2014) für ein Werk auf Island und von Schmidt und Thrane (2009) für ein Werk auf Grönland.

Weitere LCA-Studien zur Aluminiumherstellung können darüber hinaus Liu und Müller (2012) entnommen werden, die zahlreiche Studien analysierten und herausstellten, dass sich die Ergebnisse zwischen 5,92 und bis zu 41,1 kgCO₂e/kg Primäraluminium sehr stark unterscheiden. Schwierigkeiten hinsichtlich der Vergleichbarkeit der Studien ergeben sich durch die Verwendung unterschiedlicher LCI-Daten, Allokationsmethoden, Annahmen, Systemgrenzen und Strommixe (Liu und Müller 2012). Gleiches betrifft auch die LCA-Studien zur Stahlherstellung. So berücksichtigen einige Studien die Verwendung interner Prozessgase als Energieträger bei der Stahlproduktion sowie die Verwertung von Schlacken im Rahmen von Gutschriftverfahren bei der Bilanzierung (z.B. Scaife et al. 2002), während andere die Verwertung von Nebenprodukten nicht in die Bilanzierung mit aufnehmen (z.B. Renzulli et al. 2016). Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass die meisten Ansätze landesspezifisch und die darin durchgeführten Berechnungen aufgrund von landesspezifischen Durchschnittsdaten keine werksspezifischen Berechnungen zulassen. Zwar existieren bereits zahlreiche werksspezifische Studien (s.o.), doch wurden diese allesamt für jeweils nur ein bestimmtes Werk durchgeführt. So fehlt es diesen einerseits an einer generischen Berechnungslogik, die eine Anwendung auf andere Werke ermöglicht, andererseits ist eine Übertragbarkeit bisheriger Modellansätze auf andere Werke kaum möglich, da die notwendigen internen Prozessdaten der Hersteller in der Regel geheim gehalten werden (vgl. Kapitel 3.5.3 und Kapitel 3.6).

Das Modell von Breun (2016), das ein nichtlineares Optimierungsmodell (NLP) mit einem Input-Output-Modell (nach Leontief 1936) kombiniert (vgl. Kapitel 3.5.3), ist also das einzige Modell, das zur Simulation von THG-Emissionen spezifischer Metallhersteller eingesetzt werden kann. Ein Abgleich des Modells, mit dem bisherigen identifizierten Forschungsbedarf (Kapitel 3.6) und den darauf basierenden, definierten Modellanforderungen (Kapitel 4.1) zeigt, dass Breun (2016) jedoch nicht die Anforderungen und Ziele dieser Arbeit erfüllt und nicht für einen praktischen Einsatz geeignet zu sein. Das Modell kann nur in MATLAB bedient werden, wofür die Softwarelizenz und andererseits vor allem die Softwarekenntnis vorhanden sein muss. Gleichzeitig ist der Modellaufbau und die Modellprogrammierung so komplex, dass eine Aktualisierung von Daten oder das Hinzufügen weiterer Werke eine lange Einarbeitung in das Modell erfordert und nur von Experten durchgeführt werden kann. In dieser Hinsicht erfüllt das Modell auch nicht den Anspruch an die generische Berechnungslogik. Die Implementierung weiterer Hersteller oder die Übertragbarkeit der Logik auf weitere Metalle in das Modell von Breun (2016) erfordert einen nicht vertretbaren Zeitaufwand, um großflächig industriell eingesetzt werden zu können.

Die Forschungslücke und das Ziel des folgenden Forschungsansatzes der Teilmodule A1-A4 sind also die Entwicklung eines generischen, werksspezi-

fischen Ansatzes zur Abschätzung von THG-Emissionen von Stahl- und Aluminiumherstellern, der ebenso präzise Ergebnisse wie das Modell von Breun (2016) erzielt, allerdings einfacher anzuwenden ist und schnellere Rechenzeiten bietet. Diese Forschungslücke wird im Folgenden durch die Entwicklung neuer Berechnungslogiken und die Weiterentwicklung des Ansatzes von Breun (2016) geschlossen.

5.1.3 Forschungsansatz und Methode

Der neue Ansatz baut folglich auf den Vorarbeiten von Breun (2016) auf. Im Gegensatz zum Modell nach Breun (2016) erfolgt die Berechnung der THG-Emissionen jedoch nicht simultan, sondern sequentiell. Dadurch kann der neue Ansatz auf verschiedene Produktionsverfahren und Anlagenkonfigurationen angepasst werden oder auch auf andere Materialien übertragen werden, ohne dass die gesamte Programmierung des Modells neu erarbeitet werden muss. Die neue Berechnungslogik zeigt im Unterschied zum Modell nach Breun (2016) zudem eine Reduzierung der Komplexität bei gleichbleibender Genauigkeit der Ergebnisse. Durch die Komplexitätsreduktion sowie eine Implementierung der Modelle in der Microsoft VBA-Sprache (Visual Basic for Applications), die über die weitverbreitete Software Microsoft Excel bedient werden können, wird letztlich eine hohe Praxistauglichkeit für den industriellen Gebrauch gewährleistet.

Der neue Ansatz kann als ein kombinierter Ansatz betrachtet werden, der auf dem Prozess-LCA (vgl. Kapitel 3.2.3.7) basiert und auf Werksebene sowohl bottom-up als auch top-down öffentliche Daten verwendet. Dadurch sind die Modelle unabhängig von der Verfügbarkeit unternehmensinterner Daten einsetzbar. Sollten jedoch Primärdaten eines Herstellers vorliegen, lässt das Modell eine einfache Integration dieser Daten zu und ermöglicht auf diese Weise eine Verfeinerung der Ergebnisse. Der generische sequentielle Berechnungsansatz ist in Abbildung 5.1 schematisch dargestellt. Eine Anpassung des generischen Ansatzes auf die verschiedenen Metalle und Herstellungsverfahren erfolgt in den entsprechenden Kapiteln zu den Berechnungslogiken der Teilmodule.


Abbildung 5.1: Generischer sequentieller Berechnungsansatz zur Abschätzung werksspezifischer THG-Emissionen in der Metallindustrie

(S1): Die generische Logik ist derart konzipiert, dass in einem 1. Schritt (S1) die Produktionsvolumina (PV) aller am Metallerzeugungssprozess beteiligten Produktionsanlagen *i* eines Werks *l* für jeden Prozessschritt ermittelt werden ($PV_{ps_x,i,l}$ =Produktionsvolumen, ps_x = Prozessschritt x ($x \in$ $\{1, ..., X\}$, *i* = Anlagentyp (*i* $\in \{1, ..., n\}$), *l* = Werk (*l* $\in \{1, ..., m\}$). Dies ist teilweise durch Recherche, aber überwiegend nur durch Berechnung möglich, da von Herstellern häufig nur das Produktionsvolumen des Endprodukts⁴ bzw. des am meisten gehandelten Produkts eines Werks veröffentlicht wird. Dieser veröffentlichte Wert, z.B. produzierte Tonnen Roheisen oder Rohstahl pro Jahr, wird als Ausgangsgröße bzw. Bezugsgröße genommen, um die Produktionsvolumina vor- und nachgelagerter Produktionsanlagen zu bestimmen. Die Berechnung erfolgt auf Basis von Stoffumwandlungskoeffizienten und unter Berücksichtigung der jeweiligen vorhandenen Anlagenkapazitäten eines Werkes. Die Berechnung der Produktionsvolumina ist die Grundlage für die folgenden Berechnungen zu den spezifischen Stoff- und Energieflüssen und ermöglicht die spätere Bewertung des Handels von Zwischenprodukten.

(S2): In einem 2. Schritt werden Energie- und THG-Bilanzen von Nebenprodukten, hauptsächlich von Prozessgasen, erstellt. Dieser Schritt ist vor allem für Herstellungsverfahren wichtig, in denen Prozessgase einer Anlage als Energieträger für andere Produktionsanlagen verwendet werden können

⁴ Das meistgehandelte Produkt wird hier sowie für das gesamte Kapitel 5 Endprodukt genannt und meint jenes Produkt, das den Produktionsprozess eines Werks bis zum Ende durchlaufen hat und zur weiteren Verwendung in nachgelagerten Betrieben bereitsteht. Diese Definition ist jedoch klar abzugrenzen, von der in Kapitel 1.2 bereits gewählten Definition, die besagt, dass Endprodukte Produkte darstellen, die keine weitere Formveränderung mehr erfahren (vgl. Kapitel 1.1). Für Kapitel 5 wird eine andere Definition von "Endprodukt" verwendet, da sich die finalen Produkte dieses generischen werksspezifischen Ansatzes deutlich unterscheiden können und andere mögliche Bezeichnungen wie Fertigerzeugnis oder Halbzeug falsch wären. So ist Rohstahl beispielsweise weder Halbzeug noch Fertigerzeugnis, aber das Produkt (Endprodukt) eines Stahlwerks, aus dem im Walzwerk verschiedene Halbzeuge erzeugt werden könnten.

(Prozessintegration). Falls ein Werk zur weiteren Effizienzsteigerung ein eigenes Kraftwerk am Standort betreibt, um aus überschüssigen Prozessgasen Strom zu erzeugen, wird dies per Gutschrift in der THG-Bilanzierung berücksichtigt (siehe S7).

(S3): Im anschließenden Schritt 3 werden basierend auf den anlagenspezifischen Produktionsvolumina aus S1 und anlagenspezifischen Emissionsfaktoren die gate-to-gate THG-Emissionen einer Anlage <u>bottom-up</u> berechnet.

(S4): Im 4. Schritt werden die in S3 bottom-up berechneten THG-Emissionen der Anlagen mit den bottum-up berechneten Gesamtemissionen eines Werks ins Verhältnis gesetzt, um die offiziell berichteten Gesamtemissionen eines Werks auf die einzelnen Prozessschritte bzw. Produktionsanlagen zu allokieren. Hier wird somit sowohl die bottom-up als auch die <u>top-down</u> Methode verwendet, um die anlagenspezifischen THG-Emissionen möglichst präzise zu bestimmen.

(S5): In Schritt 5 erfolgt der wichtigste Teil der werksspezifischen Betrachtung: die Integration des Handels von Zwischenprodukten in die Bilanzierung. Einige Werke verfügen über Produktionsanlagen die Outputs erbringen, die unter oder über den Produktionsmengen oder -kapazitäten nachgelagerter Prozesse liegen. Diese dann überschüssigen oder zu geringen Mengen und ihr Zwischenhandel muss in der THG-Bilanzierung berücksichtigt werden, um die in S4 ermittelten werksspezifischen THG-Emissionen weiter zu präzisieren. Dazu werden alle betrachteten Werke als vollintegrierte Werke simuliert, d.h. unabhängig von der Anlagenkonfiguration bzw. vom Vorhandensein von Anlagen in einem Werk, wird angenommen, dass ein Werk alle Zwischenprodukte intern herstellen kann. Daraus ergeben sich sogenannte theoretische Produktionsvolumina pro Prozessschritt. Als Bezugsgröße bzw. Referenzprodukt der theoretischen Produktionsvolumina wird die produzierte Menge des Endprodukts (z.B. Rohstahl, Rohaluminium) definiert ($PV_{ps_x,i,l} = PV_{ps_x,i,l}^{theor}$, PV = Produktionsvolumen, ps_x = Prozessschritt x ($x \in \{1, ..., X\}$), i = Anlagentyp ($i \in \{1, ..., n\}$), l = Werk ($l \in$

 $\{1, ..., m\}$). Für alle vor- und nachgelagerten Prozesse wird dabei werksspezifisch berechnet, wie hoch die Produktionsvolumina theoretisch sein müssten, um die real produzierte Menge des Referenzprodukts erzeugen zu können.

Durch tatsächliche Produktionsmengen (S1) und theoretische Produktionsmengen (S5) können Über- und Unterproduktionen einzelner Anlangen ermittelt (S6), und die Mengen zwischengehandelter Zwischenprodukte identifiziert werden. Entsprechen die tatsächlichen Produktionsmengen jeder Anlage eines Werks den theoretischen Produktionsmengen, so findet kein Zwischenhandel statt, und die Allokation der berichteten THG-Emissionen auf die Werke ist abgeschlossen. Findet jedoch ein Zwischenhandel statt, werden die allokierten THG-Emissionen der einzelnen Prozessschritte gemäß der Schritte S6 bis S8 bereinigt, um die Genauigkeit der Ergebnisse zu erhöhen. Die Bereinigung umfasst dabei eine verursachungsgerechte Zuweisung der entstandenen THG-Emissionen.

(S6): In Schritt 6 werden die theoretischen Produktionsvolumina auf Anlagenebene nun mit den in S1 ermittelten tatsächlichen Produktionsvolumina verglichen. Sind die tatsächlichen bzw. die berechneten Produktionsvolumina einer Anlage größer als die theoretisch nötigen Produktionsvolumina, wurde überproduziert und entsprechende Zwischenprodukte verkauft. Analog wurden bei einer Unterproduktion Zwischenprodukte zugekauft. Die gleiche Berechnung wird auch für Nebenprodukte wie Prozessgase durchgeführt, da überschüssige Prozessgase in werkseigenen Kraftwerken zur Stromerzeugung eingesetzt werden können.

(S7): Die Berücksichtigung des Zwischenhandels und erzeugten Stroms in der Berechnung der werksspezifischen THG-Emissionen erfolgt in Schritt 7. Das bedeutet, dass nur die THG-Emissionen einem Werk zugeordnet werden, die auch tatsächlich der Erzeugung eines definierten Endprodukts entsprechen. THG-Emissionen für Zwischenprodukte, die in anderen Werken weiterverarbeitet werden, werden also herausgerechnet (siehe Schritt 8). Andersherum werden zugekaufte Zwischenprodukte mit einem CO₂e-Rucksack versehen. Die THG-Emissionen die durch die Herstellung der verkauften Zwischenprodukte verursacht wurden, werden mit dem werkseigenen Emissionsfaktor bemessen. Analog wird die Menge des verkauften Stroms mit dem Emissionsfaktor des werkseigenen Kraftwerks in die entsprechenden THG-Emissionen überführt. Werden Zwischenprodukte eingekauft, so werden diese mit dem entsprechenden durchschnittlichen internationalen Emissionsfaktor der Industrie berücksichtigt.

(S8): In Schritt 8 werden die in S4 berechneten Ergebnisse schließlich um die in S7 ermittelten THG-Emissionen bereinigt. Auf diese Weise können die berichteten Emissionen eines Werks zum einen den einzelnen Produktionsprozessen zugewiesen werden und zum anderen spezifischen Endprodukten zugeordnet werden. So wird eine Referenzgröße geschaffen, anhand derer verschiedene Werke miteinander verglichen werden können. Durch die Addition aller THG-Emissionen der Anlagen eines Werks können die gesamten direkten gate-to-gate Emissionen pro Einheit des Endprodukts berechnet werden.

(S9): In Schritt 9 werden die indirekt verursachten THG-Emissionen durch die Nutzung von fremderzeugtem Strom in die Berechnung integriert. Zur Bewertung wird der landesspezifische Emissionsfaktor der Strombereitstellung (Strommix) verwendet. Als Ergebnis von S9 resultieren also die gesamten direkten, gate-to-gate Emissionen, inklusive der Berücksichtigung des für die Produktion des Endprodukts verwendeten Stroms und seiner Emissionen.

(S10): Im letzten Schritt 10 werden alle weiteren THG-Emissionen ermittelt (zusammengefasst in "Vorkette"), die in vorgelagerten Prozessen außerhalb des gate-to-gate Systems anfallen. Durch Addition der THG-Emissionen der S9 und S10 ergeben sich die cradle-to-gate(out) THG-Emissionen. Durch eine Normierung der gesamten THG-Emissionen eines Werkes auf die erzeugte Menge an Rohstahl können die Product Carbon Footprints (cradle-to-gate) verschiedener Werke miteinander verglichen werden.

Zur Einordnung des vorgestellten Ansatzes in die verschiedenen, existierenden LCA-Ansätze eignet sich sowohl das Schema zur Darstellung der Ebenen und Dimensionen der Lebenszyklusanalyse (vgl. Abbildung 5.2) nach Guinée et al. (2011) als auch die entsprechende Weiterentwicklung nach Zimmer (2016). Während das Prozess-LCA in der Regel ausschließlich auf "Produktebene" durchgeführt wird, wird der Betrachtungsraum im neuen Modellierungsansatz erweitert, da die benötigten Daten zur Durchführung eines werkspezifischen Prozess-LCA auf Produktebene nicht verfügbar sind. In der Stahl- und auch der Aluminiumindustrie lässt insbesondere der zwischenbetriebliche Handel mit notwendigen Zwischenprodukten und den damit einhergehenden CO₂e-Emissionen die Anwendung eines klassischen LCA-Ansatzes nicht zu (vgl. Problemstellung in Kapitel 5.1.1 und Schiessl et al. 2020). Der Betrachtungsraum der durchzuführenden Analyse wird daher auf die Meso- bzw. Unternehmensebene (Fet 1998) ausgedehnt, indem die berichteten CO2e-Emissionen eines Werkes auf Herstellerebene als zusätzliche Datenbasis verwendet werden.



LCA: Environmental Life Cycle Assessment

 $\mathsf{ECCO}_2\text{-}\mathsf{Modelle}\text{:}\mathsf{Evaluation}$ tools to compare $\mathsf{CO}_2\mathsf{e}$ emissions of the metal industry

Abbildung 5.2: Ebenen und Dimensionen der Lebenszyklusanalyse (in Anlehnung an Guinée et al. 2011; Zimmer et al. 2017; Schiessl et al. 2020)

Bei dem neuen Ansatz handelt es sich um einen simplified-LCA-Ansatz (S-LCA) (vgl. Kapitel 3.2.3.7), da der Fokus auf der Wirkungskategorie GWP und damit auf der Bilanzierung der CO₂e-Emissionen liegt, und übrige Wirkungskategorien bewusst nicht betrachtet werden.

Basierend auf dem neuen Ansatz wird für jedes zu bewertende Material ein spezifisches Modell (**ECCO**₂-Tool – **E**valuation Tool for **co**mparing **CO**₂-Emissions in a specific industry) implementiert (vgl. Abbildung 4.1). Im folgenden Kapitel werden die verwendeten Datenquellen der ECCO₂-Modelle der Teilmodule A1-A4 beschrieben.

5.1.4 Datenbasis der Teilmodule A1-A4

Für den neuen Forschungsansatz sind Daten zu den Produktionsvolumina der Werke, den Produktionskapazitäten der verschiedenen Produktionsanlagen der Werke und die Stromerzeugungskapazitäten werkseigener Kraftwerke notwendig. Aufgrund des begrenzten Zugangs zu produktionsspezifischen Primärdaten der Stahl- und Aluminiumhersteller (vgl. Kapitel 5.1.1) konzentrierte sich die Datenerhebung auf öffentlich zugängliche Datenquellen. Im Zentrum standen dabei Quellen, die regelmäßig durch Hersteller oder Verbände aktualisiert werden, damit der zu untersuchende Zeithorizont, bzw. ein im Modell gewähltes Basisjahr, kontinuierlich an die Aktualität der Herstellerdaten angepasst werden kann. Die werksspezifischen Produktionsvolumina der Roheisen-, Rohstahl- und Rohaluminiumerzeugung konnten in Unternehmensberichten⁵ recherchiert werden und bspw. für Roheisen und Rohstahl auch teilweise dem Statistischen Jahrbuch (Stahlinstitut VDEh 2014c) entnommen werden. Die in den jeweiligen Teilmodulen spezifisch verwendeten Unternehmensberichte können teilweise den entsprechenden separaten Veröffentlichungen der Teilmodule entnommen werden. Für das ECCO2-Steel1er Modell siehe dazu Schiessl et al. (2020)⁶ und für das ECCO2-Alu1er Modell siehe Schiessl et al. (2021)⁷. Die verwendeten werksspezifischen Kapazitäten der Produktionsanlagen zur Stahlerzeugung stammen aus der PLANTFACTS Datenbank (Stahlinstitut VDEh 2014b). Die Erzeugungskapazitäten werkseigener Kraftwerke basieren auf S&P Global

⁵ Mit Unternehmensberichten sind hier und im Folgenden alle Berichte eines Unternehmens oder eines spezifischen Werkes gemeint, die in regelmäßigen (z.B. Jahresbericht, Nachhaltigkeitsbericht oder Umwelterklärung) oder unregelmäßigen (z.B. Werksbroschüre) Abständen der Öffentlichkeit zur Verfügung gestellt werden.

⁶ Siehe Schiessl, Andreas; Müller, Richard; Volk, Rebekka; Zimmer, Konrad; Breun, Patrick; Schultmann, Frank (2020): Integrating site-specific environmental impact assessment in supplier selection. Exemplary application to steel procurement. In: J Bus Econ 27.

⁷ Siehe Schiessl, Andreas; Müller, Richard; Volk, Rebekka; Schultmann, Frank (2021): Site-specific environmental impact assessment as a basis for supplier selections – exemplary application to aluminum In: Journal of Cleaner Production.

Platts (2015) und Bundesnetzagentur Deutschland (2018) sowie auf eigenen Annahmen (bzw. Annahmen des Instituts für Industriebetriebslehre und industrielle Produktion am KIT (IIP-Kraftwerksdatenbank)). Die Informationen zu den Produktionskapazitäten der Aluminiumwerke stammen aus Unternehmensberichten und aus dem U.S. Geological Survey (2013, 2015c).

Allgemeine technische Parameter zur Modellierung der Produktionsprozesse wie Stoffumwandlungskoeffizienten, Emissionsfaktoren der Zwischenprodukte oder der durchschnittliche Output an Prozessgasen der Produktionsanlagen stammen für Stahl aus European Commission (2013) und aus Breun (2016) und für Aluminium aus European Commission (2014a, 2017a), European Aluminium (2013) und World Aluminium (2013). Einen hohen Stellenwert haben dabei vor allem die sogenannten BAT-(Best available techniques)-Merkblätter/Referenzdokumente (dt. beste verfügbare Techniken, BVT), die für Stahl in European Commission (2013) und für Aluminium in European Commission (2014a, 2017a) beschrieben sind. Der besondere Stellenwert wird durch die Industrieemissionsrichtlinie 2010/75/EU begründet, die zur Erreichung eines hohen Umweltschutzniveaus wichtige Regelungen zur Genehmigung, zum Betrieb, zur Überwachung und zur Stilllegung von Industrieanlagen in der EU beinhaltet. Nach dieser Richtlinie dürfen neue Produktionsanlagen nur in Betrieb genommen werden, wenn diese solche "beste verfügbare Techniken" (BVT) einsetzen. Die verwendeten Quellen zu den technischen Parametern bilden zusammen mit den oben beschriebenen werksspezifischen Produktionsvolumina und -kapazitäten die Datenbasis für die technologieorientierte bottom-up-Berechnung der werksspezifischen THG-Emissionen.

Datenklasse	Beschreibung	Quelle	
Werksspezifische	Kapazitäten	Stahlinstitut VDEh (2014b), S&P Global	
Daten		Platts (2015), Bundesnetzagentur	
		Deutschland (2018), U.S. Geological Sur-	
		richte	
	Produktionsvolumina	Stahlinstitut VDEh (2014c), Unterneh-	
		mensberichte	
	THG-Emissionen	EEA (2007-2016)	
Technische Para-	Produktionsprozess	BAT-Stahl - European Commission	
meter		(2013), BAT-Aluminium - European	
		Commission (2014a, 2017a), Breun	
		(2016), European Aluminium (2013),	
		World Aluminium (2013)	
Landesspezifische	Strommix	UBA (2012), Ecoinvent V2.2 (2007-	
Daten		2013), UBA (2019a), EEA (2018)	
Carbon Footprint	z.B. Förderung und	Ecoinvent V2.2 (2007-2013)	
der "Vorkette"	Transport der Input-		
	materialien, Bau der		
	Produktionsanlagen		

Tabelle 5.1: Datenbasis der ECCO2-Modelle der Teilmodule A1-A4

Im Rahmen der Emissionsberichterstattung verpflichtet die Verordnung (EG) Nr. 166/2006 des Europäischen Parlaments und des Rates (EU 2006a) seine Mitgliedsstaaten zur jährlichen Berichterstattung über die Menge der freigesetzten Luftschadstoffe. Dies verpflichtet auch die Metallerzeuger jedes EU-Landes zur Berichterstattung ihrer emittierten THG. Das beinhaltet die THG-Emissionen der Herstellung von Rohstahl bzw. Rohaluminium, der Walzwerke und auch der Kraftwerke (abhängig von der Leistung) eines Metallherstellers. Diese berichteten, öffentlich zugänglichen und werksspezifischen THG-Emissionen bilden damit die Grundlage zur Integration werksspezifischer THG-Emissionen (top-down) in die ECCO₂-Modelle. Die verwendeten Daten der THG-Emissionen der einzelnen Stahl- und Aluminiumwerke wurden dem European Pollution and Transfer Register (E-PRTR) der European Environment Agency in EEA (2007-2016) entnommen. Landesspezifische Daten zum Strommix beruhen auf Studien des deutschen Umweltbundesamtes (UBA 2012, 2019a), der European Environment Agency (EEA 2018) sowie auf Ecoinvent V2.2 (2007-2013). Die Bewertung der THG-Emissionen vorgelagerter Prozesse (**"Vorkette"**) erfolgt anhand der LCI und LCIA Daten aus Ecoinvent V2.2 (2007-2013).

5.1.5 Teilmodul A1: Primärstahlerzeugung (ECCO₂-Steel1er)

Als erstes Teilmodul (A1) von Systemmodul A wird das darin inbegriffene Modell ECCO₂-Steel1er vorgestellt, mit dem die THG-Emissionen der Primärstahlerzeugung in integrierten Hüttenwerken werksspezifisch abgeschätzt werden können. Die Erläuterung des Modells beschränkt sich, wie oben erwähnt, aus Gründen der Übersichtlichkeit auf die für die vorliegende Arbeit wesentlichen Aspekte, da das ECCO₂-Steel1er Modell im Detail bereits separat in Schiessl et al. (2020)⁸ veröffentlicht wurde. Hier wird lediglich das Ziel und der Untersuchungsrahmen des Modells, eine Erläuterung der Berechnungslogik und die Anwendung des Modells anhand einer Fallstudie zusammengefasst, sodass die Ergebnisse der Fallstudie im weiteren Verlauf der Arbeit verwendet werden können. Das Kapitel 5.1.5 schließt mit einer Diskussion der Fallstudienergebnisse und der Validierung des Modells. Bewusst ausgeklammert wird zum einen die detaillierte Beschreibung des mathematischen Modells (vgl. Schiessl et al. 2020). Zum anderen wird bezüglich der Fallstudie auf die umfangreiche Darstellung der recherchierten werksspezifischen Daten der Fallstudienwerke verzichtet, die in aller Ausführlichkeit ebenso Schiessl et al. (2020) entnommen werden können.

⁸ Siehe Schiessl, Andreas; Müller, Richard; Volk, Rebekka; Zimmer, Konrad; Breun, Patrick; Schultmann, Frank (2020): Integrating site-specific environmental impact assessment in supplier selection. Exemplary application to steel procurement. In: J Bus Econ 27.

5.1.5.1 Ziel und Untersuchungsrahmen

Ziel des ECCO₂-Steel1er Modells ist das werksspezifische Abschätzen von THG-Emissionen der Primärstahlherstellung in integrierten Hüttenwerken, damit verschiedene Werke hinsichtlich ihres Product Carbon Footprints miteinander verglichen werden können. Als Bezugsgröße bzw. funktionelle Einheit (vgl. Ökobilanzierung in Kapitel 3.2.3.3) wird dazu eine Tonne Rohstahl definiert, da Rohstahl das Kernprodukt aller Stahlwerke ist.⁹ Abbildung 5.3 zeigt alle betrachteten Produktionsanlagen und -prozessschritte und die damit verbundenen Stoffflüsse der Zwischenprodukte und Prozessgase, die sich auf die werksspezifischen CO₂e-Emissionen auswirken. Dies umfasst je nach Werk auch die Energieversorgung durch ein eigenes Kraftwerk.¹⁰ Zudem veranschaulicht Abbildung 5.3 die gesetzten Systemgrenzen der Modellierung. Es wird zwischen dem System des "integrierten Hüttenwerks" (gate(in)-to-gate(out)) und dem System "Vorkette" (cradle-to-gate(in)) unterschieden. Im gate-to-gate System liegt der Fokus der Modellierung auf CO₂-Emissionen, da diese 98,3 % der THG-Emissionen eines integrierten Hüttenwerks (gate-to-gate) ausmachen (UBA 2018b). Im System Vorkette (cradle-to-gate(in)) werden alle Treibhausgase berücksichtigt und in CO₂e ausgewiesen.

⁹ Nicht alle Hüttenwerke haben ein Walzwerk vor Ort, sodass sich Walzstahl bspw. weniger als funktionelle Einheit eignet.

¹⁰ Zur Erläuterung des Herstellungsprozesses von Primärstahl siehe Kapitel 2.4.2.1.



Abbildung 5.3: Prozessschritte eines integrierten Hüttenwerks einschließlich der im Modell betrachteten Systemgrenzen und Material- und Energieflüsse (vgl. Schiessl et al. 2020)

5.1.5.2 Berechnungslogik

Gemäß dem in Kapitel 5.1.3 formulierten Vorgehen zur Abschätzung werksspezifischer THG-Emissionen von Metallherstellern folgt die Berechnungslogik entsprechend dem neu entwickelten generischen Berechnungsansatz (vgl. Kapitel 5.1.3). Infolge seines sequentiellen Aufbaus wird die generische Logik Schritt für Schritt an die spezifischen Produktionsprozesscharakteristika der Stahlerzeugung in integrierten Hüttenwerken angepasst. Dies umfasst beispielsweise die Anzahl der zu betrachtenden Produktionsanlagen bzw. -prozesse, die potenzielle Nutzung entstehender Prozessgase als Energieträger für vor- oder nachgelagerte Prozesse, oder ein möglicher Handel von Zwischenprodukten. Die angepasste Berechnungslogik ist in Abbildung 5.4 dargestellt und dient der Erläuterung der durchzuführenden Berechnungsschritte (S1-S9). Für eine detailliertere Erläuterung der einzelnen Berechnungsschritte (S1-S9) sowie für die ausführliche Beschreibung des mathematischen Modells wird auf die separate Veröffentlichung in Schiessl et al. (2020)¹¹ verwiesen.

¹¹ Siehe Schiessl, Andreas; Müller, Richard; Volk, Rebekka; Zimmer, Konrad; Breun, Patrick; Schultmann, Frank (2020): Integrating site-specific environmental impact assessment in supplier selection. Exemplary application to steel procurement. In: J Bus Econ 27.



Abbildung 5.4: Berechnungslogik des ECCO₂-Steel1er Modells (in Anlehnung an Schiessl et al. 2020)

(S1): Entsprechend der generischen Logik aus Kapitel 5.1.3 werden in einem 1. Schritt die Produktionsvolumina aller Produktionsanlagen eines Werks ermittelt, um die Grundlage für weitere Berechnungen zu Stoff- und Energieflüssen und der Bewertung des Zwischenhandels von Zwischenprodukten zu schaffen. Sollten für die verschiedenen Produktionsanlagen bzw. Produktionsprozessschritte keine werksspezifischen Daten öffentlich vorliegen, werden die Produktionsmengen auf Basis von Stoffumwandlungskoeffizienten (vgl. European Commission 2013) berechnet. Als Bezugsgröße für die Berechnung der Produktionsmengen vor- und nachgelagerter Anlagen wird dabei das im Hochofen erzeugte Roheisen verwendet, da dazu die detaillierteste, öffentlich verfügbare Berichterstattung von Unternehmen erfolgt.

(S2-S4): In Schritt 2 wird eine Input-Output-Analyse der Prozessgase für jede im Werk vorhandene Produktionsanlage durchgeführt. Dabei wird explizit darauf geachtet, welche spezifischen Technologien in einem Werk vorhanden sind (z.B. Konvertergasrückgewinnung) und gegebenenfalls die Mengen an nutzbaren Gasen erhöhen. Anschließend wird unter Berücksichtigung des spezifischen Energiegehalts der Gase und mithilfe der berechneten Produktionsvolumina und der Produktionskapazitäten eine werksspezifische Energiebilanz erstellt. Ziel ist es, auf Basis der Energiebilanz bewerten zu können, in welchem Ausmaß Prozessgase in einem Werk als Energieträger im Produktionsprozess weiterverwendet werden und ob überschüssige Prozessgase zur Stromerzeugung in werkseigenen Kraftwerken eingesetzt werden (können). Existiert kein werkseigenes Kraftwerk, wird angenommen, dass überschüssige Prozessgase abgefackelt werden, was zu zusätzlichen CO₂-Emissionen führt. Sind Prozessgase überschüssig und ist ein Kraftwerk vorhanden, wird in Schritt 3 (S3) unter Berücksichtigung von Einflussparametern wie der Menge zusätzlich eingesetzter Brennstoffe, der Brennstoffart (z.B. Erdgas), der Auslastung oder dem Wirkungsgrad des Kraftwerks berechnet, wie viel elektrische Energie im Kraftwerk erzeugt wird. In Schritt 4 (S4) werden anschließend die damit verbundenen THG-Emissionen des Kraftwerks auf Basis einer Kohlenstoffbilanz berechnet, in der die unterschiedlichen Prozessgase mit ihren jeweiligen Kohlenstoffgehalten sowie die sonstigen eingesetzten Brennstoffe (in der Regel Erdgas) berücksichtigt werden. Aufgrund der unterschiedlichen Kohlenstoffgehalte der Prozessgase variieren die THG-Emissionen je nach Zusammensetzung des Gasgemisches aus Kokereigas, Gichtgas und Konvertergas. Mittels der berechneten Menge der erzeugten elektrischen Energie und der THG-Emissionen des Kraftwerks kann ein werksspezifischer Strommix (Emissionsfaktor) bestimmt werden, der unter anderem für das Gutschriftverfahren in Schritt 8 wichtig ist.

(S5): Im 5. Schritt werden die berichteten THG-Emissionen einen Werks <u>top-</u> <u>down</u> auf die einzelnen Produktionsanlagen des Werks allokiert. Die Allokation erfolgt, wie in Kapitel 5.1.3 beschrieben, anhand des Anteils der <u>bot-</u> <u>tom-up</u> berechneten THG-Emissionen der einzelnen Produktionsanlagen an den gesamten bottom-up berechneten THG-Emissionen eines Werkes. Die bottom-up Berechnung der THG-Emissionen erfolgt anhand der berechneten Produktionsmengen und der anlagenspezifischen Emissionsfaktoren (vgl. European Commission 2013). Dann liegen die THG-Emissionen pro Prozessschritt vor und können auf die Menge des erzeugten Rohstahls normiert werden, um Vergleichbarkeit zwischen verschiedenen Werken zu schaffen.

(S6): Im 6. Schritt werden die betrachteten Werke unabhängig von ihrer eigentlichen Anlagenkonfiguration gemäß Kapitel 5.1.3 als vollintegrierte Werke, in diesem Fall als vollintegrierte Hüttenwerke, simuliert. Als Bezugsgröße wird hier Rohstahl verwendet, sodass die tatsächlich produzierte Rohstahlmenge der theoretisch produzierten Rohstahlmenge entspricht. Die Produkte vor- und nachgelagerter Produktionsprozesse aus den Anlagen Hochofen, Sinteranlage, Kokerei und Walzwerk werden entsprechend über Produktionskoeffizienten berechnet. Durch nun verfügbare tatsächliche Produktionsmengen (S1) und theoretische Produktionsmengen (S6) können Über- und Unterproduktionen einzelner Anlangen ermittelt bzw. gehandelte Zwischenprodukte identifiziert werden. Betreibt ein Werk Zwischenhandel, so ist die Allokation der berichteten THG-Emissionen nach (S5) noch nicht abgeschlossen, da die THG-Emissionen eines jeweiligen Prozessschritts noch um die verkauften bzw. eingekauften Produkte bereinigt werden müssen (S7 und S8). (S7): Im 7. Schritt wird zunächst für jedes Werk identifiziert, in welchem Produktionsprozessschritt Zwischenprodukte ver- oder zugekauft werden. Dies umfasst sowohl Zwischenprodukte wie Koks und Sinter als auch elektrische Energie.

(S8): In Schritt 8 erfolgt die Quantifizierung der THG-Emissionen, die zur Erzeugung der verkauften oder gekauften Zwischenprodukte verursacht wurden. Für verkaufte Zwischenprodukte werden die werkseigenen Emissionsfaktoren als Berechnungsgrundlage verwendet; für zugekaufte Zwischenprodukte durchschnittliche Emissionsfaktoren der Industrie. Dies umfasst auch den Verkauf von erzeugter elektrischer Energie durch die Nutzung von Prozessgasen bzw. den Einkauf von elektrischer Energie. Verkaufte elektrische Energie wird mit dem werksinternen Emissionsfaktor bzw. Strommix bewertet; eingekaufte Energie wird mit dem landesspezifischen Strommix bewertet. Anschließend erfolgt die Bereinigung der THG-Emissionen eines Prozessschritts um die zuvor berechneten THG-Emissionen aus dem Zwischenhandel

(S9): Nach den acht zuvor durchgeführten Schritten liegen die THG-Emissionen für jeden Produktionsprozess vor. Im 9. Schritt werden zusätzlich die THG-Emissionen der Vorkette integriert, damit die THG-Emissionen eines Werks cradle-to-gate ausgewiesen werden können. Durch eine Normierung der gesamten THG-Emissionen eines Werks auf die erzeugte Menge an Rohstahl können die Product Carbon Footprints (cradle-to-gate) verschiedener Werke miteinander verglichen werden.

5.1.5.3 Fallstudie integrierter Primärstahlwerke der EU15

Als Fallstudie zur Anwendung des entwickelten ECCO₂-Steel1er Modells wurden 22 integrierte Hüttenwerke (in 15 Ländern der EU) ausgewählt (vgl. Abbildung 5.5), die zu den größten Stahlzulieferern deutscher Industriekonzerne, vor allem deutscher Automobilzulieferer und -hersteller, zählen. Zur Ermittlung dieser Stahlwerke wurden bilaterale Expertengespräche mit fünf deutschen Großkonzernen der Automobil- und Gebrauchsgüterindustrie geführt, die in Summe diese 22 Stahlwerke als ihre wesentlichen Stahlzulieferer benannten.



Abbildung 5.5: Geografische Standorte der 22 betrachteten integrierten Hüttenwerke der Eisen- und Stahlerzeugung in Europa (Schiessl et al. 2020)

Die Erläuterungen zur Datenbasis der Modelle in Kapitel 5.1.4 und die Erklärung der Berechnungslogik in Kapitel 5.1.5.2 zeigen, dass ein wesentlicher Teil des Ansatzes in einer aufwändigen Datenrecherche besteht. Darin müssen die notwendigen Informationen beschafft werden, die die werkspezifische Berechnung ermöglichen. Über die in Kapitel 5.1.4 erläuterten Daten bzw. Datenquellen hinaus werden für die Durchführung der Fallstudie zahlreiche Unternehmensberichte der betrachteten Hüttenwerke benötigt. Die spezifisch verwendeten Berichte können Schiessl et al. (2020) entnommen werden, in der die verwendeten Daten aufbereitet und vollumfänglich dargestellt werden. Als Basisjahr für die im Modell verwendeten Daten wurde das Jahr 2012 gewählt, da dieses zum Zeitpunkt der Datenrecherche in der öffentlich verfügbaren Literatur das Jahr mit der umfassendsten Datenlage war.

5.1.5.4 Fallstudienergebnisse und Validierung

Die Ergebnisse der mit dem ECCO₂-Steel1er Modell durchgeführten Abschätzung zeigen große Unterschiede der CO₂e-Emissionen zwischen den untersuchten Stahlwerken (vgl. Abbildung 5.6). Der geschätzte PCF (cradleto-gate(out)) für die betrachteten vollintegrierten Stahlwerke in den EU15 liegt zwischen "Best-in-Class" (BiC) 1.879 kgCO₂e/t Rohstahl (Werk 7) bis "Worst-in-Class" (WiC) 2.990 kgCO₂e/t Rohstahl (Werk 5), was einer relativen Abweichung um maximal 59 % und einer absoluten Abweichung von 1.111 kgCO₂e/t Rohstahl entspricht. Der durchschnittliche PCF der betrachteten Werke liegt bei 2.352 kgCO₂e/t Rohstahl.



Abbildung 5.6: Ergebnisse des PCF (cradle-to-gate(out)) der 22 Primärstahlwerke der EU15 (vgl. Schiessl et al. 2020)

Das ECCO₂-Steel1er Modell wurde über einen Zeitraum von zwei Jahren entwickelt und parallel zur Entwicklung in regelmäßigen Abständen Industriepartnern und Experten vorgestellt, um die Genauigkeit der Ergebnisse auf Basis ihrer Anmerkungen weiter zu erhöhen und Verbesserungsvorschläge zu implementieren.

Nach der Fertigstellung wurde das Modell anhand von Primärdaten von drei der 22 betrachteten Werke validiert. Außerdem wurde eine detaillierte Validierung in Kooperation mit einem Hersteller aus dem deutschsprachigen Raum durchgeführt, mit dem jede Annahme und jeder einzelne Berechnungsschritt analysiert und plausibilisiert wurde. Dabei überzeugte das Vorgehen, alle Stahlwerke zunächst als vollintegrierte Stahlwerke zu simulieren. Dadurch wurde auch die Modellierung des Handels von Zwischenprodukten bestätigt und als plausibel bewertet. Die Gesamtabweichung zwischen dem im ECCO₂-Steel1er Modell berechneten Ergebnis und dem unternehmensinternen Wert des Industriepartners konnte aus Geheimhaltungsgründen nur prozentual angegeben werden und wurde auf max. 5 % beziffert. Zudem stimmt der berechnete Mittelwert über alle 22 Werke (2.352 kgCO₂e/t Rohstahl) nahezu mit den Ecoinvent-Mittelwerten für Europa (2.408 kgCO₂e/t Rohstahl; Stahlwerk und Walzwerk auf eine Tonne Rohstahl normiert) (Ecoinvent 2007-2013) überein und weist nur eine relative Abweichung von 2,3 % auf.

Die gravierenden Abweichungen des PCF zwischen den Werken lassen sich auf mehrere Gründe zurückführen. Ein wesentlicher Grund ist, dass nicht alle Werke voll integriert sind, sodass einige Prozessschritte nicht direkt im Werk durchgeführt werden, und die entsprechenden Zwischenprodukte daher extern zugekauft werden müssen. Dies kann sich beispielsweise negativ auf die Verwendung von Prozessgasströmen als Energieträger auswirken, da die Produktionsanlagen in diesem Fall nicht so effizient wie in vollintegrierten Werken miteinander verknüpft sind. Auch der Standort eines Werks beeinflusst das Ergebnis, da die in der Bilanzierung zu berücksichtigenden THG-Emissionen durch die Bereitstellung von zugekauftem Strom auf Basis des landesspezifischen Strommix berechnet werden. Darüber hinaus spielt unternehmensinternes Prozesswissen zur Steuerung der Anlagen und zur Umsetzung von Effizienzmaßnahmen eine wichtige Rolle.

5.1.6 Teilmodul A2: Sekundärstahlerzeugung (ECCO₂-Steel2er)

In diesem Kapitel wird Teilmodul A2 beschrieben, das mit dem ECCO₂-Steel2er Modell das Abschätzen werksspezifischer THG-Emissionen der Sekundärstahlerzeugung ermöglicht.

5.1.6.1 Ziel und Untersuchungsrahmen

Ziel des ECCO₂-Steel2er Modells ist das werksspezifische Abschätzen von THG-Emissionen der Sekundärstahlherstellung in Elektrolichtbogenöfen, die bspw. 30 % der jährlichen Rohstahlproduktion in Deutschland ausmachen.

Mit dem Modell können unterschiedliche Sekundärstahlwerke hinsichtlich ihres Product Carbon Footprints miteinander verglichen werden. Als Bezugsgröße bzw. funktionelle Einheit (vgl. Ökobilanzierung in Kapitel 3.2.3.3) wird wie im ECCO₂-Steel1er Modell eine Tonne Rohstahl definiert, da Rohstahl auch das Kernprodukt aller Sekundärstahlwerke ist. Daneben ermöglicht eine identische funktionelle Einheit eine Vergleichbarkeit zwischen den Ergebnissen. Abbildung 5.7 zeigt alle betrachteten Produktionsanlagen und prozessschritte und die damit verbundenen Stoffflüsse der Zwischenprodukte, die sich auf die werksspezifischen CO₂e-Emissionen auswirken.¹² Abbildung 5.7 veranschaulicht ebenfalls die gesetzten Systemgrenzen der Modellierung. Es wird zwischen dem System des "integrierten Sekundärstahlwerks" (gate(in)-to-gate(out)) und dem System "Vorkette" (cradle-to-gate(in)) unterschieden. Im gate-to-gate System liegt der Fokus der Modellierung auf den prozessbedingten CO₂-Emissionen, die im Stahlund Walzwerk am Standort entstehen (Scope 1) und auf den indirekten, energiebedingten CO₂-Emissionen, die durch die Bereitstellung der verwendeten elektrischen Energie verursacht wurden (Scope 2). Im System Vorkette (cradle-to-gate(in)) werden alle Treibhausgase berücksichtigt und in CO₂e ausgewiesen, die durch vorgelagerte Aktivitäten in der Lieferkette entstehen (Scope 3¹³).

¹² Zur Erläuterung des Herstellungsprozesses von Sekundärstahl siehe Kapitel 2.4.2.2.

¹³ Die verwendete Einteilung in die Kategorien (Scope 1-3), stützt sich auf den GHG Protocol Corporate Standard, der eine Anleitung für Organisationen zur Erstellung von Emissionsinventaren bietet (Scope 1: direkte Emissionen aus unternehmenseigenen Quellen, Scope 2: indirekte Emissionen aus dem Energieeinkauf und Scope 3: indirekte Emissionen aus Aktivitäten der Lieferkette) (GHG Protocol 2004; 2013).



Abbildung 5.7: Prozessschritte eines integrierten Sekundärstahlwerks einschließlich der im Modell betrachteten Systemgrenzen und Material- und Energieflüsse

5.1.6.2 Berechnungslogik und Implementierung

In diesem Abschnitt erfolgt die Anwendung der generischen sequentiellen Berechnungslogik gemäß Kapitel 5.1.3. Wegen der bereits erfolgten detaillierten Erläuterung der generischen Logik (vgl. Kapitel 5.1.3) sowie der bereits dargestellten Anpassung der generischen Logik auf Primärstahl (vgl. Kapitel 5.1.5.2), werden sich wiederholende Schritte nur kurz erläutert. Der Fokus liegt auf den Anpassungen der generischen Logik auf die Sekundärstahlroute und den daraus resultierenden Veränderungen des Berechnungsschemas.



Abbildung 5.8: Berechnungslogik des ECCO2-Steel2er Modells

Schritt 1 (S1): Im ersten Schritt werden die jährlichen Produktionsvolumina $(PV_{ps_{\chi},l})$ der Roh- und Walzstahlherstellung $(ps_1 \text{ bzw. } ps_2)$ der zu untersuchenden Werke (l) recherchiert. Da zur Rohstahlerzeugung über die Sekundärroute nur ein Elektrolichtbogenofen benötigt wird, sind im Vergleich zu Teilmodul A1 keine weiteren Berechnungen anhand von Stoffumwandlungskoeffizienten für Produktionsmengen vorgelagerter Anlagen nötig.

(S2): Im zweiten Schritt werden bottom-up auf Basis der recherchierten Produktionsmengen ($PV_{ps_{x},l}$) und prozess- bzw. anlagenspezifischer Emissionsfaktoren ($efact_{ps_x}$) gemäß der besten verfügbaren Techniken (vgl. European Commission 2013), die theoretischen werksspezifischen CO₂-Emissionen für jeden Produktionsprozessschritt berechnet ($emiss_{ps_x,l}^{theor}$) (vgl. (5.1)).

$$emiss_{ps_x,l}^{\text{theor}} = efact_{ps_x} \cdot PV_{ps_x,l}$$
(5.1)

(S3): Anschließend werden die berichteten CO₂-Emissionen eines Werkes $(emiss_l^{reported})$ top-down auf die einzelnen Prozessschritte allokiert, um die berichteten Emissionen einzelnen Prozessschritten zuzuordnen $(emiss_{ps_x,l}^{pv})$ (vgl. (5.2)). Die zuvor bottom-up berechneten theoretischen Emissionen (S2) dienen dabei als Gewichtungs- bzw. Allokationsfaktoren (vgl. Kapitel 5.1.3, Schritt 4). \tilde{x} dient als Hilfsvariable und entspricht x.

$$emiss_{ps_{x},l}^{pv} = emiss_{l}^{reported} \cdot \frac{emiss_{ps_{x},l}^{theor}}{\sum_{\tilde{x}=1}^{2} emiss_{ps_{\tilde{x}},l}^{sheor}}$$
(5.2)

Dieser Schritt der top-down Allokation (S3) für das ECCO₂-Steel2er Modell kann je nach Wahl des Bezugsjahres der Daten entfallen, da bei der Deutschen Emissionshandelsstelle (z.B. in DEHSt (2019)) ab dem Jahr 2013 die Anlagen Stahlwerk und Walzwerk separat betrachtet werden. Seit dem Jahr 2013 liegen die CO₂-Emissionen also bereits prozessspezifisch vor. Auf Basis der prozessspezifischen Emissionen können zudem werksspezifische Emissionsfaktoren pro Produktionsprozess ($efact_{ps_{x,l}}^{local}$) berechnet werden (vgl. (5.3)), die im folgenden vierten Schritt benötigt werden.

$$efact_{ps_{\chi},l}^{\text{local}} = \frac{emiss_{ps_{\chi},l}^{\text{pv}}}{PV_{ps_{\chi},l}}$$
(5.3)

(S4): Im vierten Schritt werden alle Werke als vollintegrierte Werke simuliert (vgl. Kapitel 5.1.3), um die Mengen des verkauften oder zugekauften Rohstahls zu ermitteln. Dazu wird werksspezifisch mithilfe des Produktionskoeffizienten (Rohstahl zu Walzstahl: mcr_{ps_1,ps_2}) gemäß European Commission (2013) ermittelt, wie viel Walzstahl theoretisch ($PV_{ps_2,l}^{\text{theor}}$) auf Basis des am Standort produzierten Rohstahls ($PV_{ps_1,l}$) hergestellt werden könnte (vgl. (5.4)).

$$PV_{ps_{2},l}^{\text{theor}} = mcr_{ps_{1},ps_{2}} \cdot PV_{ps_{1},l}$$
(5.4)

Wurde mehr gewalzt ($APV_{ps_2,l} > 0$), als Rohstahl erzeugt wurde, bedeutet dies, dass Rohstahl extern zugekauft wurde. Wurde andererseits weniger Stahl gewalzt ($APV_{ps_2,l} < 0$) als Rohstahl erzeugt, wird ein Verkauf von Rohstahl angenommen (vgl. (5.5)).

$$APV_{ps_{2},l} = PV_{ps_{2},l} - PV_{ps_{2},l}^{\text{theor}}$$

$$(5.5)$$

Da Stahlwerke und Walzwerke betrachtet werden, die CO₂-Emissionen aber auf die Tonne Rohstahl normiert werden, müssen die berichteten Emissionen eines Werkes noch um die CO₂-Emissionen aus der Über- oder Unterproduktion des Walzwerks (*emiss*^{apv}_{ps_x,l}) bereinigt werden, um der erzeugten Rohstahlmenge zu entsprechen. Die verursachten CO₂-Emissionen durch überproduzierten Walzstahl werden auf Basis des werksspezifischen Emissionsfaktors ($efact_{ps_x,l}^{local}$) per Gutschriftverfahren abgezogen. Wurde weniger gewalzt als Rohstahl produziert, werden die CO₂-Emissionen für die unterproduzierte Menge an Walzstahl anhand des durchschnittlichen Emissionsfaktors der Industrie für Walzwerke ($efact_{ps_x}$) gemäß European Commission (2013) berechnet und den werksspezifischen CO₂-Emissionen hinzugerechnet. Die Formel wird in Bezug auf die generische Berechnungslogik in Abhängigkeit von x formuliert, auch wenn hier im Fall der Sekundärstahlherstellung nur eine Bereinigung für Prozessschritt ps₂ erfolgt (vgl. (5.6)).

$$emiss_{ps_{x},l}^{apv} = \begin{cases} APV_{ps_{x},l} \cdot efact_{ps_{x},l}^{local} & , APV_{ps_{x},l} > 0 \\ APV_{ps_{x},l} \cdot efact_{ps_{x}} & , APV_{ps_{x},l} < 0 \\ 0 & , APV_{ps_{x},l} = 0 \end{cases}$$
(5.6)

Auf diese Weise werden die bereinigten, berichteten Emissionen $(emiss_{ps_{\chi},l}^{\mathrm{adjusted}})$ erzeugt (vgl. (5.7)). Im Anschluss werden diese durch die produzierte Rohstahlmenge des Werkes $(PV_{ps_1,l})$ dividiert, um der funktionellen Einheit zu entsprechen (Normierung).

$$emiss_{ps_{x},l}^{\text{adjusted}} = emiss_{ps_{x},l}^{\text{pv}} + emiss_{ps_{x},l}^{\text{apv}}$$
(5.7)

(S5): Im Vergleich zu Teilmodul A1 liegt in diesem Teilmodul A2 ein zusätzlicher Fokus auf den indirekten THG-Emissionen (CO₂e), die durch die Bereitstellung der verwendeten elektrischen Energie im Stahlwerk und im Walzwerk verursacht werden, da diese einen erheblichen Anteil an den gesamten THG-Emissionen der Sekundärstahlerzeugung haben.

Dafür werden zuerst die werksspezifisch benötigten Mengen an elektrischer Energie sowohl für das Stahl- als auch für das Walzwerk berechnet ($elect_l^{EAF}$

bzw. $elect_l^{\text{Rolling}}$) (vgl. (5.8)). Aus den Referenzdokumenten der besten verfügbaren Techniken nach European Commission (2013) ist bekannt, dass zwischen 404 kWh (BAT_{min}^{EAF}) und 748 kWh (BAT_{max}^{EAF}) zur Erzeugung einer Tonne Rohstahl benötigt werden (entspricht 1.454 bis 2.693 MJ/t Rohstahl). Um zu berechnen, wo in diesem Intervall [404; 748] ein spezifisches Stahlwerk einzuordnen ist, wird angenommen, dass eine hohe Nennscheinleistung (specific apparent power) eines Ofens [in kVA] mit einem hohen Stromverbrauch [kWh] korreliert. Die Nennscheinleistung umfasst die gesamte Leistung, die vom Ofen bereitgestellt werden muss, und kann ofenspezifisch für jeden Betreiber der Datenbank Plantfacts (Stahlinstitut VDEh 2014b) entnommen werden. $elect_l^{\text{EAF}}$ in [kWh/t] beschreibt den spezifischen Stromverbrauch des Elektrolichtbogenofens in Werk *l* zur Erzeugung von Rohstahl. AP_{max} ist die maximale und AP_{min} die minimale Nennscheinleistung der verfügbaren Elektrolichtbogenöfen in der Plantfacts Datenbank.

$$elect_{l}^{\text{EAF}} = BAT_{min}^{\text{EAF}} + \frac{AP_{l}^{\text{EAF}} - AP_{min}^{\text{EAF}}}{AP_{max}^{\text{EAF}} - AP_{min}^{\text{EAF}}} \cdot (BAT_{max}^{\text{EAF}} - BAT_{min}^{\text{EAF}})$$
(5.8)

Um den Stromverbrauch für das Walzen im Werk l in [kWh/t] zu berechnen $(elect_l^{\text{Rolling}})$ (vgl. (5.9)), werden ebenfalls BAT-Werte verwendet, wobei hinsichtlich des Energieverbrauchs zwischen Warm- und Kaltwalzen unterschieden werden muss (European Commission 2013). Teilweise werden verschiedene Walzwerke an einem Standort betrieben, da unterschiedliche Produkte erzeugt werden (z.B. Block- und Brammenwalzwerk oder Stabstahlstraße). $CAP_{h,l}$ steht für die Kapazitäten der Warmwalzwerke $h \in H$ in Werk l und $\emptyset BAT^{\text{Hot}_R}$ für den durchschnittlichen BAT-Wert des Stromverbrauchs für Warmwalzen gemäß European Commission (2013). $CAP_{c,l}$ bezeichnet analog die Kapazitäten der Kaltwalzwerke $c \in C$ in Werk l. Für den Stromverbrauch des Kaltwalzens ($\emptyset BAT_c^{\text{Cold}_R}$) können im Gegensatz zum

Warmwalzen werksspezifische Werte ermittelt werden, da in den BAT-Dokumenten für Kaltwalzen je nach Anlagentechnik unterschiedliche BAT-Werte verfügbar sind.

$$elect_{l}^{\text{Rolling}} = \frac{\sum_{h=1}^{H} CAP_{h,l} \cdot \emptyset BAT^{\text{Hot}_{R}} + \sum_{c=1}^{C} CAP_{c,l} \cdot \emptyset BAT_{c}^{\text{Cold}_{R}}}{\sum_{h=1}^{H} CAP_{h,l} + \sum_{c=1}^{C} CAP_{c,l}}$$
(5.9)

Anschließend werden $elect_l^{\text{EAF}}$ und $elect_l^{\text{Rolling}}$ mit dem Emissionsfaktor der Strombereitstellung ($efact_{i}^{electmix}$) multipliziert, um die CO₂e-Emisssionen pro Tonne Roh- und Walzstahl werksspezifisch zu ermitteln (emiss_l^{elect^{EAF}}bzw. emiss_l^{elect^{Rolling}}) (vgl. (5.10) bzw. (5.11)). Der Emissionsfaktor der Strombereitstellung wird landesspezifisch angenommen, sofern keine werksspezifischen Daten verfügbar sind.

$$emiss_l^{\text{elect}^{\text{EAF}}} = elect_l^{\text{EAF}} \cdot efact_l^{\text{electmix}}$$
(5.10)

$$emiss_l^{\text{elect}^{\text{Rolling}}} = elect_l^{\text{Rolling}} \cdot efact_l^{\text{electmix}}$$
(5.11)

Anknüpfend an Schritt 4 muss das Walzwerk noch um die indirekten THG-Emissionen bereinigt werden, indem die indirekten Emissionen des Walzens des zugekauften oder verkauften Rohstahls subtrahiert bzw. addiert werden (vgl. (5.12)). Bei einer Unterproduktion des Walzwerks im Werk l wird angenommen, dass der von Werk l verkaufte Rohstahl extern in einem durchschnittlichen Walzwerk gewalzt wird. Zur Bereinigung des Walzwerks des Werks l müssen die im externen Walzwerk verursachten indirekten THG-Emissionen entsprechend Werk l angelastet werden. Als durchschnittliches Walzwerk wird der durchschnittliche Emissionsfaktor aller betrachteten Walzwerke verwendet $\left(\frac{\sum_{l=1}^{m} emiss_{l}^{elect^{Rolling}}}{m}\right)$. \tilde{l} dient dabei als Hilfsvariable

und entspricht *l*. Bei einer Überproduktion des Walzwerks werden die zusätzlich verursachten indirekten THG-Emissionen von Werk *l* entsprechend abgezogen und für andere Werke übernommen. Ob THG-Emissionen addiert oder subtrahiert werden, wird also durch die Bilanz des produzierten Roh- und Walzstahls des Werkes abgebildet ($PV_{ps_{1},l} - PV_{ps_{2},l}$).

 $emiss_l^{elect^{Rolling_adjusted}}$

$$= emiss_{l}^{\text{elect}_{\text{Rolling}}} \cdot PV_{ps_{2},l} + (PV_{ps_{1},l})$$

$$- PV_{ps_{2},l} \cdot \frac{\sum_{l=1}^{m} emiss_{l}^{\text{elect}_{\text{Rolling}}}}{m}$$
(5.12)

Abschließend können die gesamten bereinigten werksspezifischen indirekten THG-Emissionen ($emiss_l^{elect^{adjusted}}$) wie folgt berechnet werden.

$$emiss_l^{\text{elect}^{\text{adjusted}}} = emiss_l^{\text{elect}^{\text{EAF}}} + emiss_l^{\text{elect}^{\text{Rolling},\text{adjusted}}}$$
(5.13)

(S6): Im sechsten Schritt werden die gate-to-gate Emissionen (inkl. indirekter Emissionen) um die THG-Emissionen aus der Vorkette ($emiss_l^{upstream}$) ergänzt. Danach können also die gesamten THG-Emissionen (cradle-to-gate) werksspezifisch ($emiss_l^{total}$) pro Tonne Rohstahl angegeben werden mit:

$$emiss_{l}^{\text{total}} = \sum_{x=1}^{2} emiss_{ps_{x},l}^{\text{adjusted}} + emiss_{l}^{\text{elect}^{\text{adjusted}}} + emiss_{l}^{\text{slock}}$$

$$+ emiss_{l}^{\text{upstream}}$$
(5.14)

5.1.6.3 Fallstudie Sekundärstahlwerke in Deutschland

Als Fallstudie wurden 15 Sekundärstahlwerke in Deutschland ausgewählt, (vgl. Abbildung 5.9), die zu den größten Stahlzulieferern deutscher Industriekonzerne, vor allem deutscher Automobilzulieferer und -hersteller, zählen. Die Auswahl dieser 15 Stahlwerke erfolgte durch bilaterale Expertengespräche mit fünf deutschen Großkonzernen der Automobil- und Gebrauchsgüterindustrie, in denen jene 15 Stahlwerke als wesentliche Sekundärstahllieferanten in Deutschland benannt wurden.



Abbildung 5.9: Geografische Standorte der 15 betrachteten Sekundärstahlwerke in Deutschland

Als Basisjahr für die im Modell verwendeten Daten wurde das Jahr 2012 gewählt, da dieses zum Zeitpunkt der Datenrecherche das Jahr mit der umfassendsten, öffentlich verfügbaren Datenlage war. Die recherchierten Produktionsmengen der Stahl- und Walzwerke sowie die Rohstahlerzeugungskapazität der 15 betrachteten Sekundärstahlwerke können Tabelle 5.2 entnommen werden. Die berichteten CO₂-Emissionen der Werke sind in Tabelle 5.3 aufgeführt. Sonstige werksunabhängige Prozessparameter der Berechnungslogik sind in Tabelle 5.4 aufgelistet. Da für die betrachteten Werke keine Emissionsfaktoren des eingesetzten Strommixes verfügbar sind, wird der landesspezifische (deutsche) Strommix aus dem Basisjahr und der entsprechende Emissionsfaktor (0,573 kgCO₂e/kWh) für *efact*^{electmix} zugrunde gelegt (vgl. Tabelle 5.4). Auch für die THG-Emissionen in den Vorketten (*emiss*^{upstream}) werden Durchschnittswerte verwendet, da diesbezüglich ebenfalls keine werkspezifischen Daten verfügbar sind. *emiss*^{upstream} basiert auf dem cradle-to-gate GWP aus Ecoinvent V2.2 (2007-2013) für die Herstellung einer Tonne Rohstahl im Elektrolichtbogenofen¹⁴. Dieses GWP der Vorkette (*emiss*^{upstream}) wird hier um die separat ermittelten direkten und indirekten anlagenspezifischen THG-Emissionen bereinigt (vor allem bzgl. der Herstellung und Nutzung elektrischer Energie). Demnach belaufen sich die THG-Emissionen der Vorkette auf 199,41 kgCO₂e/t Rohstahl (vgl. Tabelle 5.4).

¹⁴ GWP100 der Herstellung einer Tonne Sekundärstahl beträgt nach Ecoinvent V.2.2 (2007-2013) 425,39 kgCO₂e/t Rohstahl.

Tabelle 5.2:Berichtete Produktionsvolumina und Rohstahlkapazitäten der betrachteten
Werke für das Bezugsjahr 2012 (Datengrundlage: Stahlinstitut VDEh 2014c;
BSW 2016; Feralpi Stahl 2015; Salzgitter AG, Stahlinstitut VDEh 2014b, 2014a)

Werk	Rohstahl [kt/a]	Rohstahl- kapazität [kt/a]	Walzstahl [kt/a]	Anmerkung	
1	944	1.100	695	-	
2	2.324	2.800	2.134	Produktionsmengen aus dem Jahr 2013. Für 2012 waren keine Informationen zur Produktionsmenge verfügbar.	
3	557	620	0	Kein Walzwerk	
4	1.401	2.000	0	Kein Walzwerk	
5	154	300	0	Produktionsmengen für die Werke 5 und 6 nur als Summe verfügbar. Aufteilung er- folgt gemäß Breun (2016) anhand der Men- genverhältnisse der Vorjahre. Keine Kapazitäten öffentlich verfügbar. An- nahme Produktionskapazität muss bei min- destens 300 kt liegen, da dies das Produkti- onsvolumen im Jahr 2011 war. Kein Walzwerk in Werk 5.	
6	103		120	Siehe Anmerkung Werk 5	
7	427	1.200	314	Verwendung der Produktionsmengen aus dem Jahr 2013, um Vergleichbarkeit mit berichteten CO ₂ -Emissionen zu schaffen. Produktionsmengen für die Werke 7 und 8 nur als Summe verfügbar. Aufteilung er- folgt gemäß Breun (2016) anhand der Men- genverhältnisse der Vorjahre.	
8	473		229	Siehe Anmerkung Werk 7	
9	890	1.400	797	-	
10	352	440	130	-	
11	864	1.000	644	-	
12	751	1.000	693	-	
13	1.091	1.100	808	-	
14	1.499	2.000	1.258	-	
15	827	1.000	827	-	

 Tabelle 5.3:
 Berichtete CO2-Emissionen der betrachteten Sekundärstahlwerke (Stahl- und Walzwerke) für das Berichtsjahr 2012 (Datengrundlage: EEA 2007-2016; DEHSt 2019)

Werk	Berichtete CO ₂ - Emissionen	Anmerkungen
	[t/a]	
1	137.405	Wert der DEHSt von 2013 anhand der Produktionsmenge 944 kt für 2012 umgerechnet.
2	222.776	-
3	46.274	-
4	150.000	-
5	11.806	-
6	24.493	Für das Walzwerk wurden in 2012 keine CO ₂ -Emissionen be- richtet. Annahme: gleiche Menge im Walzwerk in 2012 und 2013.
7	115.856	CO ₂ -Emissionen von 2013.
8	72.773	CO ₂ -Emissionen von 2013.
9	63.939	-
10	67.867	Für das Walzwerk wurden in 2012 keine CO ₂ -Emissionen be- richtet. Annahme: gleiche Menge im Walzwerk in 2012 und 2013.
11	154.000	-
12	107.000	-
13	146.000	-
14	274.000	-
15	107.000	-

Notation	Beschreibung	Ausprägung [Einheit]	Quelle	
mcr_{ps_1, ps_2}	Produktionskoeffizient	1	European Com-	
		[t Rohstahl/t Walzstahl]	mission (2013)	
$efact_{ps_1}$	Emissionsfaktor Stahl-	0,126	European Com-	
	werk	[tCO ₂ /t Rohstahl]	mission (2013)	
	Emissionsfaktor Walz-	0 147	European Com-	
efact _{ps2}	werk	[tCO ₂ /t Walzstahl]	mission (2013);	
	werk		Breun (2016)	
$\emptyset BAT^{\operatorname{Hot}_{\mathbb{R}}}$	Stromverbrauch_Warm-	106	European Com-	
	walzwerk_Durchschnitt	[kWh/t Walzstahl]	mission (2001)	
	Stromverbrauch Kalt- walzen je nach Anlagen- tvp	Werk 6 = 170	European Com-	
ØRAT Cold_R		Werke 9,12 = 212	mission (2001);	
<i>VDNI_C</i>		Werk 10 = 138	Stahlinstitut VDEh	
	ζγp	[kWh/t Walzstahl]	(2014b)	
B AT EAF	Stromverbrauch_Stahl-	404	European Com-	
DAImin	werk_min	[kWh/t Rohstahl]	mission (2013)	
RATEAF	Stromverbrauch_Stahl-	748	European Com-	
DAImax	werk_max	[kWh/t Rohstahl]	mission (2013)	
$AP_{max}^{\rm EAF}$	Nennscheinleis-	1.600	Stahlinstitut VDEh	
	tung_max	[kVA]	(2014b)	
$AP_{min}^{\rm EAF}$	Nennscheinleis-	170	Stahlinstitut VDEh	
	tung_min	[kVA]	(2014b)	
$efact_l^{electmix}$	Emissionsfaktor Strom-	0,573	UBA (2019a)	
	mix Deutschland (2012)	[kgCO₂e/kWh]		
emiss _l ^{upstream}	THG-Emissionen der		Ecoinvent V2.2	
	Vorkette (für alle Werke	199,41	(2007-2013) und	
	gleich, da alle in	[kgCO₂e/t Rohstahl]	eigene Berech-	
	Deutschland)		nung	

 Tabelle 5.4:
 Allgemeine (werksunabhängige) Prozessparameter für die Anwendung des ECCO2-Steel2er Modells

5.1.6.4 Fallstudienergebnisse und Validierung

Die Ergebnisse des ECCO₂-Steel2er Modells zeigen große Unterschiede der CO₂e-Emissionen zwischen den untersuchten Sekundärstahlwerken (vgl. Abbildung 5.10). Der geschätzte PCF (cradle-to-gate(out)) dieser Werke liegt zwischen "Best-in-Class" (BiC) 638 kgCO₂e/t Rohstahl bis "Worst-in-Class" (WiC) 894 kgCO₂e/t Rohstahl; das entspricht einer relativen Abweichung um maximal 40 % und einer absoluten Abweichung von 256 kgCO₂e/t Rohstahl.
Der durchschnittliche PCF der betrachteten Werke liegt bei 801 kgCO₂e/t Rohstahl.

Diese relativ breite Streuung des PCF zwischen den Werken ist zu einem großen Teil auf die Walzwerke zurückzuführen, da diese durch eine Vielzahl unterschiedlicher Prozesse und Prozesstiefen mit unterschiedlichen, anlagenspezifischen Energieintensitäten charakterisiert sind. Das Warmwalzen ist beispielsweise mit höheren direkten CO₂-Emissionen verbunden als das Kaltwalzen, da mehr Erdgas zum Aufheizen des Rohstahls benötigt wird. Beim Kaltwalzen muss hingegen mehr elektrische Energie eingesetzt werden, da die Umformung unmittelbar durch mechanische Krafteinwirkung erfolgt, und dazu entsprechend höhere Kräfte erforderlich sind. (Gara und Schrimpf 1998) Dieser höhere Stromverbrauch beim Kaltwalzen im Vergleich zum Warmwalzen führt daher zu vergleichsweise höheren indirekten CO₂-Emissionen des Kaltwalzens. Die Unterschiede der direkten CO₂-Emissionen der Elektrolichtbogenöfen sind ebenfalls durch die Intensität des Erdgaseinsatzes bedingt. Je nach Ofen (z.B. Oxy-Fuel Brenner) kann sich dies wiederum ebenfalls reduzierend auf den Stromverbrauch auswirken (Breun 2016). Es ergeben sich auch Unterschiede dadurch, dass einige Werke nicht vor Ort walzen und gemäß der Berechnungslogik bzw. Simulation vollintegrierter Werke durchschnittliche CO2-Emissionen für das Walzen angenommen werden.



Abbildung 5.10: Ergebnisse des PCF einer Tonne Rohstahl (cradle-to-gate(out)) der 15 betrachteten Sekundärstahlwerke in Deutschland

Das ECCO₂-Steel2er Modell wurde entwicklungsbegleitend in regelmäßigen Workshops Industriepartnern und Experten vorgestellt, um die Berechnungslogik und die daraus resultierende Genauigkeit der Ergebnisse durch Feedback weiter zu verbessern. Nach Fertigstellung wurde eine detaillierte Validierung in Kooperation mit einem der größten Sekundärstahlwerke in Deutschland durchgeführt. Zusammen mit dem Betreiber wurde jede Annahme und jeder einzelne Berechnungsschritt des Modells analysiert und plausibilisiert. Dabei konnte erneut die Vorgehensweise der Simulation vollintegrierter Werke erfolgreich bestätigt werden. Die Vorgehensweise wurde bereits beim ECCO₂-Steel1er Modell von Experten und Industrievertretern/partnern für plausibel erachtet, um Vergleichbarkeit zwischen Werken zu schaffen. Im Rahmen der Validierung wurden auch die Modellergebnisse mit den unternehmensinternen Daten verglichen. Dabei wurde die Modellschätzung vom Betreiber als sehr präzise bewertet und die Abweichung der prognostizierten direkten CO₂-Emissionen des Werkes zu den tatsächlichen direkten CO₂-Emissionen pro Tonne Rohstahl wurde vom Betreiber auf 1 % beziffert.

Des Weiteren stimmt der Mittelwert der 15 Werke von 801 kgCO₂e/t Rohstahl nahezu mit den Ecoinvent-Mittelwerten Ecoinvent V2.2 (2007-2013) für Europa überein: Gemäß Ecoinvent V2.2 (2007-2013) belaufen sich die durchschnittlichen THG-Emissionen eines Elektrostahlwerks auf 425 kgCO₂e/t Rohstahl. Für das Walzen von Rohstahl in Warmwalzwerken fallen weitere 280 kgCO₂e/t an, und für das Walzen des Rohstahls in Kaltwalzwerken sind es 361 kgCO₂e/t. Für Sekundärstahlwerke, die vorwiegend warm walzen, können die THG-Emissionen nach Ecoinvent V2.2 (2007-2013) folglich auf 705 kgCO₂e/t gewalzten Stahl und für diejenigen Werke, die kalt walzen, auf 786 kgCO₂e/t gewalzten Stahl beziffert werden. Im Durchschnitt ergeben sich daraus nach Ecoinvent V2.2 (2007-2013) 746 kgCO₂e/t gewalzten Stahls. Durch die im Modell vorgenommene Normierung auf Rohstahl (funktionelle Einheit) und einem Produktionskoeffizienten der Rohstahl- zu Walzstahlproduktion von 1 entspricht dies 746 kgCO₂e/t Rohstahl. Im Vergleich zwischen den Durchschnittswerten aus dem ECCO₂-Steel2er Modell und Ecoinvent muss berücksichtigt werden, dass Ecoinvent einen durchschnittlichen europäischen Strommix mit einem Emissionsfaktor von 0,53 kgCO₂e/kWh verwendet. Zur Vergleichbarkeit wird dieser Emissionsfaktor auch im ECCO₂-Steel2er Modell anstelle des Emissionsfaktors des deutschen Strommixes eingesetzt. Damit errechnet sich ein Durchschnittswert der 15 Stahlwerke dieser Fallstudie in Höhe von 771 kgCO₂e/t Rohstahl. Nach Vereinheitlichung des Emissionsfaktors ergibt sich daraus eine Abweichung von 3,3 %.

Die Ergebnisse lassen sich auch mit Breun (2016) vergleichen, der die direkten CO₂-Emissionen werksspezifisch für deutsche Elektrolichtbogenöfen und Walzwerke modelliert hat. Er ermittelte eine Bandbreite von ca. 150680 kgCO₂e/t Rohstahl. Im vorliegenden Modell liegen die Bandbreite der direkten Emissionen zwischen 99 und 325 kgCO₂e/t Rohstahl (vgl. Abbildung 5.10). Die großen Abweichungen liegen vor allem in der Aktualität der Datenbasis begründet. Breun (2016) verwendet Daten aus dem Jahr 2007, während in dieser Arbeit Daten aus dem Jahr 2012 genutzt werden. Die in E-PRTR berichteten Daten der CO₂-Emissionen der Elektrolichtbogenöfen waren im Jahr 2007 deutlich höher als im Jahr 2012 und sind daher der Hauptgrund für die großen Abweichungen, da beide Ansätze auf den in E-PRTR berichteten Emissionen basieren.

5.1.7 Teilmodul A3: Primäraluminiumerzeugung (ECCO₂-Alu1er)

Im dritten Teilmodul (A3) von Systemmodul A wird das ECCO₂-Alu1er Modell vorgestellt, mit dem die THG-Emissionen der Primäraluminiumherstellung werksspezifisch abgeschätzt werden können. Wie im Teilmodul A1 wurde auch das Teilmodul A3 bzw. das darin inbegriffene ECCO₂-Alu1er Modell im Detail bereits separat in Schiessl et al. (2021) veröffentlicht, sodass sich auch hier aus Gründen der Übersichtlichkeit auf die für die vorliegende Arbeit wesentlichen Aspekte beschränkt wird. Dies umfasst eine Beschreibung des Ziel- und Untersuchungsrahmens des Modells, eine Erläuterung der Vorgehensweise der Berechnungslogik und die Anwendung des Modells anhand einer Fallstudie, sodass die Ergebnisse dieser Fallstudie im weiteren Verlauf der Arbeit verwendet werden können. Wie in den Kapiteln zuvor schließt auch dieses Kapitel mit einer Diskussion der Fallstudienergebnisse und einer Validierung des Modells. Wie in Teilmodul A1 wird bewusst auf eine detaillierte Beschreibung des mathematischen Modells verzichtet und diesbezüglich auf Schiessl et al. (2021) verwiesen. Ausgeklammert werden auch die verwendeten werksspezifischen Daten der Fallstudie, die in Schiessl et al. (2021) recherchiert und aufbereitet wurden.

5.1.7.1 Ziel und Untersuchungsrahmen

Ziel des ECCO₂-Alu1er Modells ist das werksspezifische Abschätzen von THG-Emissionen der Primäraluminiumherstellung, um Aluminiumhüttenwerke bezüglich ihres Product Carbon Footprints miteinander vergleichen zu können. Als Bezugsgröße bzw. funktionelle Einheit (vgl. Ökobilanzierung in Kapitel 3.2.3.3) wird dazu eine Tonne Rohaluminium (gegossen) definiert (ps₃), da Rohaluminium das Kernprodukt aller integrierten Hüttenwerke ist. Abbildung 5.11 zeigt alle betrachteten Produktionsanlagen und -prozessschritte und die damit verbundenen Stoffflüsse der Zwischenprodukte, die sich auf die werksspezifischen CO₂e-Emissionen auswirken. Abbildung 5.11 veranschaulicht ebenfalls die gesetzten Systemgrenzen der Modellierung. Es wird zwischen dem System der "Aluminiumhütte" (gate(in)-to-gate(out)) und dem System "Vorkette" (cradle-to-gate(in)) unterschieden. Im gate-togate System liegt der Fokus der Modellierung auf den prozessbedingten Emissionen (CO₂- sowie perfluorierte Kohlenwasserstoffe (PFC)), die während des Aluminiumherstellungsprozesses am Standort entstehen (Scope 1), und auf den indirekten, energiebedingten Emissionen (Scope 2), die durch die Bereitstellung der verwendeten elektrischen Energie verursacht wurden.¹⁵ Im System Vorkette (cradle-to-gate(in)) werden alle Treibhausgase berücksichtigt und in CO₂e ausgewiesen, die in vorgelagerten Aktivitäten der Lieferkette entstehen (Scope 3).

¹⁵ Zur Erläuterung des Herstellungsprozesses von Primäraluminium siehe Kapitel 2.4.3.1.



Abbildung 5.11: Prozessschritte einer Primäraluminiumhütte einschließlich der im Modell betrachteten Systemgrenzen und Material- und Energieflüsse (vgl. Schiessl et al. 2021)

5.1.7.2 Berechnungslogik

Analog zu den Teilmodulen (A1 und A2) erfolgt auch in A3 die Entwicklung der Berechnungslogik durch Anpassung des generischen Berechnungsansatzes aus Kapitel 5.1.3 auf die Produktionsprozesscharakteristika der hier zu bewerteten Primäraluminiumherstellung. Wie den Berechnungsschritten in Abbildung 5.12 entnommen werden kann, stimmt die Berechnungslogik in vielen Schritten mit der des Teilmoduls A1 zur werksspezifischen Abschätzung der THG-Emissionen der Primärstahlherstellung überein. In Abgrenzung zur Primärstahlherstellung entfällt hier jedoch die Bilanzierung von Prozessgasen, da bei der Aluminiumherstellung keine Prozessgase erzeugt werden, die als Energieträger weiterverwendet werden können, sodass diese Berechnungsschritte (vgl. S2 in Kapitel 5.1.3) entfallen. Andererseits kommt jedoch ein Schritt zur Berechnung der werksspezifisch verursachten perfluorierten Kohlenwasserstoff (PFC)-Emissionen hinzu (siehe S5). Wie bei der Primärstahlherstellung haben auch bei der Primäraluminiumherstellung nicht alle Werke alle Produktionsanlagen vor Ort, um sämtliche Prozessschritte selbst durchführen zu können, sodass auch hier ein Zwischenhandel von Zwischenprodukten (z.B. Anoden und flüssiges Aluminium) berücksichtigt werden muss. Um eine Vergleichbarkeit zwischen den Produktionswerten und eine anschließende Normierung auf die funktionale Einheit (kgCO₂e/t Rohaluminium) zu ermöglichen, werden die mit den Zwischenprodukten verbundenen CO2e-Emissionen dem Standort zugeordnet, an dem die Zwischenprodukte zu Rohaluminium verarbeitet werden (vgl. Zwischenhandel Primärstahl Kapitel 5.1.5.2).

Es besteht eine starke Analogie zur Berechnungslogik der werksspezifischen THG-Emissionen der Primärstahl- und Sekundärstahlherstellung der Teilmodule A1 und A2 sowie der ausführlichen generischen Beschreibung des Berechnungsansatzes in Kapitel 5.1.3. Daher wird hier auf eine erneute Erläuterung der einzelnen Prozessschritte verzichtet. Eine detaillierte Erläuterung der Schritte sowie die aufgestellten Formeln, Formelnotationen und verwendeten Annahmen und Bedingungen finden sich zudem in Schiessl et al. (2021)¹⁶.

¹⁶ Siehe Schiessl, Andreas; Müller, Richard; Volk, Rebekka; Schultmann, Frank (2021): Site-specific environmental impact assessment as a basis for supplier selections – exemplary application to aluminum In: Journal of Cleaner Production.



Abbildung 5.12: Berechnungslogik des ECCO2-Alu1er Modells

5.1.7.3 Fallstudie Primäraluminiumhütten in Deutschland

Eine exemplarische Anwendung des entwickelten Modells erfolgt für die vier in Deutschland vorhandenen Primäraluminiumhütten (vgl. Abbildung 5.13). Über die in Kapitel 5.1.4 bereits erläuterten Daten bzw. Datenquellen hinaus werden für die Fallstudie vor allem Unternehmensberichte der betrachteten Aluminiumhütten benötigt. Die spezifisch verwendeten Berichte können Schiessl et al. (2021)¹⁷ entnommen werden, in der die verwendeten Daten aufbereitet und vollumfänglich dargestellt werden. Als Basisjahr für die im Modell verwendeten Daten wurde das Jahr 2012 gewählt, da dies zum Zeitpunkt der Datenrecherche das Jahr mit der umfassendsten öffentlich verfügbaren Datenlage war.

¹⁷ Siehe Schiessl, Andreas; Müller, Richard; Volk, Rebekka; Schultmann, Frank (2021): Site-specific environmental impact assessment as a basis for supplier selections – exemplary application to aluminum In: Journal of Cleaner Production.



Abbildung 5.13: Geografische Standorte der vier betrachteten Primäraluminiumhütten in Deutschland

5.1.7.4 Fallstudienergebnisse und Validierung

Die mithilfe des Modells berechneten werksspezifischen THG-Emissionen für die untersuchten Werke liegen zwischen 13.689 kgCO₂e/t Rohaluminium für Werk 4 (BiC) bis 14.964 kgCO₂e/t Rohaluminium für Werk 3 (WiC). Wie in Abbildung 5.14 dargestellt, sind die Abweichungen zwischen den THG-Emissionen der verschiedenen Werke mit maximal 9,3 % nur gering. Im Durchschnitt werden in den untersuchten Primäraluminiumwerken 14.111 kgCO₂e/t Rohaluminium emittiert. Trotz der geringen relativen Abweichung (9,3 %) zwischen dem BiC- und dem WiC-Werk, beläuft sich die absolute Differenz auf 1.275 kgCO₂e/t Rohaluminium und ist sogar größer als zwischen den BiC und WiC Primärstahlwerken (1.111 kgCO₂e/t Rohstahl) der Fallstudie in Kapitel 5.1.5.3. Dies zeigt erneut die Notwendigkeit der Ent-

wicklung und Nutzung werksspezifischer Bewertungsmodelle von Metallherstellern, um durch Beschaffungsentscheidungen einen Beitrag zur Reduktion von THG-Emissionen in Lieferketten leisten zu können.

Da für alle deutschen Werke ein einheitlicher landesspezifischer Strommix angenommen wurde und die berichteten PCF-Emissionen der Werke (normiert auf eine Tonne Rohaluminium) ähnlich hoch sind, sind die Abweichungen der werksspezifischen PCFs hauptsächlich auf drei Gründe zurückzuführen:

- den Zwischenhandel von Anoden, da Anoden im Ausland mit einem deutlich höheren (z.B. in China) oder niedrigeren (z.B. in Skandinavische Länder) Carbon Footprint hergestellt werden;
- 2. firmeninternes Prozess Know-how und
- 3. anlagenspezifische Effizienzmaßnahmen bzw. technologisch fortschrittlichere Anlagen.



Abbildung 5.14: Ergebnisse des PCF einer Tonne Rohaluminium (cradle-to-gate(out)) der vier Primäraluminiumhütten in Deutschland (Schiessl et al. 2021)

Das ECCO₂-Alu1er Modell wurde über einen Zeitraum von zwei Jahren entwickelt und wurde parallel in regelmäßigen Abständen Industriepartnern und Experten vorgestellt, um die Genauigkeit der Ergebnisse durch Feedback weiter zu steigern und Verbesserungsvorschläge umzusetzen. Zudem wurde das Modell in Kooperation mit einem der Hersteller detailliert validiert, indem jede Annahme und jeder einzelne Berechnungsschritt analysiert wurden. Die Vorgehensweise wurde schließlich vom Hersteller als plausibel bewertet. Weiterhin verglich der Kooperationspartner das Gesamtergebnis bzw. den abgeschätzten Product Carbon Footprint (PCF) für das Werk mit den werksinternen Emissionsdaten. Aus Geheimhaltungsgründen durfte der Hersteller keine absoluten Zahlen nennen, bezifferte die Abweichung zwischen den beiden Werten jedoch auf maximal 6 %.

Darüber hinaus wurde der Mittelwert der in ECCO₂-Alu1er modellierten Werke (14.111 kgCO₂e/t Rohaluminium) mit dem europäischen Durchschnittswert von 12.121 kgCO₂e/t Rohaluminium aus der Ecoinvent Datenbank (Ecoinvent V2.2 2007-2013) verglichen. Um eine Vergleichbarkeit herstellen zu können, muss jedoch aufgrund des großes Einflusses des Verbrauchs an elektrischer Energie am PCF zunächst ein einheitlicher Strommix verwendet werden. Der europäische Durchschnittswert aus Ecoinvent basiert auf einem europäischen Strommix mit einem Emissionsfaktor von 0,353 kgCO₂e/kWh. Das ECCO₂-Alu1er Modell rechnet mit dem deutschen Strommix aus dem Jahr 2012, der einem Emissionsfaktor von 0,573 kgCO₂e/kWh entspricht (UBA 2019a). Um den Ecoinvent-Datensatz mit den Modellergebnissen vergleichen zu können, wurde exemplarisch der in Ecoinvent zugrunde gelegte europäische Emissionsfaktor der Stromerzeugung auf den deutschen Wert geändert.

Darüber hinaus übersteigen die in der Ecoinvent-Datenbank hinterlegten PFC-Emissionen in Höhe von 1.860 kgCO₂e/t Rohaluminium bei Weitem die durchschnittlichen Meldewerte der deutschen Werke (nach Normierung: 301 kgCO₂/t Rohaluminium). Dies kann als Indiz für die effiziente Prozesssteuerung und -führung der untersuchten Produktionswerke in Deutschland angesehen werden. Die durch diese Anpassung hergestellte Vergleichbarkeit unter sonst gleichen Bedingungen, zeigt einen "neuen" (angepassten) Wert basierend auf Ecoinvent von 13.921 kgCO₂e/t Rohaluminium. Damit zeigt sich nur eine geringe Abweichung von 1,37 % (190 kgCO₂e/t Rohaluminium) im Vergleich zum deutschen Durchschnittswert aus dem ECCO₂-Alu1er Modell.

5.1.8 Teilmodul A4: Sekundäraluminiumerzeugung (ECCO₂-Steel2er)

Im Teilmodul A4 wird das ECCO₂-Alu2er Tool präsentiert, welches das Abschätzen werksspezifischer THG-Emissionen der Sekundäraluminiumherstellung ermöglicht.

5.1.8.1 Ziel und Untersuchungsrahmen

Ziel des ECCO₂-Alu2er Modells ist das werksspezifische Abschätzen von THG-Emissionen der Sekundäraluminiumherstellung in Remeltern und Refinern (vgl. Kapitel 2.4.3.2), damit unterschiedliche Sekundäraluminiumwerke hinsichtlich ihres PCFs miteinander verglichen werden können. Als Bezugsgröße bzw. funktionelle Einheit (vgl. Ökobilanzierung in Kapitel 3.2.3.3) wird wie im ECCO₂-Alu1er Modell eine *Tonne Rohaluminium* definiert, da dies auch das Kernprodukt in Sekundäraluminiumwerken ist. Zudem ermöglicht eine identische funktionelle Einheit eine Vergleichbarkeit zwischen den Ergebnissen. Abbildung 5.15 zeigt die betrachteten Produktionsanlagen und -prozessschritte und die damit verbundenen Stoffflüsse, die sich auf die werksspezifischen CO₂e-Emissionen auswirken.¹⁸ Zudem veranschaulicht Abbildung 5.15 die gesetzten Systemgrenzen der Modellierung. Es wird zwischen dem System des "Remelters oder Refiners" (gate(in)-to-gate(out)) und dem System "Vorkette" (cradle-to-gate(in)) unterschieden. Im gate-to-gate System liegt der Fokus der Modellierung auf den prozessbedingten CO₂-Emissionen, die im Stahl- und Walzwerk am Standort entstehen (Scope 1) und auf den indirekten, energiebedingten CO₂-Emissionen, die durch die Bereitstellung der verwendeten elektrischen Energie verursacht wurden (Scope 2). Im System Vorkette (cradle-to-gate(in)) werden alle Treibhausgase berücksichtigt und in CO2e ausgewiesen, die durch vorgelagerte Aktivitäten in der Lieferkette entstehen (Scope 3).

¹⁸ Zur Erläuterung des Herstellungsprozesses von Sekundäraluminium siehe Kapitel 2.4.3.2.



Abbildung 5.15: Prozessschritte eines Remelters und eines Refiners einschließlich der im Modell betrachteten Systemgrenzen und Material- und Energieflüsse

5.1.8.2 Berechnungslogik und Implementierung

Im Vergleich zu den vorherigen Teilmodulen, kann der generische Ansatz hier stark vereinfacht werden. Pro Standort wird jeweils nur eine Anlage modelliert, weil die Weiterverarbeitung (z.B. Walzprozesse) in der Regel an separaten Standorten erfolgt (vgl. Breun 2016). Dadurch entfällt sowohl die Logik zur Berechnung der THG-Emissionen aus dem Zwischenhandel von Zwischenprodukten als auch die Normierung anderer Produktionsprozesse auf das im Werk hergestellte Rohaluminium. Zudem kann die top-down Allokation auf die Sekundäraluminiumroute nicht angewendet werden, da Remelter und Refiner unter der Berichtschwelle des Schadstoffemissionsregisters (PRTR) liegen (vgl. Breun 2016). Die genannten Gegebenheiten führen dazu, dass sich die Berechnungslogik in diesem Teilmodul auf drei Schritte beschränkt (vgl. Abbildung 5.16), die im Folgenden näher beschrieben werden.



Abbildung 5.16: Berechnungslogik des ECCO2-Alu2er Modells

Schritt 1 (S1): Im ersten Schritt werden bottom-up die werks- und anlagenspezifischen THG-Emissionen des im Werk eingesetzten Remelters oder Refiners ermittelt ($emiss_{ps_1,\bar{l}}^{fuel_comb}$). Dies umfasst alle THG-Emissionen die durch die Verbrennung von Brennstoffen (vgl. European Aluminium 2013), wie z.B. Erdgas, verursacht werden.

(S2): Im zweiten Schritt werden bottom-up die indirekten THG-Emissionen durch die Bereitstellung des verwendeten Stroms ($emiss_{ps_1,l}^{elect}$) werksspezifisch berechnet. $SEC_{ps_1,l}^{Remelter}$ gibt dabei den spezifischen Verbrauch an elektrischer Energie an, der im Remelter des Werkes l zur Herstellung einer Tonne Rohaluminium benötigt wird [kWh/t Rohaluminium]. $SEC_{ps_1,l}^{Refiner}$ gibt analog den spezifischen Stromverbrauch eines Refiners an, der zur Herstellung einer Tonne Rohaluminium in Werk l benötigt wird [kWh/t Rohaluminium]. $efact_l^{\text{electmix}}$ beschreibt den Emissionsfaktor der Strombereitstellung des Werkes l und wird hier landesspezifisch angenommen, sofern keine werksspezifischen Daten verfügbar sind.

$$emiss_{ps_{1},l}^{\text{elect}} = \begin{cases} SEC_{ps_{1},l}^{\text{Remelter}} \cdot efact_{l}^{\text{electmix}} & , l \in Remelter \\ SEC_{ps_{1},l}^{\text{Refiner}} \cdot efact_{l}^{\text{electmix}} & , l \in Refiner \end{cases}$$
(5.15)

(S3): Im dritten Schritt werden die gate-to-gate Emissionen aus Schritt 1 und die indirekten Emissionen aus Schritt 2 um die THG-Emissionen aus der Vorkette ($emiss_l^{upstream}$) ergänzt. Nach Schritt 3 können die gesamten THG-Emissionen (cradle-to-gate) ($emiss_l^{total}$) werksspezifisch pro Tonne Rohaluminium angegeben werden.

$$emiss_l^{\text{total}} = emiss_{ps_1,l}^{\text{fuel}_\text{comb}} + emiss_{ps_1,l}^{\text{elect}} + emiss_l^{\text{upstream}}$$
(5.16)

5.1.8.3 Fallstudie der Sekundäraluminiumwerke in Deutschland

Als Fallstudie wurden 15 Sekundäraluminiumhütten in Deutschland ausgewählt, (vgl. Abbildung 5.17), die zu den größten Zulieferern von Sekundäraluminium in Deutschland zählen. Die Auswahl erfolgte durch bilaterale Expertengespräche mit fünf deutschen Großkonzernen der Automobil- und Gebrauchsgüterindustrie. Zur Vergleichbarkeit mit den vorherigen Teilmodulen wurde als Basisjahr ebenfalls das Jahr 2012 gewählt. Durch die vereinfachte Berechnungslogik in diesem Teilmodul ist das Basisjahr allerdings nur für den Emissionsfaktor des Strommixes der Werke relevant. Da der Strommix anhand öffentlich verfügbarer Quellen nicht werksspezifisch ermittelt werden kann, wurde für alle 15 Werke der Emissionsfaktor für den deutschen Strommix aus dem Basisjahr verwendet (0,573 kgCO₂e/kWh) (vgl. Tabelle 5.5).



Abbildung 5.17: Geografische Standorte der 15 betrachteten Sekundäraluminiumwerke in Deutschland

Da für die eingesetzten Anlagen zudem keine THG-Emissionen öffentlich berichtet werden und auch seitens der Betreiber und Anlagenhersteller keine anlagen- bzw. ofenspezifischen Emissionsfaktoren öffentlich zur Verfügung gestellt werden, konnten nur durchschnittliche Emissionsfaktoren verwendet werden. Die Formel zur Bestimmung der prozessbedingten THG-Emissionen ($emiss_{ps_1,l}^{fuel_comb}$) richtet sich daher nach der Fallunterscheidung in (5.17). Demnach wird hinsichtlich des Emissionsfaktors unterschieden, ob im Werk ein Remelter oder Refiner betrieben wird. Die Menge *Remelter* umfasst alle Werke l, in denen Remelter zur Sekundäraluminiumherstellung verwendet werden. Die Menge *Refiner* umfasst analog alle Werke, in denen Refiner zur Sekundäraluminiumherstellung verwendet werden.

$$emiss_{ps_{1},l}^{\text{fuel_comb}} = \begin{cases} efact_{ps_{1}}^{\text{Remelter}} & , l \in Remelter\\ efact_{ps_{1}}^{\text{Refiner}} & , l \in Refiner \end{cases}$$
(5.17)

Der Emissionsfaktor der Verbrennung eingesetzter Brennstoffe im Remelter ($efact_{ps_1}^{\text{Remelter}}$) beläuft sich gemäß European Aluminium (2013) auf 265 kgCO₂/t Rohaluminium.

Für Refiner existieren in European Aluminium (2013) keine Angaben zu den CO_2 -Emissionen aus Verbrennungsprozessen ($efact_{ps_1}^{Refiner}$). Es ist nur das gesamte GWP mit 507 kgCO₂e/t Rohaluminium angegeben, sowie die Information, dass 81 % (411 kgCO₂e/t Rohaluminium) der THG-Emissionen direkt, thermisch sowie in Hilfsprozessen verursacht wurden und 19 % durch die Bereitstellung elektrischer Energie. Derartige Daten sind auch für den Remelter vorhanden, der ein GWP von 367 kgCO₂e/t Rohaluminium aufweist. Davon wurden 82 % (301 kgCO₂e/t Rohaluminium) direkt, thermisch sowie in Hilfsprozessen verursacht und 18 % durch die Bereitstellung elektrischer Energie. Aufgrund dieser nahezu gleichen Verteilung der THG-Emissionen zwischen direkt, thermisch und Hilfsprozessen und Bereitstellung elektrischer Energie wird angenommen, dass das Verhältnis zwischen dem Emissionsfaktor aus der Verbrennung eingesetzter Brennstoffe (z.B. 265 kgCO₂/t Rohaluminium für den Remelter, s.o.) und der Summe aus "direkt, thermisch und Hilfsprozessen" zwischen Remelter (301 kgCO2e/t Rohaluminium, Verhältnis = 265/301)¹⁹ und Refiner ebenfalls nahezu identisch ist. Auf Basis dieser Annahme und Berechnung belaufen sich die direkten

¹⁹ Für Remelter gilt: Emissionsfaktor der Verbrennung von Brennstoffen = 265 kgCO₂. Alle direkten, thermischen und Hilfsprozesse zusammen verursachen 301 kgCO₂e. Anteil der Verbrennung wäre dann 265/301. Dieser Anteil wird auf Refiner übertragen, da für diese keine Angaben zum Emissionsfaktor aus Verbrennungsprozessen vorliegen (s.o.).

CO₂-Emissionen eines Refiners auf 297 kgCO₂e/t Rohaluminium. Diese Abschätzung erweist sich als plausibel, da von Ecofys et al. (2009) ein ähnlicher Emissionsfaktor von 320 kgCO₂e/t Rohaluminium angegeben wurde.

Der spezifische, elektrische Energieverbrauch eines Remelters ($SEC_{ps_1,l}^{Remelter}$) liegt gemäß European Aluminium (2013) bei 124 kWh/t Rohaluminium. Für den Refiner ($SEC_{ps_1,l}^{Refiner}$) liegt dieser bei 181 kWh/t Rohaluminium. Jedoch wurde auch dieser Wert aufgrund der schlechteren Datenlage im Vergleich zu Refinern mithilfe der oben genannten Daten abgeschätzt.²⁰ Dazu muss zuvor der in European Aluminium (2013) verwendete Emissionsfaktor des Strommixes berechnet werden (0,533 kgCO₂e/kWh), der auf Basis der Remelter-Daten bestimmt werden konnte.²¹ Der im Modell verwendete Emissionsfaktor des deutschen Strommixes ($efact_l^{electmix}$) beträgt wie in den vorherigen Teilmodulen 0,573 kgCO₂e/kWh (UBA 2019a).

Bezüglich der THG-Emissionen in der Vorkette wird ebenfalls zwischen Remeltern ($emiss_l^{upstream_Remelter}$) und Refinern ($emiss_l^{upstream_Refiner}$) unterschieden, sodass sich $emiss_l^{upstream}$ gemäß der Fallunterscheidung in (5.18) bestimmt. $emiss_l^{upstream_Remelter}$ und $emiss_l^{upstream_Refiner}$ basieren auf dem jeweiligen cradle-to-gate GWP aus Ecoinvent V2.2 (2007-2013)²², das um die ermittelten direkten und indirekten anlagenspezifischen THG-Emissionen bereinigt wird. Demnach belaufen sich die THG-Emissionen der Vorkette für Remelter auf 105 kgCO₂e/t Rohaluminium und für Refiner auf 591 kgCO₂e/t Rohaluminium.

²⁰ (507 [kgCO₂e/t Rohaluminium]*19 %)/0,533 [kgCO₂e/kWh] = 181 [kWh/t Rohaluminium].

²¹ (367 [kgCO₂e/t Rohaluminium]*18 %)/124 [kWh/t Rohaluminium] = 0,533 [kgCO₂e/kWh].

²² GWP100 der Herstellung einer Tonne Sekundäraluminium auf Basis von Neuschrott (Wert für Remelter: 420 kgCO₂e/t Rohaluminium) und auf Basis von Altschrott (Wert für Refiner: 1380 kgCO₂e/t Rohaluminium) (Ecoinvent V2.2 2007-2013).

$$emiss_{l}^{upstream} = \begin{cases} emiss_{l}^{upstream_Remelter} & , l \in Remelter \\ emiss_{l}^{upstream_Refiner} & , l \in Refiner \end{cases}$$
(5.18)

Die zur weiteren Berechnung der Fallstudienergebnisse verwendeten Daten werden zusammengefasst in Tabelle 5.5 aufgeführt.

2000274			
Notation	Beschreibung	Ausprägung	Quelle
$efact_{ps_1}^{\text{Remelter}}$	Emissionsfaktor Re- melter	265 [kgCO ₂ /t Rohalu- minium]	European Alu- minium (2013)
$efact_{ps_1}^{ ext{Refiner}}$	Emissionsfaktor Re- finer	297 [kgCO2/t Rohalu- minium]	European Alu- minium (2013) und eigene Be- rechnung
$SEC_{ps_1,l}^{\text{Remelter}}$	Spezifischer Strom-	124 [kWh/t Rohalumi-	European Alu- minium (2013)

181 [kWh/t Rohalumi-

0,573 [kgCO₂e/kWh]

105 [kgCO₂e/t Rohalu-

591 [kgCO₂e/t Rohalu-

nium]

minium]

minium]

European Alu-

minium (2013)

und eigene Berechnung

UBA (2019a)

Ecoinvent V2.2

und eigene Berechnung Ecoinvent V2.2

(2007-2013)

(2007-2013)

und eigene Berechnung

Tabelle 5.5:	Allgemeine (werksunabhängige) Prozessparameter für die Anwendung des
	ECCO ₂ -Alu2er Modells

5.1.8.4	Fallstudienergebnisse und Validierung	

Spezifischer Strom-

verbrauch Refiner

Emissionsfaktor

land (2012)

Strommix Deutsch-

THG-Emissionen der

Vorkette (Remelter)

THG-Emissionen der Vorkette (Refiner)

Wie in Kapitel 5.1.8.2 beschrieben, liegen die betrachteten Remelter und Refiner unter der Berichtsschwelle des PRTR, sodass hinsichtlich der werksspezifischen THG-Emissionen nur auf Basis der am Standort verwendeten

 $SEC_{ps_1,l}^{\text{Refiner}}$

 $efact_{l}^{electmix}$

 $emiss_l^{upstream_Remelter}$

 $emiss_l^{upstream_Refiner}$

Anlagen (Remelter vs. Refiner) unterschieden werden kann. Für die Herstellung von Rohaluminium auf Basis von Neuschrott in Remeltern werden gemäß des Modells 441 kgCO₂e/t Rohaluminium emittiert. Die Herstellung von Rohaluminium aus Altschrotten in Refinern verursacht 992 kgCO₂e/t Rohaluminium.



Abbildung 5.18: Ergebnisse des PCF einer Tonne Rohaluminium (cradle-to-gate(out)) der 15 betrachteten Sekundäraluminiumwerke (Remelter und Refiner) in Deutschland

Eine Validierung der berechneten deutschen Sekundäraluminiumwerke mit der Ecoinvent Datenbank zeigt, dass der Carbon Footprint der vier Remelter (441 kgCO₂e/t Rohaluminium) nahezu mit dem Durchschnittswert aus Ecoinvent V2.2 (2007-2013) für Europa (420 kgCO₂e/t Rohaluminium) übereinstimmt (relative Abweichung: 5 %). Ein Vergleich der modellierten Refiner (992 kgCO₂e/t Rohaluminium) zeigt jedoch eine absolute Abweichung

von 388 kgCO₂e/t Rohaluminium (relative Abweichung: 39 %) zum Ecoinvent-Wert (1.380 kgCO₂e/t Rohaluminium). Dies liegt darin begründet, dass die in Ecoinvent V2.2 (2007-2013) ausgewiesenen direkten Emissionen aus der Verbrennung von Brennstoffen²³, 636 kgCO₂e/t Rohaluminium verursachen. Gemäß der neueren, oben verwendeten Daten aus European Aluminium (2013) und eigenen Berechnungen liegt dieser Wert bei ca. 297 kgCO₂e/t Rohaluminium und ist damit um 339 kgCO₂e/t Rohaluminium geringer, was ungefähr der oben festgestellten Abweichung entspricht.

5.2 Herstellung chemischer Grundstoffe: Teilmodule A5 und A6

Nachdem die THG-Emissionen der wichtigsten Metalle in den Teilmodulen A1-A4 nun werksspezifisch abgeschätzt werden können, widmet sich dieses Kapitel der werks- und produktspezifischen Abschätzung von THG-Emissionen in der Chemieindustrie. Eine Einführung zur chemischen Industrie, den wichtigsten Grundstoffen und Fertigungsverfahren bzw. -anlagen ist bereits in Kapitel 2.5 erfolgt.

In Kapitel 5.2.1 werden die Problemstellung und Zielsetzung der Teilmodule A5 und A6 im Kontext der Chemieindustrie erläutert. In Kapitel 5.2.2 werden aktuelle Ansätze und existierende Studien zur Bilanzierung von THG-Emissionen und Energieaufwand oder durchgeführte LCAs vorgestellt. Basierend auf der Literaturanalyse wird in Kapitel 5.2.3 ein Forschungsansatz abgeleitet und eine neue Methode entwickelt, mit der erstmals THG-Emissionen werksspezifisch abgeschätzt werden können. Die spezifische Entwicklung, Formulierung des mathematischen Modells und Implementierung erfolgt in

²³ Gemäß Ecoinvent V.2.2 (2007-2013) sind dies schweres und leichtes Heizöl sowie vor allem Erdgas.

Kapitel 5.2.4 und fokussiert sich einerseits auf höherwertige Crackerprodukte (Teilmodul A5) und andererseits auf sonstige chemische Grundstoffe (Teilmodul A6). Die Teilmodule A5 und A6 werden in den Kapiteln 5.2.5 bzw. 5.2.6 jeweils anhand einer Fallstudie (Propylen bzw. Toluoldiisocyanat) exemplarisch angewendet. Dies umfasst auch eine Diskussion und Validierung der Ergebnisse.

5.2.1 Problemstellung und Zielsetzung

In diesem Teil der Arbeit wird ein Ansatz entwickelt, mit dem die THG-Emissionen bei der Herstellung eines chemischen Produktes werksspezifisch abgeschätzt werden können, bspw. um effizientere Werke identifizieren zu können (vgl. Forschungsbedarf in Kapitel 3.6).

Allerdings stellt die Entwicklung eines werksspezifischen Ansatzes für die Chemieindustrie aufgrund der Komplexität chemischer Werke und wegen der großen Anzahl verschiedener Produkte eine besondere Herausforderung dar. Chemieanlagen sind in den letzten Jahrzehnten zu riesigen, integrierten Chemieparks zusammengewachsen in denen beispielsweise zur Energieeinsparung die abstrahlende Restwärme eines Prozesses zur Vorbeheizung eines anderen Prozesses verwendet wird. Auch werden bei einem Prozess ausscheidende Nebenprodukte als Kraftstoff oder Rohstoff für einen anderen Prozess eingesetzt, um eine möglichst effiziente und energiesparende Produktionsweise zu generieren. (Fleiter et al. 2013; Saygin 2012) Hinzu kommt, dass im Gegensatz zu anderen Industrien nicht nur ein Produkt, sondern mehrere verschiedene Produkte, wie z.B. beim Steamcracken oder der Chloralkalielektrolyse, entstehen können.²⁴ Dies ist besonders im

²⁴ Diese so genannte Kuppelproduktion (Verbundproduktion) ist charakteristisch für die chemische Industrie. Bei der Chloralkalielektrolyse zur Produktion von Natronlauge werden die Kuppelprodukte Chlor und Wasserstoff erzeugt. Beim Steam-Cracking entstehen neben Hauptprodukten wie Ethylen und Propylen eine breite Palette weiterer Produkte wie z.B. Butadien und Pyrolsebenzin (BASF 2017d). (Saygin 2012; Fleiter et al. 2013)

Hinblick auf die korrekte und überschneidungsfreie Allokation von Treibhausgasen auf Produkte und Prozesse herausfordernd. Die Primärdaten der Hersteller können zwar helfen, Transparenz in den komplexen Verbundsystemen zu schaffen und die Berechnungen dadurch zu vereinfachen, allerdings sind diese unternehmensinternen Primärdaten (wie auch in der Metallindustrie) in der Regel vertraulich und daher nicht öffentlich zugänglich (Saygin 2012). Um trotz dieser Herausforderungen einen Beitrag zur Schaffung von Transparenz und Reduzierung von THG-Emissionen in Lieferketten zu leisten, wird im Folgenden ein Ansatz entwickelt, mit dem der Carbon Footprint eines chemischen Grundstoffs, auch ohne die Verwendung von Primärdaten werksspezifisch abgeschätzt werden kann. Ein weiteres Ziel ist, dass die zu entwickelnde Berechnungslogik möglichst generisch ist, um auf möglichst viele Werke und Grundstoffe anwendbar zu sein (vgl. Modellanforderungen in Kapitel 4.1).

Im Folgenden wird die relevante Literatur zur Bewertung von THG-Emissionen in der Chemieindustrie analysiert, um zu erforschen, ob auf bestehenden Arbeiten aufgebaut werden kann und in welchem Ausmaß neue Ansätze entwickelt werden müssen.

5.2.2 Literaturdiskussion und Forschungslücken

Der Chemieverband PlasticsEurope²⁵ veröffentlicht regelmäßig aktualisierte Ökoprofile (EcoProfiles) für viele chemische Produkte. In diesen Ökoprofilen werden LCAs nach dem cradle-to-gate-Ansatz veröffentlicht (PlasticsEurope 2018).²⁶ Dabei verwendet PlasticsEurope bezüglich der Produktionsprozesse Primärdaten, die von Verbandsmitgliedern zur Verfügung gestellt werden.

²⁵ PlasticsEurope ist ein führender paneuropäischer Verband, der die in der europäischen Kunststoffindustrie tätigen Kunststoffhersteller vertritt (PlasticsEurope 2020).

²⁶ Diese Ökoprofile umfassen Life Cycle Inventory Datensätze und Umwelt-Produktdeklarationen (EPD) für Kunststoffe (PlasticsEurope 2018).

Die verwendeten Daten unterliegen der Geheimhaltung, sodass für die berechneten Ergebnisse, wie z.B. für das GWP100 eines Produkts nur der Durchschnittswert der verschiedenen Hersteller angeben wird.

In der Literatur existieren viele cradle-to-gate-Studien zur Bewertung des benötigten Energieaufwands oder resultierender direkter und indirekter THG-Emissionen der Herstellung chemischer Produkte: Zur Bewertung der Produktion von Olefinen auf Basis von Öl, Kohle, Methan und Ethan führten unter anderen Ren et al. (2006), Ren (2009), Xiang et al. (2014a; 2014b; 2015), Chen et al. (2017) und Amghizar et al. (2017) detaillierte technoökologische Analysen durch. Eine sehr umfangreiche Arbeit stammt von Fleiter et al. (2013), die für viele verschiedene Grundchemikalien die benötigte Produktionsenergie auf Basis von Bottom-Up-Analysen untersucht. Der eigentliche chemische Prozess wurde dabei als Black Box betrachtet. Im Mittelpunkt stand die sogenannte "Sekundärenergie", also das Erfassen der Inputund Outputströme für elektrischen Strom, Dampf und Brennstoff. Diese Input- und Outputströme wurden mit aktuellen pauschalen Umrechnungsfaktoren²⁷ in die ursprüngliche Form als Primärenergie zurückgeführt, um auf diese Weise verschiedene Prozesse und Produkte miteinander vergleichen zu können. Zur Überprüfung haben die Autoren ihre ermittelten Ergebnisse noch einem Top-Down-Modell gegenübergestellt, das den Energieverbrauch der Grundstoffchemie aus verfügbaren Statistiken der AG Energiebilanzen (AGEB 2009) und des Statistischen Bundesamtes landesweit ermittelt. (vgl. Fleiter et al. 2013)

Ein engerer Fokus der Literaturanalyse auf die werksspezifische Bewertung von THG-Emissionen chemischer Produkte ergab, dass es bereits zahlreiche Studien zu werksspezifischen LCAs gibt (u.a. Pereira et al. (2013), Hannouf und Assefa (2017), Kanchanapiya et al. (2015) oder Zhao et al. (2017)). In

²⁷ Fleiter et al. (2013) machen zu den Umrechnungsfaktoren keine weiteren Angaben. Es ist davon auszugehen, dass damit z.B. der Wirkungsgrad bei der Stromerzeugung, bspw. durch ein bestimmtes Kraftwerk (z.B. Gas und Dampf (GuD)-Kraftwerk), gemeint ist.

Pereira et al. (2013) wurden die THG-Emissionen eines Petrochemiewerks in Brasilien sehr detailliert modelliert und bewertet. Allerdings werden für die Produktionsprozesse, Rohstoffmischung und Prozessemissionen die spezifischen Herstellerdaten (Primärdaten) benötigt, die nicht öffentlich zugänglich sind (vgl. Kapitel 5.2.1). Hannouf und Assefa (2017) führten ein LCA für die Herstellung von HDPE (Polyethylen hoher Dichte) in einem Werk in Alberta/Kanada durch, das ebenfalls auf Primärdaten basiert. In Kanchanapiya et al. (2015) wurde ein CO₂-Bilanzierungsmodell erstellt, mit dem die THG-Emissionen von sieben thailändischen Chemiewerken berechnet werden können. Allerdings setzt auch dieser Ansatz das Vorhandensein von Primärdaten voraus. Die Primärdaten wurden zwar für die Studie verwendet, jedoch wurden keine werksspezifischen Ergebnisse publiziert, was darauf hindeutet, dass die Daten geheim gehalten werden mussten. Die Ergebnisse wurden lediglich verwendet, um für ausgewählte Produkte einen Durchschnittswert für Thailand zu bilden, der dann mit internationalen Durchschnittswerten verglichen werden konnte. Zhao et al. (2017) bewerten und vergleichen die THG-Emissionen von vier Herstellungspfaden der Propylen-Herstellung in China. Dabei wurden die vier Herstellungspfade catalytic cracking (CC bzw. FCC genannt), steam cracking (SC), coal-to-olefins und coalto-propylene untersucht, wobei es sich bei CC und SC um erdölbasierte Prozesse und bei coal-to-olefins und coal-to-propylene um kohlebasierte Prozesse handelt. Es wurde ein vereinfachtes LCA durchgeführt, das die Rohstoffgewinnung, den Transport der Rohstoffe, die Vorbereitung der Rohstoffe und die Produktion des Propylens umfasst. Die Berechnungen zeigen, dass unter den vier Herstellungspfaden, das CC und das SC die geringsten THG-Emissionen zur Herstellung von Propylen aufweisen. Als Datengrundlage verwendeten Zhao et al. (2017) die Primärdaten mehrerer chinesischer Chemiewerke und Durchschnittswerte aus der Literatur (z.B. aus Ou et al. 2011 oder Wang 2014).

Nach der Analyse der aktuellen Literatur zeigt sich, dass es viele werksspezifische Analysen zu THG-Emissionen chemischer Produkte gibt. Jedoch konnte kein Ansatz gefunden werden, der unabhängig von vertraulichen Originaldaten der Hersteller (Primärdaten) funktioniert. Die Anonymisierung der von den Herstellern zur Verfügung gestellten Primärdaten macht es für die Wissenschaft sowie Entscheidungsträger in der Wirtschaft, Politik und die Öffentlichkeit unmöglich, die Ergebnisse dieser Studien bestimmten Werken zuzuordnen.

Weiterhin stellte sich heraus, dass in den letzten Jahren zahlreiche Untersuchungen zu werksspezifischen LCAs chemischer Grundchemikalien anhand oder mithilfe von Flowsheeting-Simulationen durchgeführt wurden (siehe u.a. Mendivil et al. 2006; Nitzsche et al. 2016; Kikuchi et al. 2017; Bello et al. 2020; Keller et al. 2020). Die Flowsheeting-Simulation ist ein weitverbreitetes computergestütztes Instrument zur Simulation verfahrenstechnischer Prozesse. Ausgangspunkt dieser computergestützten Simulation bilden Fliesschemata des zu analysierenden Prozesses, welche die Grundoperationen abbilden und diese über Stoff- und Energieströme verknüpfen. (Trippe 2013) Eine gängige Software dafür ist z.B. Aspen Plus, die bereits zahlreiche Grundoperationen wie bspw. Reaktoren oder solche zum Aufteilen oder Erhitzen von Strömen enthält, die bei Bedarf manuell angepasst werden können. Diese Simulationsmodelle kennzeichnet eine aufwändige Parametrisierung, die notwendig ist, um das Verhalten der zu analysierenden Prozesse realitätsgetreu abbilden zu können. Daher ist die Anwendung der Flowsheeting-Simulation in der Regel auf kleinere Betrachtungsräume wie bspw. einzelne Anlagen, Prozesse oder Standorte beschränkt. (Breun 2016) Eine werksspezifische, aber gleichzeitig auch generische Berechnungslogik zur Abbildung sämtlicher bzw. deutscher Chemiewerke, wie im Rahmen dieser Arbeit gefordert, erscheint mithilfe dieses Instruments deshalb nicht realisierbar (vgl. hierzu bspw. Breun 2016 und Fröhling et al. 2009).

Daran anknüpfend wird festgestellt, dass es derzeit nur wenige werksspezifische Ansätze gibt, in denen eine generische Methodik entwickelt wurde. Kanchanapiya et al. (2015) entwickelten zwar ein generisches CO₂-Bilanzierungsmodell, das aber Primärdaten voraussetzt. Posen et al. (2015) entwickelten einen Ansatz, in dem eine Monte-Carlo-Simulation eingesetzt wurde, um die THG-Emissionen der konventionellen Polyethylen-Produktionsroute über Erdgas in den USA abzuschätzen. Allerdings liefert dieser Ansatz lediglich landesspezifische Werte für die USA. Der Ansatz wäre also übertragbar auf andere Länder, aber nicht auf spezifische Werke. Patel (2003) berechnete den kumulierten Energieaufwand sowie die kumulierten CO₂-Emissionen "cradle-to-gate" für Produkte der organischen Chemie. Für die Berechnung des Energieaufwands der Produktionsprozesse nutzte er hauptsächlich industrielle Durchschnittswerte, aber um den Energieaufwand der Energiebereitstellung abzuschätzen, integrierte er einen werksspezifischen Ansatz in seine Berechnungen. In diesem werksspezifischen Ansatz untersucht Patel (2003) deutsche Chemiewerke hinsichtlich ihrer werkseigenen Kraftwerke, um einerseits herauszufinden, wie viel Prozent des benötigten Dampfes und der benötigten Energie in eigenen Kraftwerken hergestellt werden und wie viel Prozent jeweils zugekauft wird. Andererseits wird nach der Art der Kraftwerke der Wirkungsgrad des selbsthergestellten Stroms ermittelt, um auf diese Weise den spezifischen Energieaufwand genauer feststellen zu können.

Aufgrund der gleichen Problemstellung und Zielsetzung wie bei den Teilmodulen A1-A4 liegt es nahe, auch für dieses Modell die entwickelte generische sequentielle Methodik des kombinierten Prozess-LCA (bottom-up und topdown) anzuwenden (vgl. Kapitel 5.1.3). Allerdings funktioniert diese Methode nur, wenn sich die berichteten top-down Daten eines Herstellers auf ein einziges Produkt beziehen (z.B. auf den produzierten Rohstahl eines Stahlwerks, vgl. Kapitel 5.1). Wie in den vorherigen Kapiteln zu den Teilmodulen A1-A4 beschrieben, sind solche verwendeten top-down Daten beispielsweise die berichteten THG-Emissionen eines Werks, die im European Pollutant Release and Transfer Register (EPRTR) der European Environment Agency (EEA 2007-2016) veröffentlicht werden und in diesem Fall dem einzigen Produkt "Rohstahl" zugeordnet werden können.

Eine Übertragbarkeit dieser Methodik auf die Chemieindustrie ist aber angesichts der Komplexität chemischer Werke und der großen Anzahl verschiedener Produkte, die gleichzeitig hergestellt werden, nicht möglich (vgl. Kapitel 5.2.1; Fleiter et al. 2013; Saygin 2012). Zusammenfassend haben Kunden der Chemieindustrie, wie Unternehmen der Verpackungs-, Bau-, Elektronik- oder Automobilindustrie derzeit keine Möglichkeit, die werksspezifisch verursachten THG-Emissionen ihrer Lieferanten abzuschätzen und als Kriterium in die Kaufentscheidung zu integrieren. Dies liegt zum einen darin begründet, dass ein werksspezifischer PCF der Produkte von Chemieunternehmen nicht veröffentlicht wird und lediglich Durchschnittswerte verfügbar sind. Zum anderen existieren in der Literatur keine Ansätze, mit denen der PCF eines chemischen Produkts werksspezifisch abgeschätzt werden kann, ohne auf vertrauliche, unveröffentlichte Primärdaten angewiesen zu sein. Schlussendlich fehlt eine Methodik, CO2-Effizienzunterschiede verschiedener Chemiewerke produktspezifisch anhand öffentlich verfügbarer Daten abzuschätzen.

Der folgend Forschungsansatz und die daraus entwickelten Teilmodule A5 und A6, bzw. die Modelle ECCO₂-HVC und ECCO₂-Basic Chemicals, sollen diese Forschungslücke schließen.

5.2.3 Forschungsansatz und Methode

5.2.3.1 Energiebasierter Ansatz und Fokus auf Grundstoffchemie

THG-Emissionen werden im Allgemeinen in **energie- und prozessbedingte** THG-Emissionen unterschieden. Als **energiebedingte** THG-Emissionen wird die Menge an CO_2e bezeichnet, die bei der Verbrennung von Energieträgern freigesetzt wird. (Weber 2014; Fleiter et al. 2013) Wie in Kapitel 2.5.1 beschrieben, verhalten sich die THG-Emissionen in der Chemieindustrie nahezu proportional zum Endenergieverbrauch, der einen Anteil von ca. 85 % an den gesamten THG-Emissionen der Chemischen Industrie hat (McKinsey 2006). Treiber dieses Endenergieverbrauchs ist an erster Stelle die Herstellung chemischer Grundstoffe, die 84 % des gesamten Energieverbrauchs der Chemieindustrie verursacht (vgl. Kapitel 2.5.1).

Bei **prozessbedingten** THG-Emissionen handelt es sich dagegen um diejenigen Emissionen, die bei bestimmten industriellen Herstellungsprozessen als Nebenprodukte im Verlauf einer chemischen Reaktion entstehen. (Weber 2014; Fleiter et al. 2013) 85 % der THG-Emissionen der Chemieindustrie sind wie erwähnt energiebedingt, also werden nur ca. 15 % prozessbedingt emittiert. Davon entfallen allein auf die Herstellung von Ammoniak ca. 74 %, auf Ruß ca. 13 % und auf Natriumcarbonat ca. 8 % (eigene Berechnung gemäß Datenlage EEA2017). Die gesamte Petrochemie, in der chemische Grundstoffe überwiegend hergestellt werden (vgl. Kapitel 2.5.1), hat lediglich einen Anteil von ca. 4 % an diesen prozessbedingten Emissionen.

Die folgende Berechnung der THG-Emissionen eines Produktionssystems zur Herstellung eines Produkts basiert daher auf einem energiebedingten Ansatz. Die benötigten Energiemengen werden dann über Emissionsfaktoren (z.B. [kgCO₂e/GJ]oder [kgCO₂e/kWh]) in ihr GWP bzw. in CO₂e überführt. Bei der Herstellung petrochemischer Wertprodukte aus dem Cracker (HVCs)²⁸ werden gemäß EEA (2017) keine prozessbedingten CO₂-Emissionen verursacht. Im Hinblick auf Crackerprodukte stehen HVCs deswegen im Mittelpunkt dieses Ansatzes. Für andere organische oder anorganische Chemikalien, außer den oben erwähnten (z.B. Ammoniak), sowie für die Chemiesparte der Polymerchemie werden ebenfalls keine prozessbedingten Emissionen berichtet. (EEA 2017) Ein energiebasierter Ansatz kann also für

²⁸ HVCs (high value chemicals) benennt höherwertige Chemikalien, die durch den Cracking Prozess erzeugt werden. Die bekanntesten und meist produzierten HVCs sind Propylen und Ethylen. (Amghizar et al. 2017)

HVCs und die meisten sonstigen organischen und anorganischen Chemikalien (z.B. Toluoldiisocyanat (TDI) oder Chlor) sowie für Kunststoffe in Primärformen (z.B. Polyether²⁹) uneingeschränkt angewendet werden.

5.2.3.2 Modellstruktur

Das entwickelte und im Folgenden beschriebene Modell zur Berechnung werksspezifischer PCFs eines HVCs heißt im Folgenden " $ECCO_2$ -HVC" (Evaluation tool to Compare CO₂e emissions of HVCs). Das Modell für sonstige chemische Grundstoffe heißt analog " $ECCO_2$ -Basic Chemicals". Eine Veranschaulichung des grundsätzlichen Modellkonzepts erfolgt in Abbildung 5.19.

Zur Bestimmung des Carbon Footprints der Herstellung eines chemischen Produkts wird eine Bilanzierung der THG-Emissionen als simplifiziertes S-LCA (vgl. Kapitel 3.2.3.7) nach den Rahmenbedingungen des LCA nach DIN EN ISO 14040:2006 und 14044 für ein cradle-to-gate-System durchgeführt. Die THG-Emissionen werden dabei bottom-up entlang der Prozesse (Prozess-LCA) und eingesetzten Technologien bewertet. Dies erstreckt sich einerseits auf die cradle-to-gate THG-Emissionen, die in vorgelagerten Prozessen (Vorkette) verursacht werden, und zum anderen auf die gate-to-gate THG-Emissionen eines betrachteten Produktionssystem bis zum fertigen Endprodukt. Die *funktionelle Einheit* des Modells wird dabei als die Produktion *einer Tonne eines spezifischen chemischen Produkts* (z.B. Propylen) an einem spezifisch ausgewählten Produktionsstandort definiert.

Die Wirkungsabschätzung zur Ermittlung des Product Carbon Footprints [in CO₂e] erfolgt nach der CML-Methode für die Wirkungskategorie Treibhaus-

²⁹ Im Bereich der Kunststoffverarbeitung werden z.B. TDI und Polyether zu Polyurethan verarbeitet (Europur 2015).

effekt (Klimaerwärmung) anhand des Charakterisierungsfaktors "Treibhauspotenzial" (GWP) über 100 Jahre (GWP100) in CO₂e (vgl. Kapitel 3.2.3.5).³⁰ Für Produkte, die in der Vorkette, also im cradle-to-gate-System erzeugt werden, werden die von Ecoinvent bestimmten Life Cycle Impact Assessment (LCIA) Werte zum GWP nach CML-Methode Version CML2001 verwendet. Für Produkte, die im "gate-to-gate" Produktionssystem hergestellt werden, werden die THG-Emissionen wie oben beschrieben über einen energiebasierten Ansatz bewertet (vgl. Kapitel 5.2.3.1).

Um das GWP eines Produkts nicht nur produkt-, sondern auch werksspezifisch zu bestimmen, wird für das gate-to-gate-Produktionssystem eine werksspezifische Energieeffizienz abgeschätzt, die in das jeweilige Prozess-LCA-Modell ECCO₂-HVC oder ECCO₂-Basic Chemicals integriert wird. Für höherwertige Crackerprodukte (HVCs) wird dazu die Energieeffizienz des am Produktionsstandort verwendeten Crackers abgeschätzt und für sonstige chemische Grundstoffe (hier: Nicht-Crackerprodukte) wird analog die Energieeffizienz der jeweiligen anderen benötigten Produktionsanlage abgeschätzt. Im Folgenden wird die Energieeffizienz eines Crackers auch als Crackereffizienz und die Energieeffizienz bei der Herstellung anderer chemischer Grundstoffe als Produktionseffizienz bezeichnet.

³⁰ Die in der CML-Methode verwendeten Charakterisierungsfaktoren bzw. CO₂-Äquivalenzfaktoren [kgCO₂e/kg] (DIN14040) der Gase werden Ecoinvent entnommen (z.B. für 1 kg Kohlenstoffdioxid (CO₂) = 1 kgCO₂e; 1 kg Methan (CH₄) = 25 kgCO₂e und 1 kg Distickstoffmonoxid (N₂O) = 298 kgCO₂e (Ecoinvent V2.2 2007-2013 EE)).



Abbildung 5.19: Modellkonzept zur Abschätzung werksspezifischer Product Carbon Footprints (PCFs) chemischer Grundstoffe

Der neue Ansatz erfordert detaillierte Recherchen in technischer Literatur, um geeignete Kriterien³¹ zu identifizieren und auszuwählen, anhand derer

³¹ Im Folgenden auch Faktoren genannt.

die Energieeffizienzen von Produktionsanlagen abgeschätzt werden können. Damit eine annähernd präzise Abschätzung der Energieeffizienzen möglich ist, wurden drei Bedingungen aufgestellt, die ein Kriterium erfüllen muss:

(1.) Erstens muss der Einfluss eines Kriterium auf die Energieeffizienz wissenschaftlich nachgewiesen sein.

(2.) Zweitens muss der Einfluss des Kriteriums auf die Energieeffizienz signifikant sein. Das bedeutet, dass eine enge Korrelation zwischen dem Energieverbrauch einer Produktionsanlage (z.B. Cracker) und dem betrachteten Kriterium herrschen muss.

(3.) Drittens kann ein Kriterium nur dann für die Berechnungslogik verwendet werden, wenn die benötigten Informationen bzw. Daten zu diesem Kriterium öffentlich verfügbar sind.

Neben der verfügbaren technischen Literatur (z.B. Beste verfügbare Techniken (BVT/BAT)) standen vor allem herstellerspezifische Berichte und Studien im Vordergrund (z.B. Jahres- und Nachhaltigkeitsberichte, Internetauftritte von Firmen oder eingetragene Patente beim Patentamt). Mögliche und schließlich ausgewählte Kriterien (vgl. Kapitel 5.2.4.1 für HVCs und Kapitel 5.2.4.2 für andere Basischemikalien) wurden darüber hinaus mit Experten³² aus der Chemieindustrie diskutiert und verifiziert. Nach Festlegung der Kriterien wurde eine erneute aufwändige Datenrecherche durchgeführt, um den ausgewählten Kriterien werksspezifische Daten zu hinterlegen. Als weitere Komponente wird ein werksspezifischer Emissionsfaktor für den elektri-

³² Dazu wurden 2017 drei Expertengespräche bei großen Chemieherstellern geführt, sowie ein Telefoninterview mit einem Unternehmensberater mit einschlägiger Erfahrung.
schen Strom berechnet. Vorhandene Kraftwerke innerhalb eines Chemiestandorts werden dazu nach Art des Kraftwerks, Wirkungsgrad und Menge des erzeugten Stroms untersucht.

5.2.3.3 Systemgrenzen und Modellierungsansatz

Eine große Herausforderung bei der Bewertung der GWPs der Herstellung chemischer Grundstoffe besteht in der Analyse der vorhandenen Energiedaten zur Herstellung chemischer Produkte in der Literatur. Häufig nennen verschiedene Quellen unterschiedliche Werte für die benötigte Energie oder den benötigten Dampf zur Erzeugung eines Produktes. So existieren teilweise Abweichungen bis zu 50 %. Dies liegt daran, dass unterschiedliche Systemgrenzen gesetzt wurden, andere Datensätze verwendet wurden oder verschiedene Regionen mit zudem unterschiedlichen Produktionstechnologien untersucht wurden. (Worrell et al. 1994; Ayres 1995) Es wurde daher darauf geachtet, dass die Daten in den hier entwickelten Modellen gewissenhaft und konsistent verwendet werden, sodass vor allem im Bereich der Systemgrenzen Doppelzählungen aufgrund von Überschneidungen vermieden werden. Der eigene Modellansatz grenzt darum klar das System "Vorkette" vom System "Produktionssystem im Chemiewerk" ab (vgl. Abbildung 5.20). Alle Produkte, die nicht im Produktionssystem eines betrachteten Chemiewerks hergestellt werden, sondern in vorgelagerten Prozessen, werden somit der Vorkette zugeordnet. Produktions- und Logistikprozesse der Vorkette werden als unbekannt angenommen, da meist für den Modellnutzer unklar ist, in welchem Land beispielsweise das verwendete Rohöl gefördert wurde oder mit welchen Transportmitteln es transportiert wurde. Das GWP von Produkten der Vorkette wird somit nur anhand von Durchschnittsdaten aus LCI oder LCIA Datenbanken (z.B. Ecoinvent) bewertet. Emissionen durch Transporte in den Vorketten sind in diesen Durchschnittswerten enthalten und werden somit berücksichtigt (vgl. Abbildung 5.20).



Abbildung 5.20: Systemgrenzen des Modellierungsansatzes und Unterscheidung zwischen Hauptprodukt, Zwischenprodukt und Nebenprodukt

Im Modell werden **Haupt-, Zwischen- und Nebenprodukte** definiert. Als **Hauptprodukte** werden all diejenigen Produkte definiert, für die der spezifische Energieverbrauch (SEC - specific energy consumption) zur Herstellung des Produkts in öffentlich verfügbaren Quellen angegeben ist. Diese benötigte Energie, im Folgenden auch Produktionsenergie genannt, gibt die zur Produktion eingesetzte Menge an elektrischer Energie, Dampf und Treibstoffen an. Der SEC-Wert wird in der Literatur häufig in Intervallen mit minimal und maximal nötigen Mengen angegeben z.B. (IEA 2009; Enviros Consulting 2006; European Commission 2017b). Der neu entwickelte Ansatz macht sich diese Abweichungen bzw. Intervalle zunutze, um die in Kapitel 5.2.3.2 beschriebene werksspezifische Energieeffizienz (von Cracker oder anderer Produktionsanlage) in das LCA Modell zu integrieren. Um abzuschätzen, wo im Intervall ein spezifisches Chemiewerk einzuordnen ist, wird auf Basis der berechneten Cracker- oder Produktionsenergieeffizienz des Werkes linear interpoliert. Auf diese Weise kann präzise ermittelt werden, wie viel Energie (SEC) ein Standort zur Produktherstellung benötigt. Wegen der Abhängigkeit des Modells von öffentlich verfügbaren Daten zur Produktionsenergie ist die Berechnung eines produkt- und werksspezifischen PCF daher definitionsgemäß nur für Hauptprodukte möglich.

Das Modell berücksichtigt auch den Umstand, dass in Abhängigkeit der Grenzen des Produktionssystems mehrere Hauptprodukte bilanziert werden müssen. Dies ist der Fall, wenn ein Hauptprodukt als Edukt (auch Reaktant genannt) direkt oder indirekt in ein anderes Hauptprodukt eingeht. Zum Beispiel geht p1=e4 in Abbildung 5.20 indirekt in das Hauptprodukt P ein oder ein HVC könnte als Edukt in einen anderen chemischen Grundstoff eingehen (vgl. Abbildung 5.19). Das Hauptprodukt **p**₁ könnte in einem Steamcracker erzeugtes Propylen sein, das als Edukt **e**₄ in einem Folgeprozess zu **p**_n (z.B. Propylenoxid) und in weiteren Prozessen zu einem Hauptprodukt **P** weiterverarbeitet wird. Die Edukte **e**₁ und **e**₂ wären in diesem Fall der Crackerfeed zur Herstellung von Hauptprodukt **p**₁. Die GWPs der Edukte **e**₁ und **e**₂ würden in diesem Fall aus der LCI Datenbank (z.B. Ecoinvent) entnommen. **P** stellt das letzte zu bilanzierende Hauptprodukt und damit auch die letzte Stufe einer betrachteten Wertschöpfungskette dar.

Die benötigten Mengen an elektrischer Energie und Dampf zur Herstellung von Zwischenprodukten, also die energiebedingten THG-Emissionen, sind bereits in dem Produktionssystem der Herstellung eines bestimmten Hauptprodukts enthalten. Dies betrifft z.B. die Produktion des Grundstoffs Toluoldiisocyanat (TDI) über die Zwischenprodukte Dinitrotoluol (DNT) und Diaminotoluol (TDA). Ein Durchschnittswert für die benötigte Produktionsenergie (SEC) des gesamten Herstellungsprozesses von TDI ist z.B. aus Studien der International Energy Ageny bekannt (IEA 2009), sodass TDI als Hauptprodukt definiert werden kann. DNT und TDA sind demnach Zwischenprodukte, deren benötigte Produktionsenergie im Wert der Produktionsenergie von TDI enthalten ist. Noch nicht darin enthalten sind die THG-Emissionen der Vorketten, also aller Prozesse, die vor, bzw. außerhalb des Produktionssystems zur Herstellung von TDI stattfanden. Daher müssen die THG-Emissionen (bzw. das GWP) durch die Vorketten dieser Zwischenprodukte noch zusätzlich berechnet werden. Das beinhaltet das GWP aller Vorprodukte bzw. Edukte der Vorkette eines Zwischenprodukts, wie z.B. Schwefelsäure, die unter anderem für die Herstellung des Zwischenprodukts DNT benötigt wird. Zur Bestimmung des GWP eines Produkts werden alle Produkte im Produktionssystem massebasiert bilanziert. Der massebasierte Allokationsansatz hat sich aus pragmatischen Gründen durchgesetzt und wird von den meisten Energieanalyse- und LCA-Experten angewendet (u.a. in Kindler und Nikles (1980), Peereboom et al. (1998) oder Zhao et al. (2017)). Der massebasierte Allokationsansatz bedeutet, dass die Anteile eines Edukts am Produkt stöchiometrisch auf Basis der chemischen Reaktionsgleichungen bilanziert werden. Es wird somit nur der Teil eines Stoffes betrachtet, der auch tatsächlich weiterverarbeitet wird; für anfallende stoffliche Überschüsse und Nebenprodukte wird angenommen, dass diese vollständig weiterverwendet werden können. Diese Annahme geht von heutzutage hochintegrierten chemischen Verbundstandorten aus, in denen das bei einem Prozess ausscheidende Nebenprodukt als Kraftstoff oder Rohstoff für einen anderen Prozess eingesetzt werden kann, um eine möglichst effiziente und energiesparende Produktionsweise zu generieren (vgl. Kapitel 5.2.1; Fleiter et al. 2013; Saygin 2012).

5.2.4 Modellentwicklung und Implementierung

In diesem Kapitel wird die Berechnungslogik des neuentwickelten Ansatzes zur Bestimmung werksspezifischer Product Carbon Footprints (auf Basis des GWPs) von chemischen Grundstoffen erläutert. In Kapitel 5.2.4.1 wird zunächst die Berechnungslogik des ECCO₂-HVC Modells zur Bewertung höherwertiger Crackerprodukte (HVCs) vorgestellt. Anschließend wird in Kapitel 5.2.4.2 die Berechnungslogik des ECCO₂-Basic Chemicals Modells erläutert, mit dem diejenigen chemischen Produkte bewertet werden, die nicht im Cracker, sondern in anderen Produktionsanlagen erzeugt werden. Der Input für diese anderen Produktionsanlagen können einerseits die zuvor bereits bewerteten HVCs oder andere Edukte innerhalb oder außerhalb der Systemgrenzen eines Standorts sein (vgl. Kapitel 5.2.3.3).

Beide Ansätze wurden sowohl generisch als auch unabhängig von originalen Produktionsdaten der Hersteller formuliert, sodass sie nicht nur auf viele verschiedene chemische Produkte, sondern auch auf sämtliche Hersteller angewendet werden können. Je nach Produkt sowie Verfügbarkeit und Aktualität der Daten geht die Berechnungslogik durch Fallunterscheidungen so werksspezifisch und aktuell wie möglich vor. Im Rahmen dieser Studie wurden beide Ansätze darüber hinaus als anwendbare Softwaremodelle programmiert. ECCO₂-HVC wurde in VBA programmiert und ECCO₂-Basic Chemicals in Mathworks Matlab.

Eine vollständige Übersicht und Bezeichnung der verwendeten Variablen, Mengen, Parameter und Indizes ist im Anhang (A.2 Notation Teilmodule A5 und A6 (ECCO₂-HVC und ECCO₂-Basic Chemicals) in Tabelle A.5 zu finden.

5.2.4.1 Teilmodul A5: Höherwertige Crackerprodukte (ECCO₂-HVC)

Das GWP eines höherwertigen Crackerprodukts (HVC) c aus Cracker x in Werk s ($GWP_{c,x,s}^{CrPr}$) in [kgCO₂e/kg] setzt sich zusammen aus der benötigten Energie des Crackers x zur Produktion von Produkt c in Werk s ($GWP_{c,x,s}^{Energy, Cr}$) und der entsprechenden Vorkette des Produkts c, das in Cracker x in Werk s produziert wird ($GWP_{c,x,s}^{Prechain, Cr}$) (vgl. (5.19)).

$$GWP_{c,x,s}^{\text{CrPr}} = GWP_{c,x,s}^{\text{Energy, Cr}} + GWP_{c,x,s}^{\text{Prechain, Cr}}$$
(5.19)

Das GWP der verbrauchten Energie zur Produktion von c ($GWP_{c,x,s}^{\text{Energy, Cr}}$) wird nach Formel (5.20) berechnet. $SEC_{c,x,s}^{\text{HVC}}$ bezeichnet den spezifischen

Energieverbrauch [GJ/t] zur Herstellung eines Cracker-Wertprodukts c im Cracker x in Werk s (vgl. Formel (5.21)). Der Faktor zur Umrechnung von [GJ/t] in [kWh/kg] beträgt 0,277778 und wird im Folgenden als Konstante K abgekürzt. $SEF_{x,s}^{HVC}$ ist der Emissionsfaktor der Rohstoffe für den Cracker x des Werkes s zur Herstellung chemischer Wertprodukte (HVCs) in [kgCO₂e/kWh] und berechnet sich gemäß (5.22).

$$GWP_{c,x,s}^{\text{Energy, Cr}} = SEC_{c,x,s}^{\text{HVC}} \cdot \text{K} \cdot SEF_{x,s}^{\text{HVC}}$$
(5.20)

Um $SEC_{c,x,s}^{HVC}$ in [GJ/t] werksspezifisch zu berechnen (vgl. Formel (5.21)), wird anhand der Crackereffizienz $EFF_{c,x,s}^{Cr}$ linear zwischen dem minimalen $(SEC_x^{HVC, \min})$ und maximalen spezifischen Energieverbrauch $(SEC_x^{HVC, \max})$ interpoliert. $EFF_{c,x,s}^{Cr}$ ist ein zu berechnender standortspezifischer Faktor zwischen [0;1], mit dem die Effizienz der Produktion von Produkt *c* in Cracker *x* in Werk *s* abgeschätzt wird (vgl. Formel (5.23)). $SEC_f^{FCC, \max}$ definiert den maximalen und $SEC_f^{FCC, \min}$ den minimalen spezifischen Energieverbrauch eines FCC-Crackers, wenn Rohstoff *f* als Cracker-Feed verwendet wird (z.B. *f* = Gasöl). $w_{x,f}$ gibt entsprechend den Anteil des Feeds *f* im Cracker *x* an. X_{FCC} bezeichnet die Menge der betrachteten FCC-Cracker im Modell und ist eine Teilmenge aller modellierten Cracker. SEC_f^{\max} ist analog der maximale und SEC_f^{\min} der minimale spezifische Energieverbrauch für Steamcracker (SC).

$$SEC_{c,x,s}^{HVC} = SEC_x^{HVC, \max} + \left(SEC_x^{HVC, \min} - SEC_x^{HVC, \max}\right) \cdot EFF_{c,x,s}^{Cr}$$

mit
$$SEC_x^{\text{HVC, max}} = \begin{cases} \sum_{f \in F} w_{x,f} \cdot SEC_f^{\text{FCC,max}} , x \in X_{FCC} \\ \sum_{f \in F} w_{x,f} \cdot SEC_f^{\text{max}} , sonst \end{cases}$$
 (5.21)

und
$$SEC_x^{\text{HVC, min}} = \begin{cases} \sum_{f \in F} w_{x,f} \cdot SEC_f^{\text{FCC,min}} , x \in X_{FCC} \\ \sum_{f \in F} w_{x,f} \cdot SEC_f^{\text{min}} , \text{sonst} \end{cases}$$

$$|\sum_{f\in F} w_{x,f} = 1$$

 $SEF_x^{HVC, \min}$ ist der minimale und $SEF_x^{HVC, \max}$ der maximale Emissionsfaktor [kgCO₂e/kWh] eines Crackers *x* zur Herstellung von HVC. SEF_f^{\min} bezeichnet den minimalen und SEF_f^{\max} den maximalen spezifischen Emissionsfaktor [kgCO₂e/kWh] durch Einspeisung des Rohstoffs *f* in den Cracker.

$$SEF_{x,s}^{HVC} = SEF_{x}^{HVC, \max} + (SEF_{x}^{HVC, \min} - SEF_{x}^{HVC, \max}) \cdot EFF_{c,x,s}^{Cr}$$

mit $SEF_{x}^{HVC, \max} = \sum_{f \in F} w_{x,f} \cdot SEF_{f}^{\max}$
und $SEF_{x}^{HVC, \min} = \sum_{f \in F} w_{x,f} \cdot SEF_{f}^{\min}$
 $|\sum_{f \in F} w_{x,f} = 1$ (5.22)

Im Folgenden wird die Berechnungslogik der Crackereffizienz $EFF_{c,x,s}^{Cr}$ erläutert (vgl. Formel (5.23)). Der Energieverbrauch eines Crackers hängt von mehreren Faktoren ab, wie z.B. der Rohstoffmischung (vgl. Formel (5.22)), dem Alter des Crackers, der Auslastungsrate oder der Wärmeintegrationseffizienz (Benchaita 2013; European Commission 2017b; Fleiter et al. 2013; IEA 2007). Während einige Faktoren wie das Alter eines Crackers spezifisch recherchiert werden können, ist die Wärmeintegrationseffizienz nicht spezifisch recherchierbar und muss durch andere Faktoren approximiert werden, die einen wissenschaftlich nachgewiesenen Einfluss auf die Wärmeintegrationseffizienz haben und zu denen öffentlich verfügbare Daten existieren (vgl. Kapitel 5.2.3.2). Solche Faktoren sind z.B. die Produktionskapazität einer Anlage, die Produktionskapazität eines gesamten Werkes, die Fläche eines Werkes oder der Nelson Index eines Werkes. Die im Folgenden verwendeten Faktoren zur Berechnung der Crackereffizienz $EFF_{c.x.s}^{Cr}$ sind:

 CrPrC_{c,x}, die Produktionskapazität von Cracker-Wertprodukt c im Cracker x [t/a], da sich die CO2e-Emissionen pro Tonne mit steigender Ausbringungsmenge des Crackers verringern. Dies wird in Abbildung 5.21 am Beispiel des HVCs Ethylen veranschaulicht. (Benchaita 2013).



Abbildung 5.21: CO₂e-Emissionen von Crackern am Beispiel der Ethylen-Herstellung (CEFIC 2008)

- 2. $FC_{s,x}$, die Werkskapazität zur Herstellung aller Produkte des Werkes s, zu dem der Cracker x gehört [t/a]. Die gesamte Werkskapazität wird berücksichtigt, da ein höheres Produktionsvolumen durch Größeneffekte ein höheres Potenzial zur Energieeinsparung bietet (Fleiter et al. 2013).
- 3. FA_{s,x}, die Werksfläche des Werkes s, zu dem der Cracker x gehört [km²]. Es wird angenommen, dass die Größe der Fläche eines Werkes in der Regel mit der Anzahl der Betriebe/Produktionsanlagen am Standort korreliert. Für die Werksfläche wird die Größe des gesamten Chemieparks herangezogen, auf dem das Werk lokalisiert ist, da ansässige Betriebe (herstellerunabhängig) untereinander integriert

sind (ChemCoastPark Brunsbüttel 2018b; CHEMCologne 2018). Ein großes Chemiewerk verfügt folglich über mehr Produktvielfalt und eine höhere Flexibilität in der Produktion als ein kleines Werk. Durch eine größere Produktvielfalt bzw. höhere Flexibilität können Kuppelprodukte besser in die Produktion anderer Produkte einbezogen werden. Dies resultiert in einer besseren Stoff- und Wärmeintegration. (Fleiter et al. 2013; ChemCoastPark Brunsbüttel 2018b; CHEM-Cologne 2018).

NI_{s x}, der Nelson Index des Werkes s, auf dem der Cracker x steht. Der 4. Nelson-Index (auch Nelson complexity index, NCI) ist eine 1960 entwickelte Kennzahl, um die Komplexität einer Erdölraffinerie zu messen, d.h. die Fähigkeit Erdöl in höherwertige Produkte zu verarbeiten. Als Referenzwert für die Bewertung dient die einfache Rohöldestillation mit einem Komplexitätsfaktor von 1,0. Durch weitere Anlagenteile und somit längere Wertschöpfungsketten erhöht sich die Gesamtkomplexität und damit der NI. Ein NI von 10 bedeutet beispielsweise, dass eine Raffinerie zehn Mal komplexer als eine reine Rohöldestillationsanlage ist. Die weltweit höchsten NI's liegen zwischen 14 und 15 (vgl. Reliance Industries Ltd. (2009) und weitere Literatur in Tabelle 5.9). Der NI wird in der Industrie auch als Messzahl für die Investitionsausgaben und das Wertschöpfungspotenzial einer Raffinerie verwendet. Eine Raffinerie mit einem hohen NI ist daher teurer in der Erstellung und im Betrieb, erstellt aber höherwertige Produkte. (Reliance Industries Ltd. 2009; Nelson 1960a, 1960b, 1961, 1976a, 1976b, 1976c) Nach Definition des NI und weil große und hoch integrierte Standorte bessere Möglichkeiten der Energiebereitstellung und Wärmeintegration haben (Fleiter et al. 2013), wird abgeleitet, dass ein hoher NI eines Werkes auch mit einem hohen Integrationsgrad einhergeht.

- CrAge_x, das Alter des Crackers x [Jahre]. Zwischen dem Alter und dem 5. Energieverbrauch eines Crackers kann in den BAT-Dokumenten zur Chemieindustrie kein Zusammenhang festgestellt werden. Als Begründung wird das ständige Aufrüsten zur energetischen Optimierung der Cracker aufgeführt, um Energiekosten zu sparen. (European Commission 2003) Nach Yao et al. (2016) sind neue Cracker in der Regel jedoch energieeffizienter als ältere Cracker, da bei neuen Crackern entlang des gesamten Prozesses immer die modernste Technologie eingesetzt wird. Wenn man berücksichtigt, dass die Energieeffizienz eines Crackers von vielen verschiedenen technischen Anlagen und Parametern abhängt (z.B. vom Wirkungsgrad der Dampfturbine, vom Wirkungsgrad des Kompressors oder vom Wirkungsgrad des Dampfsystems) (vgl. Yao et al. 2015), so scheint es unwahrscheinlich, dass ältere Cracker trotz späterer Investitionen dem aktuellsten Stand der Technik entsprechen. Im Rahmen dieser Arbeit wird daher die Annahme getroffen, dass ältere Cracker tendenziell einen höheren Energieverbrauch aufweisen als neuere. Wegen der nicht eindeutigen Korrelation zwischen dem Alter eines Crackers und der Energieeffizienz wird das Alter zur Schätzung der Energieeffizienz im Modell nur gering gewichtet.
- 6. $v_x^{\text{UR, Cr}}$ bezeichnet die Auslastung des Crackers x [%]. Der Energieverbrauch ist am niedrigsten, wenn die Anlage nah an der Design-Kapazität arbeitet (Fleiter et al. 2013).

Für alle Faktoren werden eine Untergrenze (Lower Limit - LL) und eine Obergrenze (Upper Limit - UL), also ein minimal und ein maximal möglicher Wert definiert. Zum Beispiel ist die Untergrenze für den Nelson Index (NI_{LL}) = 1 und die Obergrenze (NI_{UL}) = 14. Die Crackereffizienz ($EFF_{c,x,s}^{Cr}$) für Produkt c aus Cracker x in Werk s wird darauf aufbauend durch lineare Interpolation und Gewichtung der Faktoren (z.B. w^{NI}) in Formel (5.23) bestimmt.

$$EFF_{c,x,s}^{Cr} = w^{CrPrC} \cdot \max\left(0; \min\left(1; \frac{CrPrC_{c,x} - CrPrC_{c,LL}}{CrPrC_{c,UL} - CrPrC_{c,LL}}\right)\right) + w^{FC} \cdot \max\left(0; \min\left(1; \frac{FC_{s,x} - FC_{LL}}{FC_{UL} - FC_{LL}}\right)\right) + w^{FA,Cr} \cdot \max\left(0; \min\left(1; \frac{FA_{s,x} - FA_{LL}}{FA_{UL} - FA_{LL}}\right)\right) + w^{NI} \cdot \max\left(0; \min\left(1; \frac{NI_{s,x} - NI_{LL}}{NI_{UL} - NI_{LL}}\right)\right) + w^{CrAge} \cdot \max\left(0; \min\left(1; \frac{CrAge_x - CrAge_{LL}}{CrAge_{UL} - CrAge_{LL}}\right)\right) + w^{UR, Cr} \cdot v_x^{UR, Cr}$$
(5.23)

Als letzter Bestandteil zur Berechnung des gesamten GWPs der Herstellung eines Crackerprodukts *c* nach Formel (5.19) fehlt noch das GWP der Vorketten. Das GWP der Vorkette des Produkts *c* in Cracker *x* in Werk *s* $(GWP_{c,x,s}^{\text{Prechain}, \text{Cr}})$ berechnet sich gemäß Formel (5.24) und wird in $[\text{kgCO}_2\text{e}/\text{kg}]$ angegeben. $GWP_f^{\text{Ecoprofiles}}$ benennt das GWP des Rohstoffs *f* aus den Eco-profiles von PlasticsEurope $[\text{kgCO}_2\text{e}/\text{kg}]$. $GWP_f^{\text{Ecoinvent}}$ bezeichnet das GWP des Rohstoffs *f* aus der Datenbank Ecoinvent $[\text{kgCO}_2\text{e}/\text{kg}]$ und wird verwendet, falls für *f* kein GWP in den Eco-profiles existiert. Zur Beschreibung des Rohstoffumsetzungsgrads des Crackers *x* ($CR_x = Input/Output$) wird die Variable CR_x verwendet. Dieser definiert die Gesamtausbeute des Crackers, indem angegeben wird, wieviel des Inputs verwendet wird bzw. für spätere Produkte weiterverwendet werden kann.

$$GWP_{c,x,s}^{\text{Prechain, Cr}} = \left(\sum_{f \in F} w_x^f \cdot \left\{ \begin{array}{c} GWP_f^{\text{Ecoprofiles}} & , \exists GWP_f^{\text{Ecoprofiles}} \\ GWP_f^{\text{Ecoinvent}} & , sonst \end{array} \right) \cdot CR_x$$

$$(5.24)$$

5.2.4.2 Teilmodul A6: Sonstige Grundstoffe (ECCO₂-Basic Chemicals)

In Kapitel 5.2.4.2.1 wird zunächst die vollständige generische Berechnungslogik vorgestellt, um das GWP eines chemischen Grundstoffs werksspezifisch zu ermitteln. Wesentliche Komponenten sind dabei die werksspezifische Menge an Energie, die zur Produktion eines zu bewertenden Grundstoffs benötigt wird, sowie die aufwändige Berechnung des entsprechenden energiebedingten, werksspezifischen GWPs. Aus Gründen der Übersichtlichkeit werden die Berechnungen bezüglich der Produktionsenergie daher separat in Kapitel 5.2.4.2.2 vorgestellt.

5.2.4.2.1 Berechnungslogik zur Ermittlung des GWPs der Herstellung eines Grundstoffs

Das GWP der Herstellung eines chemischen Produkts berechnet sich aus einer stufenweisen Matrixrechnung in Abhängigkeit der Wertschöpfungsstufen i zur Berechnung des i-ten Produkts (i=1,...,P) in einer Wertschöpfungskette (Formel (5.25)).

$$B_{i} = (\bar{A} \cdot B_{i-1}) \circ a_{i} + (t_{0} + PE) \circ a_{i} + B_{i-1}$$

= $(\bar{A} \cdot B_{i-1} + t_{0} + PE) \circ a_{i} + B_{i-1}$ (5.25)

 B_i ist die CO₂e-Bilanz nach Wertschöpfungsstufe *i* und umfasst das GWP "cradle-to-gate" bis zu dieser Wertschöpfungsstufe *i* in [kgCO₂e/kg]. Matrix \overline{A} stellt die die Massenanteile der Edukte an den Produkten, bis hin zum *i*ten Produkt dar. B_{i-1} beinhaltet die GWPs der Produkte der vorherigen Wertschöpfungsstufe. Vektor a_i (vgl. Formel (5.30)) gewährleistet, dass in jeder Iteration nur die entsprechenden GWPs der betrachteten Wertschöpfungskette des *i*-ten Produkts zum Ergebnisvektor B_i hinzugefügt werden. Der Vektor t_0 (vgl. Formel (5.31)) enthält das GWP jedes Edukts, das zur Produktion eines Produkts *p* in Werk *s* eingesetzt wird, aber nicht werksspezifisch bestimmt werden kann ($GWP_{e,p,s}^{Edc}$). Davon ausgenommen sind Edukte, die Crackerprodukte sind, da deren GWPs nach dem crackerspezifischen Ansatz aus Kapitel 5.2.4.1 berechnet werden können. Der Vektor PE (vgl. Formel (5.33)) beinhaltet das berechnete GWP der benötigten Produktionsenergie für jedes Produkt, das werksspezifisch modelliert werden kann. Die Berechnung von PE erfolgt separat im anschließenden Kapitel 5.2.4.2.2. Im Folgenden werden die einzelnen Formelbestandteile näher erläutert.

Zur Berechnung in Formel (5.25) wird methodisch das Hadamard-Produkt verwendet (vgl. Beispiel in Abbildung 5.22), für dessen Berechnung die Dimensionen zweier Matrizen übereinstimmen müssen (Chakrabarty 2017).

$$\begin{pmatrix} 3 & 9 \\ 1 & 7 \\ 5 & 4 \end{pmatrix} \circ \begin{pmatrix} 7 & 2 \\ 2 & 5 \\ 8 & 7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \cdot 7 & 9 \cdot 2 \\ 1 \cdot 2 & 7 \cdot 5 \\ 5 \cdot 8 & 4 \cdot 7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 21 & 18 \\ 2 & 35 \\ 40 & 28 \end{pmatrix}$$

Abbildung 5.22: Beispiel zur Berechnung des Hadamard-Produkts

Durch die iterative Anwendung der Formel (5.25) bis hin zum zu bewertenden Endprodukt P ergibt sich der Ergebnisvektor B_P (Formel (5.26)). Dieser Ergebnisvektor enthält alle GWPs der Edukte bzw. Produkte aller Wertschöpfungskettenstufen i von Werk s ($GWP_{p,s}^{Pr}$) bis zum Endprodukt P($GWP_{P,s}^{Pr}$) in [kgCO₂e/kg].

$$B_{P} = \begin{pmatrix} GWP_{1,S}^{\Pr} \\ \vdots \\ GWP_{p,S}^{\Pr} \\ \vdots \\ GWP_{P,S}^{\Pr} \end{pmatrix}$$
(5.26)

Für ein Produkt p werden für die Produktion unterschiedliche Edukte e benötigt. Die Matrix \overline{A} (Formel (5.27)) stellt die Massenanteile der Edukte an den Produkten dar, wobei alle Produkte außer Endprodukt P, auch Edukte sein können. Es wird berechnet, wie groß der Massenanteil eines Edukts eam produzierten Produkt p in Werk s ist (Zellen in Matrix \overline{A}). $m_{e,p,s}^{\text{Edc}}$ bezeichnet die Masse des Edukts e, das zur Produktion des Produkts p im Werk sbenötigt wird. $m_{p,s}^{\text{Pr}}$ gibt die aus der Reaktion entstehende Masse des Produkts p bei Produktion in Werk s an. Bei der Produktion von p entstehen außerdem die Nebenprodukte $y \in Y$. Der Teil der Masse eines Edukts e, der bei der Erzeugung von p in Werk s zu Nebenprodukt y reagiert ($m_{e,y,p,s}^{\text{Edc, byPr}}$), wird subtrahiert, da Nebenprodukte anderweitig gleichwertig eingesetzt werden können (vgl. Kapitel 5.2.3.3).

$$\bar{A} = \begin{pmatrix} \frac{m_{e,p,s}^{\text{Edc}} - \sum_{y=1}^{Y} m_{e,y,p,s}^{\text{Edc, byPr}}}{m_{p,s}^{\text{Pr}}} & \cdots & \frac{m_{E,p,s}^{\text{Edc}} - \sum_{y=1}^{Y} m_{E,y,p,s}^{\text{Edc, byPr}}}{m_{p,s}^{\text{Pr}}} & 0\\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots\\ \frac{m_{e,P,s}^{\text{Edc}} - \sum_{y=1}^{Y} m_{e,y,P,s}^{\text{Edc, byPr}}}{m_{P,s}^{\text{Pr}}} & \cdots & \frac{m_{E,P,s}^{\text{Edc}} - \sum_{y=1}^{Y} m_{E,y,P,s}^{\text{Edc, byPr}}}{m_{P,s}^{\text{Pr}}} & 0 \end{pmatrix}$$
(5.27)

Die Matrix \overline{A} wird aus Massenbilanzen (Formel (5.28)) erzeugt, die auf produktspezifischen Reaktionsgleichungen (Formel (5.29)) basieren. Diese produktspezifischen Reaktionsgleichungen hängen von herstellerspezifischen Rezepturen ab, die z.B. beim europäischen Patentamt eingesehen werden können.

$$\sum_{e=1}^{E} m_{e,p,s}^{\text{Edc}} = m_{p,s}^{\text{Pr}} + \sum_{y=1}^{Y} m_{y,p,s}^{\text{byPr}}$$
(5.28)

$$\sum_{e=1}^{E} n_{e,p,s}^{\text{Edc}} \cdot M_e^{\text{Edc}} \xrightarrow{(=)} n_{p,s}^{\text{Pr}} \cdot M_p^{\text{Pr}} + \sum_{y=1}^{Y} n_{y,p,s}^{\text{byPr}} \cdot M_y^{\text{byPr}}$$
(5.29)

Analog zu $m_{p,s}^{Pr}$ bezeichnet $m_{y,p,s}^{byPr}$ die aus der Reaktion entstehende Masse des Nebenprodukts y bei Produktion von p in Werk s. $n_{e,p,s}^{\text{Edc}}$ steht für die Stoffmenge [mol] eines Edukts e, die zur Produktion des Produkts p in Werk s benötigt wird. M_e^{Edc} gibt die Molmasse [kg/mol] des Edukts e an. Analog benennt $n_{p,s}^{\text{Pr}}$ die entstehende Stoffmenge des Produkts p bei Herstellung in Werk s und M_p^{Pr} die Molmasse des Produkts p. Entsprechend bezeichnet $n_{y,p,s}^{\text{byPr}}$ die Stoffmenge des Nebenprodukts y, das bei der Herstellung von pin Werk s entsteht und M_v^{byPr} die Molmasse des Nebenprodukts y.

$$a_{i} = \begin{pmatrix} f_{1} \\ \vdots \\ f_{k} \\ \vdots \\ f_{P} \end{pmatrix}$$
(5.30)

$$\text{mit } f_1 = \begin{cases} 1 & , 1 = i \\ 0 & , 1 \neq i \end{cases}, f_2 = \begin{cases} 1 & , 2 = i \\ 0 & , 2 \neq i \end{cases}, \dots, f_k = \begin{cases} 1 & , k = i \\ 0 & , k \neq i \end{cases}$$

Das $GWP_{e,p,s}^{\text{Edc}}$ im Vektor t_0 (Formel (5.31)) bestimmt sich gemäß der Fallunterscheidung in Formel (5.32).

$$t_{0} = \begin{pmatrix} GWP_{1,1,S}^{\text{Edc}} \\ \vdots \\ GWP_{e,p,S}^{\text{Edc}} \\ \vdots \\ GWP_{E,p,S}^{\text{Edc}} \\ \vdots \\ GWP_{E,P,S}^{\text{Edc}} \end{pmatrix}$$
(5.31)

$$GWP_{e,p,s}^{\text{Edc}} = \begin{cases} GWP_{e,s}^{\text{Supp, Data}} &, 1. \\ \frac{1}{A_s} \sum_{x=1}^{X} GWP_{c,x,s}^{\text{CrPr}} &, 2. \\ \frac{1}{A} \sum_{s=1}^{S} \sum_{x=1}^{X} GWP_{c,x,s}^{\text{CrPr}} &, 3. \\ 0 &, 4. \\ 0 &, 5. \\ GWP_e^{\text{Ecoprofiles}} &, 6. \\ GWP_e^{\text{Econvent}} &, 7. \end{cases}$$

1.:
$$\exists GWP_{e,s}^{\text{Supp, Data}} \in GWP^{\text{Supp, Data}}$$
2.:
$$A_{s} \geq 1 \land Edc_{e} = CrPr_{c} \land \nexists GWP_{e,s}^{\text{Supp, Data}} \in GWP^{\text{Supp, Data}}$$
3.:
$$A_{s} = 0 \land Edc_{e} = CrPr_{c} \land \nexists GWP_{e,s}^{\text{Supp, Data}} \in GWP^{\text{Supp, Data}}$$
4.:
$$Edc_{e} = ImPr_{z} \land \nexists GWP_{e,s}^{\text{Supp, Data}} \in GWP^{\text{Supp, Data}}$$
5.:
$$Edc_{e} = MPr_{h} \land \nexists GWP_{e,s}^{\text{Supp, Data}} \in GWP^{\text{Supp, Data}}$$
6.:
$$\exists GWP_{e}^{\text{Ecoprofiles}} \in GWP^{\text{ecoprofiles}} \land \nexists GWP_{e,s}^{\text{Supp, Data}}$$
6.:
$$\exists GWP_{e}^{\text{Ecoprofiles}} \in GWP^{\text{ecoprofiles}} \land \nexists Edc_{e} = ImPr_{z} \land \nexists Edc_{e}$$

$$= MPr_{h} \land \nexists Edc_{e} = CrPr_{c}$$
7.:
$$\nexists GWP_{e}^{\text{Ecoprofiles}} \in GWP^{\text{Ecoprofiles}} \land \nexists GWP_{e,s}^{\text{Supp, Data}}$$

$$\in GWP^{\text{Supp, Data}} \land \nexists Edc_{e} = ImPr_{z} \land \nexists Edc_{e}$$

$$= MPr_{h} \land \nexists Edc_{e} = CrPr_{c}$$

 $GWP_{e,s}^{\text{Supp, Data}}$ beschreibt das GWP eines Edukts *e* in Werk *s*, wenn dem Modellnutzer Primärdaten des Lieferanten vorliegen (1. Fall). A_s benennt die Anzahl der Cracker im Produktionswerk *s* und *A* die Summe der Cracker über alle Produktionswerke, die im Modell implementiert sind. $GWP_{c,x,s}^{\text{CrPr}}$ steht für das GWP eines Crackerprodukts *c* aus dem Cracker *x* in Werk *s*. Der Fall 2 tritt ein, wenn im Werk *s* mindestens ein Cracker vorhanden ist, Edukt *e* ein

Crackerprodukt ist und keine Lieferantendaten zum GWP des Edukts e gegeben sind. Fall 3 unterscheidet sich gegenüber Fall 2 dadurch, dass in Fall 3 kein Cracker im Werk vorhanden ist und Edukt e daher ein Crackerprodukt eines anderen Werkes ist. In diesem Fall entspricht das GWP des Crackerprodukts dem Durchschnittswert aller modellierten Cracker. Die Berechnung des GWP^{CrPr}_{cxs} wird ausführlich in Kapitel 5.2.4.1 beschrieben. In den Fällen 4 und 5 wird das GWP_{e.p.s}^{Edc} mit 0 bewertet, wenn es sich bei dem Edukt um ein Zwischen- oder Hauptprodukt handelt, für das im Berechnungsmodell der werksspezifische Ansatz angewendet werden soll. CrPr steht für die Menge der Crackerprodukte, ImPr für die Menge der Zwischenprodukte und MPr für die Menge der Hauptprodukte, die im Modell abgebildet werden. Wenn keine Lieferantendaten verfügbar sind, und keiner der Fälle 2 bis 5 eintritt, um das Edukt spezifisch zu bestimmen, wird das GWP des Edukts e aus den Eco-profiles von PlasticsEurope entnommen ($GWP_e^{\text{Ecoprofiles}}$) (Fall 6). Sollte auch in den Eco-profiles kein GWP des Edukts verfügbar sein, wird auf die Ecoinvent Datenbank V2.2 zugegriffen ($GWP_e^{\text{Ecoinvent}}$) (Fall 7). Die Eco-profiles werden bevorzugt, da sie in der Regel aktueller sind.

Der Vektor *PE* (Formel (5.33)) enthält dann das GWP der benötigten Produktionsenergie für jedes Zwischen- oder Hauptprodukt, das in einem Werk *s* produziert wird. Dieses *GWP_PE*^{Pr}_{p,s} bestimmt sich gemäß der Fallunterscheidung in Formel (5.34). *GWP_PE*^{Pr}_{p,s} ist 0, falls es sich bei dem Produkt nicht um ein Zwischen- und Hauptprodukt handelt und somit bereits in *GWP*^{Edc}_{e,p,s} als Edukt berechnet wurde. Wird das Produkt *p* nicht in einem Werk *s* produziert, so wird für dieses Werk der Mittelwert des GWPs der Produktionsenergie aller Werke verwendet, in denen *p* produziert wird (Fall 3). *GWP*^{Energy, Prod}, in der die spezifische benötige Energie zur Produktion von *p* in Werk *s* berechnet wird, wird in Kapitel 5.2.4.2.2 detailliert beschrieben.

$$PE = \begin{pmatrix} GWP_{-}PE_{1,s}^{Pr} \\ \vdots \\ GWP_{-}PE_{p,s}^{Pr} \\ \vdots \\ GWP_{-}PE_{P,s}^{Pr} \end{pmatrix}$$
(5.33)

$$GWP_PE_{p,s}^{\Pr} , GWP_{p,s}^{\text{Edc}} \neq 0$$

$$= \begin{cases} 0, & , GWP_{e,p,s}^{\text{Edc}} \neq 0 \\ GWP_{p,s}^{\text{Energy, Prod}}, \exists GWP_{p,s}^{\text{Energy, Prod}} \in GWP^{\text{Energy, Prod}} \\ \frac{1}{|\tilde{s}|} \sum_{\tilde{s} \in \tilde{s}} GWP_{p,\tilde{s}}^{\text{Energy, Prod}}, \nexists GWP_{p,s}^{\text{Energy, Prod}} \in GWP^{\text{Energy, Prod}} \end{cases}$$
(5.34)

mit $\tilde{S} = \{s \mid p \text{ wird an } s \text{ produziert}\}$

5.2.4.2.2 Teilrechnung: Werksspezifisches GWP der benötigten

Produktionsenergie

Die gesamten THG-Emissionen (cradle-to-gate), die bei der Produktion des Produkts p in Werk s anfallen ($GWP_{p,s}^{Pr}$), berechnen sich wie oben beschrieben nach den Formeln (5.25) bzw. (5.26). $GWP_{-}PE_{p,s}^{Pr}$ in Vektor PE (Formel (5.33)) beinhaltet die energiebedingten THG-Emissionen, die im Produktionssystem (gate-to-gate) zur Erstellung des Produkts p verursacht werden und in diesem Kapitel separat betrachtet werden. Alle anderen THG-Emissionen, die in Vorstufen in Werk s oder auch in vorgelagerten Ketten außerhalb des Werkes anfallen, sind in den GWPs der Vorprodukte B_{i-1} (vgl. Formel (5.25)) oder in Vektor t_0 (vgl. Formel (5.31)) enthalten.

THG-Emissionen aus dem Produktionsprozess zur Herstellung von p in Werk s ($GWP_{p,s}^{\text{Energy, Prod}}$) berechnen sich aus dem benötigten Dampf, elektrischer

Energie und Treibstoffen gemäß Formel (5.35). Es wird nur die Produktionsenergie gewertet, die für das zu bilanzierende Produkt verwendet wird (massebasierter Ansatz, vgl. Kapitel 5.2.3.3). $m_p^{\rm Pr}$ bezeichnet die Masse des Produkts p und $m_{y,p,s}^{\rm byPr}$ die Masse eines Nebenprodukts y, das bei der Produktion von p entsteht.

$$GWP_{p,s}^{\text{Energy, Prod}} = \left(GWP_{p,s}^{\text{Steam}} + GWP_{p,s}^{\text{Elec}} + GWP_{p,s}^{\text{Fuel}}\right) \\ \cdot \left(\frac{m_p^{\text{Pr}}}{m_p^{\text{Pr}} + \sum_{y=1}^{Y} m_{y,p,s}^{\text{byPr}}}\right)$$
(5.35)

Das GWP, das durch die Erzeugung des benötigen Dampfs für Produkt p in Werk s entsteht ($GWP_{p,s}^{Steam}$), berechnet sich nach Formel (5.36):

$$GWP_{p,s}^{\text{Steam}} = \begin{cases} \left(SEC_{p,s}^{\text{Steam}} \cdot K \cdot \sum_{b=1}^{B} (g_{b,s}^{\text{Steam}} \cdot SEF_{b,s}^{\text{Steam}}) \right) \cdot \frac{1}{\eta_{s}^{\text{Steam}}} & ,1. \\ SEC_{p}^{\text{Steam, Ecoinvent}} \cdot K \cdot SEF^{\text{NG}} \cdot \frac{1}{\eta_{s}^{\text{Steam}}}, & ,2. \\ 0 & ,3. \end{cases}$$

$$1:: \exists p \in \{1, ..., P\}, h \in \{1, ..., H\}: Pr_p = MPr_h$$

$$2:: \exists p \in \{1, ..., P\}, h \in \{1, ..., H\}: Pr_p = MPr_h$$

$$3.: \exists p \in \{1, ..., P\}, h \in \{1, ..., H\}: Pr_p$$

$$= MPr_h \land \nexists SEC_p^{\text{Steam, Ecoinvent}}$$

$$\in SEC^{\text{Steam, Ecoinvent}}$$

$$\Big|\sum_{b\in B} g_{b,s}^{\text{Steam}} = 1$$

 $SEC_{n,s}^{Steam}$ beschreibt den spezifischen Energieverbrauch der Dampferzeugung zur Herstellung von Produkt *p* in Produktionswerk *s* in [GJ/t]. Der Umwandlungsfaktor (K) für GJ/t in kWh/kg beträgt 0,277778 und ist konstant. $g_{b.s}^{\text{Steam}}$ bezeichnet den Anteil eines Brennstoffs b in Werk s zur Erzeugung von Dampf in [%]. SEF^{Steam} steht für den Emissionsfaktor des Brennstoffs *b* der zur Dampferzeugung in Werk *s* eingesetzt wird in [kgCO₂e/kWh]. n_s^{Steam} bezeichnet den Wirkungsgrad der Dampferzeugung des Werkes s. Der spezifische Energieverbrauch der Dampferzeugung in [MJ/kg] zur Herstellung von p aus Ecoinvent wird $SEC_{p}^{\text{Steam, Ecoinvent}}$ gekennzeichnet. SEF^{NG} ist der Emissionsfaktor von Erdgas in [kgCO₂e/kWh], das gemäß Evoinvent in der Regel zur Dampferzeugung eingesetzt wird. In der Berechnung wird unterschieden, ob es sich um ein Hauptprodukt handelt, für das produktspezifische Daten zur Energie in der Literatur vorhanden sind (Fall 1), oder ob es sich nicht um ein definiertes Hauptprodukt handelt (Fall 2). In Fall 2 wird geprüft, ob ein entsprechender Ecoinvent-Eintrag Daten bzgl. des benötigten Dampfes ausweist. Falls auch Ecoinvent keine Informationen liefert, wird davon ausgegangen, dass kein Dampf benötigt wird (Fall 3). Diese Fallunterscheidung wird analog für das spezifische GWP der benötigten Elektrizität ($GWP_{p,s}^{Elec}$) in Formel (5.38) und des benötigten Treibstoffs ($GWP_{p,s}^{Fuel}$) in Formel (5.40) durchgeführt.

Um $SEC_{p,s}^{\text{Steam}}$ werksspezifisch zu berechnen (Formel (5.37)) wird anhand von $EFF_{p,s}^{\text{Site, Prod}}$ linear zwischen dem minimalen ($SEC_p^{\text{Steam, min}}$) und maximalen spezifischen Energieverbrauch ($SEC_p^{\text{Steam, max}}$) aus der Literatur interpoliert (z.B. BAT-Dokumente der European Commission 2003, 2017b). Die Produktionseffizienz $EFF_{p,s}^{\text{Site, Prod}}$ ist ein zu berechnender werksspezifischer Faktor (vgl. Formel (5.43)) zwischen [0;1], mit dem die Effizienz der Produktion von Produkt p in Werk s abgeschätzt wird.

$$SEC_{p,s}^{Steam} = SEC_p^{Steam, \max} + (SEC_p^{Steam, \min} - SEC_p^{Steam, \max}) + (FF_{p,s}^{Steam, \max})$$
(5.37)

Das GWP, das durch den Stromverbrauchs zur Produktion von p in Werk s ($GWP_{p,s}^{Elec}$) entsteht, berechnet sich nach Formel (5.38).

$$GWP_{p,s}^{\text{Elec}} = \begin{cases} SEC_{p,s}^{\text{Elec}} \cdot \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\omega} & ,1. \\ SEC_{p}^{\text{Elec}, \text{Ecoinvent}} \cdot \boldsymbol{\omega} & ,2. \\ 0 & ,3. \end{cases}$$

 $1:: \exists p \in \{1, ..., P\}, h \in \{1, ..., H\}: Pr_p = MPr_h$ $2:: \nexists p \in \{1, ..., P\}, h \in \{1, ..., H\}: Pr_p = MPr_h$ $3:: \nexists p \in \{1, ..., P\}, h \in \{1, ..., H\}: Pr_p$ $= MPr_h \land \nexists SEC_p^{\text{Elec, Ecoinvent}}$ $\in SEC^{\text{Elec, Ecoinvent}}$ (5.38)

mit

$$\omega = \left(\left(w_s^{\text{Elec, selfprod}} \cdot \sum_{b \in B} (g_{b,s}^{\text{Elec}} \cdot SEF_{b,s}^{\text{Elec}}) \right) \cdot \frac{1}{\eta_s^{\text{Elec}}} + (1 - w_s^{\text{Elec, selfprod}}) \cdot GWP_s^{\text{CountryElecMix}} \right)$$

 $\sum_{b \in B} g_{b,s}^{\text{Elec}} = 1$

Als $SEC_{p,s}^{\text{Elec}}$ wird der spezifische Energieverbrauch an elektrischer Energie zur Herstellung von Produkt p in Werk s in [GJ/t] bezeichnet. $SEC_p^{\text{Elec, Ecoinvent}}$ steht für den spezifischen Energieverbrauch der Stromerzeugung in [kWh/kg] zur Herstellung von p gemäß Ecoinvent. Mit ω wird ein standortspezifischer Emissionsfaktor für Strom in [kgCO₂e/kWh] berechnet. $w_s^{\text{Elec, selfprod}}$ kennzeichnet den Anteil des selbsterzeugten Stroms in Produktionswerk s in [%]. $SEF_{b,s}^{\text{Elec}}$ benennt den Emissionsfaktor des Brennstoffs b, der zur Erzeugung von Strom in Produktionswerk s eingesetzt wird. Der Wirkungsgrad des Kraftwerks in Werk s wird mit η_s^{Elec} angegeben. $GWP_s^{\text{CountryElecMix}}$ bezeichnet den Emissionsfaktor des Strommixes des Landes in dem Werk s steht in [kgCO₂e/kWh]. Wenn der erforderliche Strom nicht im werkseigenen Kraftwerk erzeugt wird, wird das GWP des durchschnittlich im Land erzeugten Stroms angenommen, da die Erzeugungsquelle unbekannt ist.

Für die standortspezifische Berechnung des $SEC_{p,s}^{Elec}$ (Formel (5.39)) wird analog zu Formel (5.37) der Faktor $EFF_{p,s}^{Site, Prod}$ verwendet, um linear zwischen dem minimalen und maximalen Verbrauch an elektrischer Energie zu interpolieren. $SEC_p^{Elec, \max}$ ist der maximale und $SEC_p^{Elec, \min}$ der minimale spezifische Verbrauch an elektrischer Energie zur Herstellung von Produkt pin [GJ/t].

$$SEC_{p,s}^{Elec} = SEC_{p}^{Elec, \max} + (SEC_{p}^{Elec, \min} - SEC_{p}^{Elec, \max})$$

$$\cdot EFF_{p,s}^{Site, Prod}$$
(5.39)

Analog zur Berechnung des GWPs von verwendetem Dampf und elektrischer Energie wurde in Formel (5.40) eine werksspezifische Berechnungslogik für das entsprechende GWP der Treibstoffnutzung $GWP_{p,s}^{Fuel}$ aufgestellt. $SEC_{p,s}^{Fuel}$ bezeichnet den spezifischen Energieverbrauch an Treibstoffen zur Herstellung von Produkt p in Werk s in [GJ/t]. $SEC_p^{Fuel, Ecoinvent}$ steht für den

spezifischen Energieverbrauch an Treibstoffen zur Herstellung von p gemäß Ecoinvent in [MJ/kg], falls kein standortspezifischer Wert verfügbar ist. SEF_s^{Fuel} beziffert in Formel (5.42) den Emissionsfaktor der Treibstoffe in [kgCO₂e/kWh], die in Werk *s* eingesetzt werden. $SEF_s^{Fuel,SuppData}$ kennzeichnet den Emissionsfaktor für Treibstoffe des Werkes s gemäß einer Lieferantendatenbank des Modellnutzers, falls diesem entsprechende Primärdaten zu Werk s zur Verfügung stehen. SEF_{x.s} bezeichnet den Emissionsfaktor [kgCO₂e/kWh] der Rohstoffe, die in Cracker x des Werkes s zur Herstellung chemischer Wertprodukte (HVC) eingesetzt werden. Die Verwendung von $SEF_{x,s}^{HVC}$ als Emissionsfaktor für die verwendeten Treibstoffe basiert auf der Annahme, dass überwiegend diejenigen Brennstoffe eingesetzt werden, die im Cracker als Rohstoffe (Feed) eingesetzt werden, wenn im Werk ein Cracker vorhanden ist. $SEF_{x,s}^{HVC}$ wird ausführlich in Formel (5.22) in Kapitel 5.2.4.1 beschrieben. A gibt die Anzahl aller Cracker an, die im Modell betrachtet werden und A_s die Anzahl der Cracker eines Werkes s. \tilde{s} dient als eine Hilfsvariable und entspricht (\triangleq) s. β hat keinen Einfluss auf das Ergebnis und ist lediglich ein erforderlicher Korrekturwert (β = 10^6) zur sinngemäßen Berechnung von A_s , falls $SEF_{x,s}^{HVC}$ sehr kleine Werte annimmt.

$$GWP_{p,s}^{\text{Fuel}} = \begin{cases} SEC_{p,s}^{\text{Fuel}} \cdot \text{K} \cdot SEF_{s}^{\text{Fuel}} & ,1. \\ SEC_{p}^{\text{Fuel}, \text{Ecoinvent}} \cdot \text{K} \cdot SEF_{s}^{\text{Fuel}} & ,2. \\ 0 & ,3. \end{cases}$$

$$1.: \exists p \in \{1, \dots P\}, h \in \{1, \dots H\}: Pr_p = MPr_h$$

$$2.: \exists p \in \{1, \dots P\}, h \in \{1, \dots H\}: Pr_p = MPr_h$$

$$3.: \exists p \in \{1, \dots P\}, h \in \{1, \dots H\}: Pr_p$$

$$= MPr_h \land \exists SEC_p^{\text{Fuel, Ecoinvent}}$$

$$\in SEC^{\text{Fuel, Ecoinvent}}$$

$$\begin{pmatrix} SEF_s^{\text{Fuel, SuppData}} & ,1 \\ 1 & \Sigma X & SEEHVC & 2 \end{pmatrix}$$

$$SEF_{S}^{\text{Fuel}} = \begin{cases} \frac{1}{A_{s}} \cdot \sum_{x=1}^{X} SEF_{x,s}^{\text{HVC}} & ,2\\ \frac{1}{A} \cdot \sum_{s=1}^{S} \sum_{x=1}^{X} SEF_{x,s}^{\text{HVC}} & ,3. \end{cases}$$

1.: $\exists SEF_{s}^{Fuel, SuppData} \in SEF^{Fuel, SuppData}$

2.:
$$A_s \ge 1 \land \nexists SEF_s^{\text{Fuel, SuppData}} \in SEF^{\text{Fuel, SuppData}}$$

3.: $A_s = 0 \land \nexists SEF_s^{\text{Fuel, SuppData}} \in SEF^{\text{Fuel, SuppData}}$
(5.41)

mit

$$A = \sum_{s=1}^{S} \sum_{x=1}^{X} \min\{1; SEF_{x,s}^{HVC}\}$$

und

$$A_s = \sum_{x=1}^{X} \min\{1; SEF_{x,s}^{HVC} \cdot \beta\} \quad \forall s \in \{1, \dots S\}$$

Wie in den Formeln (5.37) und (5.39) wird der Faktor $EFF_{p,s}^{\text{Site, Prod}}$ auch zur Berechnung des spezifischen Energieverbrauchs eines Werkes *s* zur Produktion eines Produkts *p* verwendet ($SEC_{p,s}^{\text{Fuel}}$) anhand Formel (5.42). $SEC_{p}^{\text{Fuel, max}}$ ist der maximale und $SEC_{p}^{\text{Fuel, min}}$ der minimale spezifische Energieverbrauch [GJ/t] an Treibstoffen zur Herstellung von *p*.

$$SEC_{p,s}^{\text{Fuel, max}} = SEC_p^{\text{Fuel, max}} + \left(SEC_p^{\text{Fuel, min}} - SEC_p^{\text{Fuel, max}}\right)$$
$$\cdot EFF_{p,s}^{\text{Site, Prod}}$$
(5.42)

Im Folgenden wird die Berechnungslogik der Produktionseffizienz $EFF_{p,s}^{Site, Prod}$ gemäß Formel (5.43) erläutert. Diese setzt sich aus verschiedenen Faktoren zusammen, die zum einen den Integrationsgrad und zum an-

deren den Innovationsgrad eines chemischen Werkes abschätzen. Die Faktoren werden zu einer Untergrenze (LL= Lower Limit) und einer Obergrenze (UL= Upper Limit) ins Verhältnis gesetzt und gewichtet, um auf diese Weise die werksspezifische Effizienz der Produktion eines Produkts zu bestimmen.

Faktoren zur Bestimmung des Integrationsgrades eines Werkes sind:

- 1. LF_s , der Standortfaktor des Werkes *s*. Dieser dient als Indikator dafür, wie geeignet die Lage eines Standortes ist, um zu einem geringen PCF beizutragen. Es wird davon ausgegangen, dass ein Standort zu einem niedrigen PCF beiträgt, wenn möglichst viele Vorprodukte im selben Werk oder in umliegenden Werken in der Region hergestellt werden können, sodass die Transportwege möglichst kurz sind. Daher wird bei der Bewertung des LF_s berücksichtigt, ob sich eine Raffinerie am Standort befindet und mit welchem Nelson-Index³³ diese bewertet wird. Weiter wird berücksichtigt, wie kurz die Transportwege zu anderen Chemiestandorten sind, oder mit welchen Transportmitteln (z.B. Schiff, Bahn, Lkw oder Pipeline) ein Standort versorgt werden kann. LF_s wird mit einem Wert zwischen O (schlechte Lage) und 10 (sehr gute Lage) bewertet [0;10].
- 2. FA_s , die Fläche des Werkes s [km²]. Die Begründung ist identisch mit der zum Faktor $FA_{s,x}$, der zur Berechnung der Cracker Effizienz eingesetzt wurde (vgl. Formel (5.23)).
- 3. $\frac{Output_{p,s}}{PC_{p,s}}$, die Auslastungsrate der Produktionsanlage in Abhängigkeit von der Produktionsmenge des Produkts p in Werk s [t/a] $(Output_{p,s})$ und der Produktionskapazität von Produkt p in Werk s ($PC_{p,s}$). Die Auslastungsrate einer Produktionsanlage wird berücksichtigt, da der Energieverbrauch am niedrigsten ist, wenn die

³³ Informationen zum Nelson Index siehe Kapitel 5.2.4.1.

Anlage nah an der Design-Kapazität arbeitet. Kapazitäten über und unter der Design-Kapazität erhöhen den spezifischen Energieverbrauch der Anlage. (Fleiter et al. 2013)

- 4. FL_s , die Flexibilität der Produktion in Werk s [Anzahl Produktionsbetriebe/-anlagen am Standort]. Analog zur Begründung des Faktors der Werksfläche $FA_{s,x}$ (vgl. Crackereffizienz, Formel (5.23)) wird an dieser Stelle die Anzahl der Produktionsbetriebe direkt herangezogen, um das Potenzial der Wärmeintegration abschätzen zu können.
- 5. $PC_{p,s}$, die Produktionskapazität des Produkts p in Werk s [t/a]. Die Produktionskapazität wird berücksichtigt, da ein höheres Produktionsvolumen durch Größeneffekte ein höheres Potenzial zur Energieeinsparung bietet (Fleiter et al. 2013).

Faktoren zur Bestimmung des Innovationsgrades eines Werkes sind:

- 1. $Y_{p,s}$, die Ausbeute des Produkts p in Werk s [%]. Der Einsatz innovativer Fertigungsverfahren, Lösungsmittel oder z. B. nanoskalige Katalysatoren erhöhen die Ausbeute, und es resultiert eine höhere Ausbringungsmenge bei gleichem Energieaufwand (UBA 2009).
- TE_s, die technische Ausstattung (Soft- und Hardware) des Werkes s [0;10]. Hierbei wird der Stand der Technik der eingesetzten Maschinen bewertet. Beispielsweise erhöht der Einsatz frequenzgesteuerter Pumpen die Energieeffizienz (Leimkühler 2010). In der Regel sind neue oder modernisierte Produktionsanlagen energieeffizienter als ältere Anlagen (Schönbucher 2002; BMLFUW 2010). Ein sehr hoher Stand der Technik wird mit 10 und ein sehr niedriger mit 0 bewertet [0;10].

$$EFF_{p,s}^{\text{Site, Prod}} = \left[\left(\max\left(0, \min\left(1, \frac{LF_{s} - LF_{LL}}{LF_{UL} - LF_{LL}}\right) \right) \cdot w^{\text{LF}} \right) + \left(\max\left(0, \min\left(1, \frac{FA_{s} - FA_{LL}}{FA_{UL} - FA_{LL}}\right) \right) \cdot w^{\text{FA}} \right) + \left(\frac{Output_{p,s}}{PC_{p,s}} \cdot w^{\text{UR}} \right) + \left(\max\left(0, \min\left(1, \frac{FL_{s} - FL_{LL}}{FL_{UL} - FL_{LL}}\right) \right) \cdot w^{\text{FL}} \right) + \left(\max\left(0, \min\left(1, \frac{PC_{s} - PC_{p,LL}}{PC_{p,UL} - PC_{p,LL}}\right) \right) \cdot w^{\text{PC}} \right) \right] \cdot w^{\text{INTL}} + \left[\left(Y_{p,s} \cdot w^{\text{Y}} \right) + \left(\max\left(0, \min\left(1, \frac{TE_{s} - TE_{LL}}{TE_{UL} - TE_{LL}}\right) \right) \cdot w^{\text{TE}} \right) \right] \cdot w^{\text{INNL}} \right]$$
(5.43)

5.2.5 Anwendung von Teilmodul A5 am Beispiel deutscher Propylen-Hersteller

5.2.5.1 Vorstellung der Fallstudie

Propylen ist nach Ethylen die wichtigste petrochemische Basischemikalie weltweit und wird für die Herstellung bedeutender Produkte wie Propylenoxid, Cumol, Acrylsäure und vor allem Polypropylen verwendet. (Ceresana Market Research 2014) Polypropylen hat von allen Kunststoffen, die in der Automobilindustrie verbaut werden, mit 32 % den größten Anteil (Patil et al. 2017), weshalb die Ergebnisse der Fallstudie für Propylen vor allem für die Automobilindustrie interessant sind. Zur Bewertung des werksspezifischen PCFs (cradle-to-gate) der Herstellung von Propylen wird das ECCO₂-HVC Modell gemäß Kapitel 5.2.4.1 verwendet, da Propylen hauptsächlich in Steam- und FCC-Crackern hergestellt wird (Lei und Bao 2014; Zhao et al. 2017). Die Fallstudie beinhaltet die Bewertung von 23 Crackern in 17 Chemiewerken in Deutschland (siehe Abbildung 5.23).



Abbildung 5.23: Untersuchte Cracker der Propylen-Herstellung in Deutschland

5.2.5.2 Datengrundlage und Annahmen

Für die Berechnungen des werksspezifischen GWPs ist es notwendig, das Intervall für den spezifischen Energieverbrauch (SEC) zur Erzeugung einer Tonne Propylen und den spezifischen Emissionsfaktor (SEF) der eingesetzten Rohstoffe im Modell zu hinterlegen (vgl. Tabelle 5.6) Eine gute Annäherung für den SEC kann den BAT-Dokumenten zu den "Large Volume Chemicals" gemäß European Commission (2003, 2017) entnommen werden. In den BAT-Dokumenten wird der SEC für Steamcracker in Gigajoule pro Tonne HVC [GJ/t HVC] angegeben. Propylen zählt zu HVC, die durch den Cracking-Prozess erzeugt werden (Amghizar et al. 2017). Da sowohl in den Dokumenten der BAT als auch in weiterführender Literatur keine propylenspezifischen Daten angeben sind, stellen die Angaben pro Tonne HVC die beste Annäherung für Propylen dar und werden somit verwendet. Es gibt Quellen mit scheinbar aktuelleren SEC-Daten, z.B. Enviros Consulting (2006), bei genauerer Betrachtung ist jedoch fest zu stellen, dass diese Werte ebenfalls aus European Commission (2003) hergeleitet werden.

Die BAT-Dokumente enthalten jedoch nur SEC-Werte für Ethan, Naphtha und Gasöl. Es fehlen Angaben für die Flüssiggase Butan und Propan, die bei Stream-Crackern ebenfalls als Rohstoffe verwendet werden. Gemäß Worrell et al. (2008) liegen die realen SEC-Werte von Butan und Propan zwischen den SEC-Werten von Ethan und Naphtha. Auf Basis dieser Information werden die SEC-Werte für Butan und Propan für diese Arbeit erzeugt, indem der Mittelwert aus den Mittelwerten der SEC-Werte von Ethan und Naphtha gebildet wird. Für den SEC von FCC-Crackern werden die Daten aus Ren et al. (2006, 2008) entnommen. Der SEC für katalytische Cracker wird dort je nach Technologie auf 8-12 GJ/t HVC beziffert. Typische Rohstoffe sind Ethan, Naphtha und vor allem Gasöl. (Ren et al. 2006, 2008) Die Daten für die spezifischen Emissionsfaktoren (SEF) der Einsatzstoffe beim Cracker stammen aus einer Studie von Enviros Consulting (2006). Ähnliche Emissionsfaktoren konnten auch in Neelis et al. (2005) gefunden werden, die ebenfalls spezifische Emissionsfaktoren für naphtha- und ethanbasierte Steamcracker berechneten.³⁴

³⁴ Enviros Consulting (2006) geben die Emissionsfaktoren allerdings in der Einheit [kgCO₂e/kWh] und Neelis et al. (2005) in [kgCO₂e/GJ] an. Für Ethan berechnen Neelis et al. (2005) beispielsweise einen spezifischen Emissionsfaktor von 0,047 [kgCO₂e/GJ], das entspricht ca. 0,169 [kgCO₂e/kWh].

Tabelle 5.6:Spezifische Emissionsfaktoren und spezifischer Energieverbrauch des Cracker
Feeds für SC- und FCC-Cracker (European Commission 2003, 2017b; Ren et al.
2006, 2008; Enviros Consulting 2006; Neelis et al. 2005)

	Ethan		Propan		Butan		Naphtha		Gasöl		Erdgas	
	min	max	min	max	min	max	min	max	min	max	min	max
SEF	0 115	0 192	0 1 3 3	0 200	0 147	0 220	0 153	0 245	0 158	0 198	0 171	0 209
[kgCO ₂ e/kWh]	0,115	0,152	0,133	0,200	0,147	0,220	0,133	0,243	0,100	0,150	0,171	0,205
SEC SC	12 50	21 00	12 25	21 50	12 25	21 50	14 00	22.00	10 00	22 00	12 50	21 00
[GJ/t HVC]	12,50	21,00	13,23	21,50	13,25	21,30	14,00	22,00	10,00	23,00	12,50	21,00
SEC FCC	0.00	12.00					0.00	12.00	0.00	12.00		
[GJ/t HVC]	8,00	12,00	-	-	-	-	8,00	12,00	8,00	12,00	-	-
-: Keine Angaben in der Literatur vorhanden												

Wie in Kapitel 5.2.4.1 beschrieben, ergibt sich der SEC eines Crackers aus der Rohstoffmischung (verwendete Daten vgl. Kapitel 5.2.5.2.1) und der Crackereffizienz (Daten vgl. Kapitel 5.2.5.2.2), die anhand unterschiedlicher Kriterien abgeschätzt wird.

Der Rohstoffumsetzungsgrad CR_x (Input/Output) wird für alle Cracker auf 1=(100 %) gesetzt, da nahezu keine Emissionen beim Cracken frei werden (vgl. Kapitel 5.2.3.1 und EEA (2017), BASF (2019)). Nichtverwertbare Stoffe wie Methan, Propan und Butan werden als Rohstoffe wieder neu zugeführt oder als Heizgase verwendet werden (BASF 2019).

5.2.5.2.1 Daten zur Rohstoffmischung des Feedstocks

Angaben zur Rohstoffmischung einiger betrachteter Cracker sind in den Ethylene Reports des Oil & Gas Journals zu finden. Für 2015 sind diese in Tabelle 5.7 aufgelistet (Koottungal 2015). Fehlende Werte für Steamcracker werden mit Durchschnittswerten für europäische Steamcracker nach PlasticsEurope aufgefüllt (PlasticsEurope 2012a). Dabei wird der Wert von 12 % für Flüssiggas (LPG-Liquefied Petroleum Gas) zu jeweils 6 % auf Propan und Butan aufgeteilt (vgl. bspw. Cracker 4, in Tabelle 5.7). Bei fehlenden Werten für FCC-Cracker wird der Einsatz von Gasöl als Rohstoff angenommen, da Gasöl in der Regel der Hauptrohstoff für FCC-Cracker ist (Vogt und Weckhuysen 2015).

Cra-	Cracking	Feedstock							
cker	Verfahren	Ethan	Propan	Butan	Naphtha	Gasöl			
1	SC	0,0 %	5,0 %	5,0 %	90,0 %	0,0 %			
2	SC	0,0 %	0,0 %	0,0 %	100,0 %	0,0 %			
3	FCC	0,0 %	0,0 %	0,0 %	0,0 %	100,0 %			
4	SC	4,0 %	6,0 %	6,0 %	74,0 %	10,0 %			
5	FCC	0,0 %	0,0 %	0,0 %	0,0 %	100,0 %			
6	FCC	0,0 %	0,0 %	0,0 %	0,0 %	100,0 %			
7	SC	0,0 %	2,0 %	12,0 %	73,0 %	13,0 %			
8	SC	1,0 %	1,0 %	11,0 %	64,0 %	23,0 %			
9	SC	0,0 %	0,0 %	0,0 %	100,0 %	0,0 %			
10	FCC	0,0 %	0,0 %	0,0 %	0,0 %	100,0 %			
11	SC	0,0 %	0,0 %	0,0 %	0,0 %	100,0 %			
12	FCC	0,0 %	0,0 %	0,0 %	0,0 %	100,0 %			
13	SC	0,0 %	0,0 %	0,0 %	100,0 %	0,0 %			
14	SC	0,0 %	0,0 % 0,0 % 0,0 % 100		100,0 %	0,0 %			
15	SC	SC 13,0 % 17,0 % 17,0 % 53,0 % 0,0 %							
16	SC	SC 0,0 % 0,0 % 0,0 % 0,0 % 100,0							
17	SC	0,0 %	0,0 %	10,0 %	90,0 %	0,0 %			
18	FCC	0,0 %	0,0 %	0,0 %	0,0 %	100,0 %			
19	SC	2,5 %	6,0 %	6,0 %	84,0 %	1,5 %			
20	SC	2,5 %	6,0 %	6,0 %	84,0 %	1,5 %			
21	FCC	0,0 %	0,0 %	0,0 %	0,0 %	100,0 %			
22	SC	4,0 %	6,0 %	6,0 %	74,0 %	10,0 %			
23	FCC 0,0 % 0,0 % 0,0 % 0,0 % 100,0 %								
SC	Keine standortspezifischen Daten verfügbar: Durchschnittlicher Feedstock europäi-								
FCC	Keine standortspezifischen Daten verfügbar: Annahme von 100 % Gasöl								

Tabelle 5.7:Rohstoffmischung des Feedstocks der Cracker dieser Fallstudie (Koottungal
2015)

Die in ECCO₂-HVC verwendeten Daten zu den GWPs der Feedstocks (cradleto-gate) werden in Tabelle 5.8 aufgelistet.³⁵ Da die Ecoinvent-Datenbank kein GWP für Ethan enthält, wird für Ethan der Wert von Propan und Butan angenommen. Auch für Gasöl liegt kein Wert vor, deshalb wird näherungsweise der Durchschnitt der Mitteldestillate Diesel und leichtem Heizöl aus Ecoinvent V2.2 (2007-2013) verwendet.

	Naphtha	Erdgas	Ethan	Propan	Butan	Gasöl
GWP [kgCO2e/kg]	0,34	0,52	0,60501	0,60501	0,60501	0,48539
Quelle	(Plas- ticsEurope 2005a)	(Plas- ticsEurope 2005b)	Vgl. Ecoinvent v. 2.2 (Propan und Butan)	Ecoin- vent v.2.2	Ecoin- vent v.2.2	Vgl. Ecoinvent v.2.2 (Diesel und leichtes Heizöl)

Tabelle 5.8: GWP der Feedstocks (cradle-to-gate)

5.2.5.2.2 Daten zur Berechnung der Crackereffizienz

Die Faktoren zur Bestimmung der Crackereffizienz sind werksspezifisch in Tabelle 5.9 beziffert. Nicht alle Hersteller stellen Informationen zu ihren Crackern oder Standorten in gleichem Maße öffentlich zur Verfügung. Um entsprechende Datenlücken zu schließen, wurden Expertengespräche mit drei deutschen Chemiekonzernen geführt, in denen u.a. werksspezifische Propylen-Kapazitäten in Erfahrung gebracht werden. Wenn eine Datenlücke auch im Rahmen der Expertengespräche nicht gefüllt werden konnte, wurden Durchschnittswerte verwendet (dunkelgrau markiert in Tabelle 5.9). Für die durchschnittliche Werkskapazität wurde der Durchschnitt über die betrachteten Werke gebildet, zu denen Daten vorhanden waren. Für den durchschnittlichen Nelson-Index wurde der europäische Durchschnittswert von

³⁵ Gemäß der Berechnungslogik aus Kapitel 5.2.4.1 wird das GWP für Produkte außerhalb der Systemgrenze aus den Eco-profiles bezogen. Falls es dort nicht verfügbar ist, wird der Wert aus Ecoinvent verwendet.

6,5 gewählt (Raffinerie Heide GmbH 2012). Der Durchschnittswert für das Baujahr der Cracker stammt aus dem BAT-Dokument (European Commission 2003). Die durchschnittliche Auslastung der Cracker entspricht dem deutschen Durchschnittswert für das Jahr 2015 (VCI 2018). Tabelle 5.9:Datenbasis zur Berechnung der Crackereffizienz (BASF 2016, 2017d; BAY-
ERNOIL 2016; Rosneft 2016; BAYERNOIL 2014; bp Deutschland 2018c; bp 2008;
bp Deutschland 2018a; bp 2008; bp Deutschland 2018b; DOW 2015; Chemie
Technik 2016; Gunvor Raffinerie Ingolstadt 2018, 2016, 2017; Raffinerie Heide
GmbH 2016, 2012; Holborn Refinery 2018; PKN ORLEN Capital Group 2016;
CHEMPARK 2017; INEOS Köln GmbH 2007; Evonik Industries AG 2018; Lynon-
dellbasell 2017; MiRO Mineraloelraffinerie Oberrhein 2018; OMV Deutschland
GmbH 2016; Burghausen 2018; PCK 2018; Industriepark Schwedt 2018; Shell
Rheinland Raffinerie 2018; Total Raffinierie Mitteldeutschland 2018; Hustede
2018)

Cracker	Propylen- Kapazität [t/a]	Werks- kapazität [kt]	Werks- fläche [km²]	Nelson- Index	Baujahr Cracker	Auslastung Cracker		
1	125.000	7.113.116	10,00	14,0	1965	85,66 %		
2	220.000	7.113.116	10,00	14,0	1980	85,66 %		
3	30.000	10.533.000	4,27	6,8	1981	85,66 %		
4	30.000	10.533.000	4,27	6,8	1981	85,66 %		
5	70.000	10.533.000	4,27	6,8	1976	85,66 %		
6	75.000	11.840.000	1,60	8,4	1991	85,66 %		
7	335.000	11.840.000	2,50	8,4	1976	85,66 %		
8	310.000	11.840.000	2,50	8,4	1976	85,66 %		
9	310.000	2.800.000	3,20	6,5	1976	85,66 %		
10	55.000	4.174.000	1,28	7,5	1970	85,66 %		
11	60.000	4.500.000	1,34	9,6	1976	85,66 %		
12	40.000	4.500.000	3,75	6,1	1976	85,66 %		
13	325.000	7.113.116	3,60	13,0	1963	85,66 %		
14	335.000	7.113.116	3,60	13,0	1963	85,66 %		
15	190.000	7.113.116	1,25	6,5	1976	85,66 %		
16	150.000	7.113.116	2,70	6,5	1976	85,66 %		
17	395.000	7.113.116	2,70	6,5	1976	85,66 %		
18	320.000	11.160.000	4,58	9,4	1984	85,66 %		
19	210.000	4.433.041	0,82	7,3	1967	85,66 %		
20	260.000	4.433.041	0,82	7,3	1976	85,66 %		
21	250.000	10.078.000	2,20	9,8	1976	85,66 %		
22	195.000	7.113.116	4,40	6,5	1976	85,66 %		
23	140.000	7.113.116	3,20	7,1	1997	85,66 %		
Daten aus Expertengesprächen								
Durchsch	nittswerte							

Die Unter- und Obergrenzen der Faktoren zur Bestimmung der Crackereffizienz sowie deren Gewichtungen (vgl. Kapitel 5.2.4.1) wurden auf Basis der Literatur und in Absprache mit den Experten festgelegt (vgl. Tabelle 5.10). Aufgrund der divergierenden Meinungen in der Literatur geht das Baujahr eines Crackers nur schwach in die Berechnung ein (10 %) (siehe Kapitel 5.2.4.1). Ebenso gering wird der Anteil der Propylen-Kapazität bewertet. Die Werksfläche und die Werkskapazität werden zu jeweils 15 % gewichtet. Der Nelson Index wird stärker gewichtet (25 %), da dieser eine fundierte und anerkannte Kennzahl zur Bewertung der Komplexität und Innovation eines Standorts darstellt. Ebenso stark (25 %) wird die Auslastung des Crackers berücksichtigt, da der Energieverbrauch direkt mit der Auslastung korreliert. (vgl. Kapitel 5.2.4.1).

Tabelle 5.10:Gewichtungen und Unter- und Obergrenzen zur Berechnung der
Crackereffizienz (BAYERNOIL 2016; BASF 2017c; European Commission 2003,
2017b; Reliance Industries Ltd. 2009; Ren et al. 2006; Enviros Consulting 2006)

	Propylen-	Werks-	Werks-	Nelson-	Baujahr	Auslastung
	Kapazität [t/a]	fläche [km []]	kapazität [kt/a]	Index	Cracker	Cracker
Gewichtung	10 %	15 %	15 %	25 %	10 %	25 %
Untergrenze	30.000	0,82	2.800.000	1	1955	
Obergrenze	395.000	10,00	11.840.000	14	2003]

Die Unter- und Obergrenzen für die Propylen-Kapazität, die Werksfläche und die Werkskapazität richten sich nach den minimalen und maximalen Werten europäischer Propylen-Hersteller. Für diese Fallstudie und auch für die Fallstudie zu TDI in Kapitel 5.2.6 werden europäische Hersteller als Referenz verwendet, da sich auch die BAT-Dokumente (European Commission 2017b, 2003) auf alle europäischen Hersteller beziehen. Als Untergrenze für den Nelson-Index wird der minimale Wert von 1 gewählt. Die Obergrenze wird auf 14 gesetzt, da die innovativsten und komplexesten Anlagen der Welt derzeit in dieser Höhe bewertet werden (Reliance Industries Ltd. 2009). Als Untergrenze für das Baujahr der Cracker wurde 1955 gewählt, unter der Annahme, dass ältere Cracker inzwischen mindestens so effizient sind wie diese. Als Obergrenze wurde das Jahr 2003 gewählt, dies entspricht dem Jahr mit den aktuellsten Daten zum Energieverbrauch der Cracker (European Commission 2003; Ren et al. 2006; Enviros Consulting 2006).

5.2.5.3 Validierung und Ergebnisdiskussion

Die Logik des Berechnungsansatzes wurde mit drei deutschen Chemiekonzernen validiert. Dazu wurde das Konzept und die Umsetzung des ECCO₂-HVC Modells über einen Zeitraum von zwei Jahren schrittweise in mehreren Fachgesprächen mit Herstellern und Industriepartnern analysiert und das Modell sukzessive verbessert und präzisiert. Dem strengen Betriebsgeheimnis geschuldet, durfte keiner der Chemiehersteller seine eigenen intern berechneten THG-Emissionen pro kg Propylen preisgeben, sodass ein direkter Vergleich der Ergebnisse nicht möglich war. Durch den stetigen Input der Hersteller und das strikte Vorgehen nah an den besten verfügbaren Techniken ist jedoch gewährleistet, dass das Modell möglichst realitätsgetreu formuliert wurde. Im Folgenden werden die berechneten Ergebnisse präsentiert und anhand existierender Werte in der Literatur validiert.

Die Ergebnisse in Abbildung 5.24 zeigen für die 23 untersuchten Cracker, dass Propylen in Deutschland je nach Cracker mit einem PCF bis zum Werksausgangstor (cradle-to-gate(out)) zwischen 0,95 (Cracker 18) und 1,51 (Cracker 11) kgCO₂e/kg Propylen hergestellt wird. Unternehmen, die Propylen in Deutschland einkaufen, können die THG-Emissionen in ihrer Propylen-Lieferkette schon durch die Auswahl des zuliefernden Werkes um bis zu 37,1 % reduzieren, wenn sie Propylen zukünftig vom Produzenten bzw. Werk mit dem geringsten PCF beschaffen. Ein Vergleich mit Zhao et al. (2017) und Kanchanapiya et al. (2015) zeigt, dass das Potenzial zur Reduktion von THG-Emissionen in globalen Propylen-Lieferketten sogar noch größer ist. Zhao et al. (2017) berechneten für einen chinesischen Steamcracker einen PCF (cradle-to-gate(out)) von ca. 2,00 kgCO₂e/kg Propylen. In diesem Fall wäre eine
Reduktion des PCF um bis zu 52,5 % möglich (0,95 vs. 2,00 kgCO₂e/kg Propylen). Kanchanapiya et al. (2015) untersuchten die THG-Emissionen thailändischer Cracker gate(in)-to-gate(out) und ermittelten durchschnittliche THG-Emissionen in Höhe von 1,33 kgCO₂e/kg Propylen. Ein Vergleich mit den in dieser Arbeit ermittelten gate-to-gate THG-Emissionen (System: "Propylen Produktion") zeigt, dass ein Reduktionspotenzial von 65,5 % besteht (0,46 vs. 1,33 kgCO₂e/kg Propylen).

Vergleicht man die betrachteten deutschen Cracker nur hinsichtlich des gate-to-gate Systems "Propylen Produktion", kann die unterschiedliche CO₂e-Effizienz der Cracker noch besser herausgestellt werden. Cracker 18 weist mit 0,46 kgCO₂e/kg Propylen die niedrigsten und die Cracker 11 und 19 weisen mit 1,03 kgCO₂e/kg Propylen die höchsten werksinternen Emissionen auf. Im Cracking-Prozess zur Herstellung von Propylen ist in deutschen Werken also eine THG-Emissionsminderung um bis zu 55,4 % möglich.

Die unterschiedlichen CO₂e-Emissionen in der Vorkette (0,34 - 0,49 kgCO₂e/kg Propylen) hängen vom Feedstock des Crackers ab. Tabelle 5.8 deutet bereits darauf hin, dass in der Vorkette eines Crackers vergleichsweise wenig emittiert wird, wenn der Cracker hauptsächlich den Rohstoff Naphtha verarbeitet, da das GWP aus der Herstellung von Naphtha geringer ist als das der anderen Cracker-Rohstoffe (wie z.B. Erdgas, Propan oder Butan, vgl. Tabelle 5.8).



Abbildung 5.24: Crackerspezifische CO₂e-Emissionen der Propylen-Herstellung der 23 untersuchten Cracker in Deutschland

Der Mittelwert der crackerspezifischen THG-Emissionen der Propylen-Herstellung über alle modellierten deutschen Cracker beträgt 1,20 kgCO₂e/kg Propylen. Der Mittelwert in den Eco-profiles beziffert sich auf 1,44 kgCO₂e/kg Propylen (cradle-to-gate(out)) (PlasticsEurope 2012a). Der Wert aus Ecoinvent V.2.2 bezieht sich auf die Eco-profiles und beläuft sich deshalb ebenfalls auf 1,44 kgCO₂e/kg Propylen. Der Wert aus den Eco-profiles basiert allerdings auf 50 europäischen Steamcrackern, deren Daten 2007 erhoben wurden.

Zur besseren Vergleichbarkeit und Validierung der Ergebnisse wird deshalb auch der Mittelwert spezifisch für die in dieser Arbeit modellierten Steamund FCC-Cracker gebildet. Für die FCC-Cracker ergibt sich ein Durchschnitt von 0,99 kgCO₂e/kg Propylen und für die Steamcracker 1,31 kgCO₂e/kg Propylen. Propylen aus FCC-Crackern hat in Deutschland also einen geringeren PCF als aus Steamcrackern. Innerhalb der FCC-Cracker besteht ein Verbesserungspotenzial von 8,7 % (0,95 = BiC³⁶; 1,04 =WiC³⁷) und innerhalb der Steamcracker ein größeres Verbesserungspotenzial von 27,3 % (1,09=BiC; 1,5=WiC).

Die Abweichung von 0,13 kgCO₂e/kg Propylen (9 %) zwischen dem Mittelwert der Steamcracker aus den Eco-profiles (1,44 kgCO₂e/kg Propylen) und den Steamcrackern aus der eigenen Studie (1,31 kgCO₂e/kg Propylen) kann damit erklärt werden, dass die in dieser Studie verwendeten Daten für den Energieverbrauch und für die Rohstoffmischung des Feedstocks teilweise aktueller sind (z.B. (European Commission 2017b; Koottungal 2015) als die verwendeten Daten in den Eco-Profiles aus dem Jahr 2007. Zudem bezieht sich die vorliegende Studie nur auf deutsche Cracker. Die Ergebnisse könnten folglich zu der Hypothese führen, dass deutsche Cracker tendenziell treibhausgaseffizienter sind als im europäischen Durchschnitt.

³⁶ Best-in-Class.

³⁷ Worst-in-Class.

In Deutschland wurden im Jahr 2017 4.243 [kt] (VCI 2019) und in Europa 14.432 [kt] (CEFIC 2019) Propylen erzeugt. Unter Verwendung des im Modell berechneten Durchschnittswerts (1,20 kgCO₂e/kg Propylen) und des europäischen Durchschnitts nach PlasticsEurope (1,44 kgCO₂e/kg Propylen) wurden durch die Propylen-Herstellung in Deutschland im Jahr 2017 ca. 5,1 Mio. Tonnen bzw. in Europa 20,8 Mio. Tonnen CO₂e emittiert. Wären alle Cracker so treibhausgasemissionsarm bzw. energieeffizient wie Cracker 18, könnten in Deutschland jährlich allein in der Propylen-Herstellung ca. 1,1 Mio. Tonnen und in Europa 7,1 Mio. Tonnen CO₂e eingespart werden. Weltweit ist das Treibhausgaseinsparpotenzial noch viel höher, wenn man bedenkt, dass derzeit etwa nur 12 % (14 [kt]) der weltweiten Propylenproduktionskapzität in Europa angesiedelt sind (weltweite Produktionskapazität: 120 [kt]) (GlobalData 2019).



Abbildung 5.25: Sensitivitätsanalyse zum Carbon Footprint von Propylen für den BiC (18)und WiC-Cracker (11) bei einer Verbesserung ausgewählter Inputvariablen um 10 %

Die wichtigsten Ansatzpunkte zur Umsetzung von Minderungspotenzialen werden im Folgenden anhand einer Sensitivitätsanalyse aufgezeigt. Dazu

wurden die wichtigsten Inputparameter des werksspezifischen Ansatzes für HVC (vgl. Kapitel 5.2.4.1) untersucht, indem jeder dieser Werte einzeln c.p. um 10 % verbessert wurde (Referenzwerte siehe Tabelle 5.6, Tabelle 5.8, Tabelle 5.9 und Tabelle 5.10). Infolgedessen wurden der SEC-Wert und die THG-Emissionen der Vorkette um jeweils 10 % reduziert, während die Auslastungsrate des Crackers, der Nelson Index, die Werksfläche, die Werkskapazität und die Propylenkapazität um 10 % erhöht wurden. Für das Alter des Crackers wurde angenommen, dass dieser erst fünf Jahre später erbaut worden wäre (entspricht 10 %).

Angewendet wurde die Sensitivitätsanalyse anhand des BiC-Crackers (18) und WiC-crackers (11), um sowohl für den besten als auch den schlechtesten Cracker THG-Minderungspotenziale aufzeigen zu können. Die Ergebnisse zeigen, dass Maßnahmen zur Energieeinsparung (Verringerung des SEC) den größten Einfluss auf den PCF von Propylen haben: eine 10 % Energiereduktion führt bei Cracker 18 zu einer 4,86 %igen Reduktion des PCFs; bei Cracker 11 kann das GWP um 6,80 % reduziert werden. Zweitens hat die Reduzierung der THG-Emissionen in der Vorkette die zweitgrößte Auswirkung, da eine 10 %ige Reduktion dieser vorgelagerten TGH-Emissionen, eine 5,17 % Reduktion des PCFs bei Cracker 18 bzw. 3,17 % bei Cracker 11 bewirkt. Der Einfluss aller anderen Parameter ist deutlich geringer (<<1 %). Der drittgrößte Einfluss wäre eine Erhöhung der Auslastungsrate um 10 %, die zu einer Reduzierung des PCF um 0,74 % (Cracker 18) und um 0,66 % (Cracker 11) führen würde. Generell könnte eine Kumulierung der Verbesserungen der einzeln analysierten Inputvariablen zu höheren PCF-Reduktionen führen.

Eine Schwäche des Modells und damit auch der Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse ist die Abhängigkeit von den Gewichtungen einiger der Eingabeparameter, die mit Experten definiert wurden (vgl. Tabelle 5.10). Eine Fehleinschätzung oder eine andere Gewichtung der Experten könnte zu anderen Ergebnissen und Schlussfolgerungen führen. In weiteren Forschungsarbeiten wäre eine große Umfrage unter Experten denkbar, um die derzeit verwendeten Gewichtungen zu spezifizieren.

5.2.6 Anwendung von Teilmodul A6 am Beispiel deutscher Toluoldiisocyanat (TDI) Hersteller

5.2.6.1 Vorstellung der Fallstudie

Für die Anwendung des Modells ECCO₂-Basic Chemicals wird als Fallbeispiel die Basischemikalie TDI ausgewählt. TDI ist ein wichtiger Grundstoff zur Herstellung des Kunststoffs Polyurethan (PUR)³⁸ (Kaiser 2015), der unter den verwendeten Kunststoffen in der Automobilindustrie mit 17 % den zweitgrößten Anteil hat (Patil et al. 2017). Zudem wird PUR vor allem zur Herstellung von Konsumgütern wie Matratzen und gepolsterten Möbeln sowie zur akustischen Dämmung, für Teppichunterbezüge, Haushaltsschwämme, Kleidung und Verpackungen verwendet (Kaiser 2015). Die Bewertung des werksspezifischen PCFs (cradle-to-gate) der Herstellung von TDI erfolgt für vier Chemiewerke in Deutschland (siehe Abbildung 5.23).

³⁸ Polyurethan wird hergestellt, indem Diisocynanate wie TDI mit Polyolen gemischt werden. Neben TDI wird auch MDI verwendet (Ceresana Market Research 2014).



Abbildung 5.26: Untersuchte Produktionsstandorte der TDI-Herstellung in Deutschland³⁹

5.2.6.2 Datengrundlage und Annahmen

5.2.6.2.1 Daten zum Produktionsprozess und Rezepturen

Ein allgemeines Produktionsschema zur Herstellung von TDI wird in Abbildung 5.27 veranschaulicht. Die jeweiligen Produktionsprozesse innerhalb eines TDI-Produktionssystems sind abhängig von den Rezepturen der Hersteller, die anhand von Patenten ggf. entsprechend detaillierter nachmodelliert werden können (vgl. Patente nach Büttner et al. (2005) und Lorenz et al. (2006)). In Abbildung 5.28 wird exemplarisch der Herstellungsprozess von Dinitrotoluol (DNT) detaillierter betrachtet.

³⁹ In Werk 3 wurde 2018 die Produktion von TDI auf MDI umgestellt.



Abbildung 5.27: Toluoldiisocyanat (TDI)-Produktionsschema (vereinfachte Darstellung in Anlehnung an PlasticsEurope (2012b))

Für die Modellierung der Herstellung von DNT wird im Modell angenommen, dass an den vier deutschen Herstellungsorten die gleichen Rezepturen verwendet werden. Die Annahme gründet sich auf den Vergleich aktueller Patente zur Herstellung von DNT, denn es werden die gleichen Ausgangsstoffe bei ähnlichen Mischungsverhältnissen eingesetzt (vgl. z.B. die Patente (Büttner et al. 2005; Lorenz et al. 2006). Unterschiede in den Mischungsverhältnissen würden für die Berechnung ohnehin ohne Konsequenz bleiben, da angesichts der hochintegrierten chemischen Standorte in Deutschland die Annahme getroffen wurde (siehe Kapitel 5.2.3.3), dass sämtliche Überschüsse ohne Verluste weiterverwendet werden können.



Abbildung 5.28: Herstellung von Dinitrotoluol (DNT) (in Anlehnung an ein erfindungsgemäßes Beispiel aus dem Patent nach Lorenz et al. (2006))

Auf Basis des Produktionsschemas (Abbildung 5.27) und der Rezepturen der einzelnen Produktionsprozesse (z.B. DNT in Abbildung 5.28) können die entsprechenden Reaktionsgleichungen und Massenbilanzen aufgestellt werden, um die Input-Output Matrix \overline{A} zu erstellen. Die resultierende Matrix \overline{A} [Massenanteile der Edukte zur Herstellung eines Produkts] des Fallbeispiels wird in Abbildung 5.29 dargestellt.

		Schwe- fel- säure	Salpeter -säure	Toluol	DNT	Wasser- stoff	TDA	Natrium -chlorid	Chlor	Kohlen- mono- xid	Phosgen	TDI
		C										2
Schwefelsäure		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Salpetersäure		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Toluol		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DNT		0,39	0,36	0,25	0	0	0	0	0	0	0	0
Wasserstoff		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
TDA	$\overline{A} =$	0	0	0	0,967	0,033	0	0	0	0	0	0
Natriumchlorid		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Chlor		0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
Kohlenmonoxid		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Phosgen		0	0	0	0	0	0	0	0,71	0,29	0	0
TDI		0	0	0	0	0	0,678	0	0	0	0,322	0

Abbildung 5.29: Massenanteile von Edukten an den Produkten entlang des Produktionsprozesses von Toluoldiisocyanat (TDI) [kg/kg]

DNT wird mit Wasserstoff zu TDA weiterverarbeitet (vgl. Abbildung 5.27). Anhand der entsprechenden Reaktionsgleichung (Abbildung 5.30) können die Anteile des DNT und des Wasserstoffs zur Herstellung von TDA gemäß der Formel (5.27) in Kapitel 5.2.4.2.1 berechnet werden. Laut Reaktionsgleichung werden von DNT (DNT = 182,14 u Molmasse) vier Sauerstoffatome (O₄) abgespaltet (O = 16 u Molmasse) und vier Wasserstoffatome (H₄) zusätzlich aufgenommen (H = 1 u Molmasse). Die abgespalteten Sauerstoffatome reagieren zudem mit Wasserstoff zu Wasser. Unter der Annahme integrierter Standorte und der vollständigen Weiterverwendung von Nebenprodukten, werden die Masseanteile von Edukten, die zu Nebenprodukten werden, nicht berücksichtigt. Daher wird die Masse der Sauerstoffatome von DNT abgezogen (vgl. Abbildung 5.31: 182,14 u – 4·16 u). Für den Wasserstoff werden nur die vier Wasserstoffatome berücksichtigt (vgl. Abbildung 5.31: 12 u – 8 u=4 u), die mit DNT zu TDA reagieren, da der übrige Wasserstoff mit Sauerstoff zum Nebenprodukt Wasser reagiert. Die übrigen Werte der Matrix \bar{A} berechnen sich analog in Abhängigkeit von der jeweiligen Reaktionsgleichung.

DNT		Wasserstoff		TDA		Wasser
$C_7H_6N_2O_4$	+	$6H_2$	→	$C_7H_{10}N_2$	+	$4H_2O$
182,14u		12u		122,7u		72u

Abbildung 5.30: Reaktionsgleichung und Massenbilanz der Herstellung von Diaminotoluol (TDA)

$$\frac{182,14u - 64u}{122,17u} = 0,967 \text{ (siehe Matrix } \overline{\text{A}} \text{ Spalte 4, Zeile 6)}$$
$$\frac{12u - 8u}{122,17u} = 0,033 \text{ (siehe Matrix } \overline{\text{A}} \text{ Spalte 5, Zeile 6)}$$

Abbildung 5.31: Exemplarische Berechnung der Eingangswerte für Matrix A auf Basis der Reaktionsgleichung DNT zu TDA

Auf Basis der GWPs der Edukte und der Systemgrenzen ergibt sich Vektor t_0 , der hier exemplarisch für Werk 4^{40} dargestellt ist (vgl. Abbildung 5.32).⁴¹

⁴⁰ Werk 4 stellt eins der vier modellierten TDI Werke dar (vgl. Abbildung 5.26) und dient für die Berechnungen als Beispiel.

⁴¹ Der Wert für Wasserstoff (4,2 kgCO2e/kg) entspricht der Wasserstoffherstellung im Reformer. Gemäß der durchgeführten Expertengespräche ist die Dampfreformierung die wirtschaftlichste und am weitesten verbreitete Methode in Deutschland.

Edukt	[kgCO ₂ e/kg] Quelle		Vektor		
Schwefelsäure	0,12395	Ecoinvent V2.2		0,12395	
Salpetersäure	3,1742	Ecoinvent V2.2		3,1742	
Toluol	0,87	Supp.Database]	0,87	
DNT	0	Zu berechnen		0	
Wasserstoff	4,2	Eco-profiles		4,2	
TDA	0	Zu berechnen	t ₀ =	0	
Natriumchlorid	0,06	Eco-profiles		0,06	
Chlor	0	Zu berechnen		0	
Kohlenstoffmonoxid	1,5541	Eco-profiles		1,5541	
Phosgen	0	Zu berechnen		0	
TDI	0	Zu berechnen		lo J	

Abbildung 5.32: Vektor to exemplarisch für Werk 4

Der Vektor der Produktionsenergie (PE) berechnet sich gemäß Kapitel 5.2.4.2.2. Das Ergebnis wird wieder exemplarisch für Werk 4 in Abbildung 5.33 dargestellt.

Edukt	Vektor Pl	E[kgCO2e/kg]
	_	
Schwefelsäure		
Salpetersäure		0
Toluol		0
DNT		0
Wasserstoff		0
TDA	PE =	0
Natriumchlorid		0
Chlor		0,7369
Kohlenstoffmonoxid		0
Phosgen		0,3019
TDI]	1,9471

Abbildung 5.33: Vektor PE exemplarisch für Werk 4

5.2.6.2.2 Daten zur Berechnung der Produktionseffizienz

Die Daten zur Berechnung der Produktionseffizienz ($EFF_{p,s}^{\text{Site, Prod}}$) nach Formel (5.43) sind für TDI in Tabelle 5.11 aufgelistet. Die Daten zur Kapazität, Produktionsmenge, Werksfläche, Anzahl der Produktionsanlagen am Standort und der Anteil des selbsterzeugten Stroms konnten öffentlich verfügbaren Quellen entnommen werden. Für die Werksfläche wird die Größe des gesamten Chemieparks herangezogen, auf dem das Werk lokalisiert ist, da ansässige Betriebe (herstellerunabhängig) untereinander integriert sind, um gemeinsam die Vorteile der Logistik und Wärmeintegration zu nutzen (ChemCoastPark Brunsbüttel 2018b; CHEMCologne 2018). Der jeweilige Standortfaktor eines Werkes wurde im Rahmen der Expertengespräche mit drei Chemiekonzernen vorgeschlagen, diskutiert und festgelegt. Der Wirkungsgrad der Stromherstellung ergibt sich aus Daten der Bundesnetzagentur Deutschland (2018) sowie eigenen Annahmen in der Kraftwerksdatenbank des Instituts für Industriebetriebslehre und industrielle Produktion am KIT (IIP-Kraftwerksdatenbank, unveröffentlicht). Für den Wirkungsgrad der Dampfeffizienz konnten keine werksspezifischen Informationen gefunden werden, sodass ein Durchschnittswert (85 %) nach Ren et al. (2006) angenommen wurde.

Tabelle 5.11:Datenbasis zur Berechnung der werksspezifischen Produktionseffizienz von TDI
(BASF 2015; SWR 2018; BASF 2017c; Bundesnetzagentur Deutschland 2018;
Ren et al. 2006; UBA 2016; BASF 2017a; Wirtschaftsregion Lausitz GmbH 2018;
BASF 2017e; Covestro Deutschland AG 2018b; ChemCoastPark Brunsbüttel
2018a; Hüthig GmbH 2018b; Covestro Deutschland AG 2018a, 2018c; CHEMP-
ARK 2017, 2016)

Werk	Kapa- zität TDI [t]	Produk- tions- menge TDI [t]	Werks- fläche [km²]	Stand- ort- faktor [0;10]	Anzahl Pro- duktionsbe- triebe am Standort	Strom selbst- erzeugt [%]	Wirkungs- grad Strom- erzeugung	Wirkungs- grad Dampfer- zeugung
1	300.000	300.000	10,00	10	110	100 %	42,41 %	85 %
2	80.000	80.000	2,90	6	10	100 %	33,00 %	85 %
3	150.000	150.000	4,20	8	14	0	34,34 %	85 %
4	300.000	300.000	3,60	9	60	0	34,00 %	85 %

Genauso wurden die werksspezifischen Daten zur Berechnung der Produktionseffizienz von Chlor gesammelt, da Chlor ein Vorprodukt in der Wertschöpfungskette von TDI ist (siehe Abbildung 5.27), das gleichzeitig auch ein werksspezifisch berechenbares Hauptprodukt ist (vgl. Kapitel 5.2.3.3). Es ändert sich allerdings die Produktionskapazität sowie die zugehörige Unter-(4.000 t Kapachim, Griechenland) und Obergrenze (480.000 t) in der Berechnungslogik. Der werksspezifische Ansatz für die Herstellung von Chlor kann in dieser Fallstudie allerdings nur für die Werke 1 (Kapazität: 385.000 t) und 4 (Kapazität: 480.000 t) durchgeführt werden, da in den Werken 2 und 3 kein Chlor hergestellt wird. (Euro Chlor 2015; BASF 2017b; Rheinische Post 2017) Für die Werke 2 und 3 wird entsprechend der Wert des GWPs für Chlor aus den Eco-profiles bezogen (0,9 kgCO₂e/kg Chlor) (PlasticsEurope 2013) und in Vektor t_0 überführt.

Die Unter- und Obergrenzen eines Intervalls sowie die gewählten Gewichtungen der Faktoren zur Berechnung der Produktionseffizienz von TDI wurden unter Berücksichtigung der Literatur und in Absprache mit den genannten Experten definiert. Diese sind Tabelle 5.12 zu entnehmen. Für die Gewichtungen konnten in den Expertengesprächen keine Präferenzen ermittelt werden, sodass nach Laplace im Sinne des Indifferenzprinzips (Georgii 2009; Laplace 1812; Georgii 2009) eine Gleichgewichtung aller Faktoren angenommen wurde. Die Gewichtungen der fünf Kriterien des Integrationsgrads und die zwei Kriterien des Innovationsgrads wurden dem Prinzip der Gleichgewichtung entsprechend angepasst (0,71 \cdot 0,2 \approx 0,29 \cdot 0,5). Die Intervallbeschränkungen für die TDI-Produktionskapazität, die Anzahl der Produktionsbetriebe/-anlagen des Werkes und der Werksfläche richten sich nach den minimalen und maximalen Werten europäischer Werke. Für das technische Equipment (z.B. frequenzgesteuerte Pumpen) wird für alle deutschen Standorte der Maximalwert von 10 angenommen, da sich die deutschen TDI-Produktionsanlagen in hochentwickelten integrierten Chemieparks befinden. Für die Produktionsausbeute wird für alle Standorte nach Expertengesprächen ein Wert von 98 % angenommen.

Tabelle 5.12:Gewichtungen und Intervallbeschränkungen zur Berechnung der
Produktionseffizienz von TDI (Merchant Research & Consulting 2013; Hüthig
GmbH 2018a; BASF 2017c, 2017e, 2015)

	Produkti- onskapazi- tät TDI [t]	Produktions- flexibilität [Anzahl Produkti- onsbetriebe am Standort]	Werks- fläche [km²]	Stand- ortfaktor	Aus- las- tung	Aus- beute	Techn. Equip- ment [0;10]
			Innova	tionsgrad			
Gewich-			29 %				
tung	20 %	20 %	20 %	20 %	20 %	50 %	50 %
Unter- grenze	80.000	10	2,9	0			
Ober- grenze	300.000	110	10,00	10			

Für den SEC in Form von elektrischer Energie (Strom) zur Herstellung von TDI existiert in der Literatur nur ein einziger spezifischer Wert (2,76 GJ/t), der in einer Studie der International Energy Agency in IEA (2009) zu finden ist. Für den benötigten Dampf wird der Maximalwert berechnet (31,68 GJ/t), indem die Differenz vom Minimalwert (21,7 GJ/t) (BAT-Wert aus IEA (2009)) und dem Mittelwert des Fraunhofer ISI (26,69 GJ/t) (Fleiter et al. 2013) auf Letzteren hinzuaddiert wird. Diesbezüglich der Energie-Daten zu TDI erwähnt die IEA ausdrücklich, dass die Angaben zur benötigten Energie für die TDI-Produktion keine Informationen zum Feedstock enthalten, da die dort verwendete Energie bereits in den nötigen Vorprodukten berücksichtigt wurde (IEA 2009). Dementsprechend können Emissionen von Produkten in der Vorkette gemäß der Berechnungsansätze aus Kapitel 5.2.4.2.1 berücksichtigt werden, ohne dass Doppelzählungen durch sich überschneidende Systemgrenzen entstehen.

Bei der Recherche des SEC zur Herstellung von Chlor liegt der Fokus in dieser Arbeit auf dem Membran-Verfahren, da bei der Errichtung von Neuanlagen seit über 20 Jahren nur noch das Membran-Verfahren eingesetzt wird und

auch ältere Diaphragma- und Amalgam-Anlagen sukzessive zu Membran-Anlagen umgerüstet werden (Behr et al. 2016, vgl. auch Kapitel 2.5.3). Der SEC in Form von elektrischer Energie zur Herstellung von Chlor durch das Membran-Verfahren beträgt mindestens 2.347 kWh/t und maximal 3.796 kWh/t. Der SEC setzt sich zusammen aus 2.279 bis 3.000 kWh/t für die Elektrolyse und aus 68 bis 796 kWh/t für Hilfsgeräte bzw. -prozesse. (European Commission 2014b; Euro Chlor 2010) Umgerechnet in Gigajoule entspricht dies insgesamt 8,449 bis 13,666 GJ/t Chlor. Der SEC in Form von Dampf ergibt sich für das Membran-Verfahren nach European Commission (2014b) und Euro Chlor (2010) aus dem benötigten Dampf zur Abscheidung der Natronlauge (0,46 bis 1,5 t Dampf/t Natronlauge) und aus Hilfsprozessen (0,138 bis 2,1 t Dampf/t Chlor). Die Abscheidung der Natronlauge muss noch auf die Bezugsgröße Chlor umgerechnet werden, indem gemäß European Commission (2014b) mit dem stöchiometrischen Faktor von 1,128 t Natronlauge/t Chlor multipliziert wird. Für die Abscheidung der Natronlauge werden somit zwischen 0,519 und 1,692 t Dampf/t Chlor benötigt (European Commission 2014b; Euro Chlor 2010). Insgesamt werden also mindestens 0,657 und maximal 3,792 t Dampf/t Chlor benötigt. Dies entspricht einem SEC zwischen 1,643 bis 9,48 GJ/t Chlor, da gemäß European Commission (2014b) und Euro Chlor (2011) mit einer Exergie von 2,5 GJ/t Dampf gerechnet wird (0,657.2,5=1,64)bis 3.792.2.5=9.48 GJ/t Chlor).

Der Emissionsfaktor des Strommix und der Emissionsfaktor für Erdgas stammen aus Studien des Umweltbundesamtes und gelten für Deutschland für das Jahr 2016 (UBA 2016, 2018d) (vgl. Tabelle 5.13). Tabelle 5.13:Spezifischer Energieverbrauch (SEC) der TDI- und Chlor-Herstellung sowieEmissionsfaktoren für den deutschen Strommix und für Erdgas (UBA 2018d;Fleiter et al. 2013; IEA 2009; UBA 2016)

	Strom		Dampf	
	min	max	min	max
SEC TDI [GJ/t TDI]	2,76	2,76	21,70	31,68
SEC Chlor [GJ/t Chlor]	8,45	13,67	1,64	9,48
Emissionsfaktor Strommix [kgCO ₂ e/kWh]	0,516			
Emissionsfaktor Erdgas [kgCO ₂ e/kWh]	0,199			

5.2.6.3 Validierung und Ergebnisdiskussion

Auch das ECCO₂-Basic Chemicals Modell wurde wie erwähnt mit drei deutschen Chemiekonzernen validiert. Dazu wurde das Konzept und die Umsetzung des Modells über einen Zeitraum von zwei Jahren schrittweise in mehreren Expertengesprächen mit Herstellern und Industriepartnern analysiert, sodass das Modell sukzessive verbessert und präzisiert wurde. Dem strengen Betriebsgeheimnis verpflichtet, durfte keiner der TDI-Hersteller seine eigenen, intern berechneten THG-Emissionen pro Gewichtseinheit preisgeben, sodass ein direkter Vergleich der Ergebnisse nicht möglich war. Durch den stetigen Input der Hersteller und das strikte Vorgehen nah an den besten verfügbaren Techniken der TDI-Herstellung ist jedoch gewährleistet, dass das Modell möglichst realitätsgetreu formuliert wurde. Im Folgenden werden die berechneten Ergebnisse präsentiert und anhand existierender Werte in der Literatur validiert.



Abbildung 5.34: CO2e-Emissionen der TDI-Herstellung in vier Werken Deutschland

Die Ergebnisse in Abbildung 5.34 zeigen, dass TDI in Deutschland je nach Werk mit einem PCF zwischen $3,17 \text{ kgCO}_2\text{e/kg}$ TDI (Werk 1) bis $3,62 \text{ kgCO}_2\text{e/kg}$ TDI (Werk 2) hergestellt wird. Das heißt, es gibt in Deutschland das Potenzial, die Basischemikalie TDI mit einem bis zu 12,4 % geringerem PCF je nach Bezugswerk zu beschaffen.



Abbildung 5.35: Sensitivitätsanalyse zum Carbon Footprint von TDI für die beste (in Werk 1) und schlechteste Produktionsanlage (in Werk 2) bei einer Verbesserung ausgewählter Inputvariablen um 10 %

Ebenso wie für den PCF von Propylen (vgl. Kapitel 5.2.5.3) wird eine Sensitivitätsanalyse für den PCF von TDI für die beste (Werk 1) und schlechteste Produktionsanlage (Werk 2) durchgeführt (vgl. Abbildung 5.35). Zu diesem Zweck werden die Werte der relevantesten werksspezifischen Eingabeparameter des ECCO₂-Basic Chemicals Modells für sonstige Grundstoffe (vgl. Kapitel 5.2.4.2) um 10 % verbessert, und die Modellergebnisse dargestellt und analysiert. So werden die Werte des Wirkungsgrads der Dampferzeugung und der Stromerzeugung, der THG-Emissionen in der Vorkette, des Emissionsfaktors des Strommixes und des spezifischen Energieverbrauchs (SEC) von Dampf und Strom um 10 % reduziert, während die Anzahl der Produktionsanlagen am Standort, der Standortfaktor und die Werksfläche um 10 % erhöht werden. Die Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse zeigen, dass insbesondere Energieeinsparungen bei der Erzeugung des erforderlichen Dampfes (SEC-Dampf) (PCF-Reduktion um 4,46 % in Werk 1 und um 4,77 % in Werk 2) und eine erhöhte Effizienz der Dampferzeugung einen großen Einfluss auf den PCF haben (PCF-Reduktion um 4,05 % in Werk 1 und um 4,34 % in Werk 2). Den drittgrößten Einfluss hat die Vorkette: eine Reduzierung der THG-Emissionen in der vorgelagerten Kette um 10 % würde den PCF von TDI in Werk 1 um 4,41 % und in Werk 2 um 3,95 % reduzieren. Danach folgt die Menge der benötigten elektrischen Energie (SEC-Elektrizität): eine Reduzierung um 10 % würde den PCF in Werk 1 um 1,14 % und in Werk 2 um 1,28 % reduzieren. Der Emissionsfaktor des länderspezifischen Strommixes hat hier keinen Einfluss (0%), da die beiden betrachteten TDI-Anlagen jeweils in Werken betrieben werden, die 100 % eigenen Strom produzieren (vgl. Tabelle 5.11). In diesem Fall sollten die Werke daher vielmehr eine Effizienzsteigerung ihrer Kraftwerke anstreben. Eine Effizienzsteigerung der werkseigenen Kraftwerke um 10 % führt zu einer TDI-PCF-Reduktion von 1,03 % in Werk 1 und 1,16 % in Werk 2. Die Anzahl der Produktionsanlagen am Standort, die Größe und der Standortfaktor des Standorts haben einen vernachlässigbaren Einfluss (<<1 %). Generell könnte eine Kumulierung der Verbesserungen der einzeln analysierten Inputvariablen zu höheren PCF-Reduktionen führen. Wie im ECCO₂-HVC Modell besteht auch für das ECCO₂-Basic Chemicals Modells eine Schwäche des Ansatzes und der Sensitivitätsanalyse in der Abhängigkeit von mit den Experten getroffenen Gewichtungen (vgl. Tabelle 5.12). Auch hier wäre es empfehlenswert, diese Expertenschätzungen in zukünftigen Arbeiten zu spezifizieren (vgl. Kapitel 5.2.5.3).

Der Mittelwert der vier betrachteten Produktionswerke beträgt 3,41 kgCO₂e/kg TDI (vgl. Abbildung 5.34). Damit liegt der Wert der eigenen Studie um 0,70 kgCO₂e/kg TDI (26 %) höher als der angegebene Wert in den Eco-profiles aus dem Jahr 2012 (2,71 kgCO₂e/kg TDI) (PlasticsEurope 2012b). Dies liegt vermutlich in der Berechnung des GWPs der Vorkette begründet, da die verwendeten Datensätze aus der teilweise veralteten Ecoinvent V.2.2 Datenbank stammen. So stammen die Daten der GWPs für Schwefel- und Salpetersäure, die einen großen Einfluss auf die Emissionen der Vorkette haben (vgl. Abbildung 5.28), überwiegend aus Untersuchungen und Berichten der 1990er Jahre sowie der Jahre 2000-2001. Gestützt wird diese Vermutung durch den hohen Wert für das GWPs aus Ecoinvent V.2.2

von 6,3867 kgCO₂e/kg TDI. Dieser Wert basiert auf drei europäischen Werken (aus Deutschland, Frankreich und Italien) mit Daten von 1995-2001. (Ecoinvent V.2.2) Es wird somit deutlich, wie stark das Ergebnis mit der Aktualität der Daten schwankt. Allerdings ist der Vergleich dieser Werte nur eingeschränkt möglich, da sich die Allokationsmethoden zur Zuteilung der verursachten THG-Emissionen je nach LCA-Datenbank unterscheiden können, und dadurch Ungenauigkeiten und stark abweichende Ergebnisse erzielt werden können. Ein Vergleich mit den Eco-Profiles ist jedoch auf jeden Fall valide, da bei den Eco-Profiles, so wie im vorliegenden Modell, eine Massenallokation durchgeführt wurde (vgl. PlasticsEurope 2012b). Darüber hinaus ist ein Vergleich des PCF von TDI mit anderen Studien leider nicht möglich, da keine ähnlichen werksspezifischen Studien in der Literatur existieren. Dies ist die erste Studie in diesem Bereich. Weitere Studien sollten durchgeführt werden, um die Ergebnisse dieser Studie zu untermauern oder zu validieren.

Der Einfluss der Aktualität der Daten auf das Ergebnis kann im Weiteren auch mittels einer Beispielrechnung zu Salpetersäure gezeigt werden, die einen Produktionsinput von TDI darstellt (vgl. Kapitel 5.2.6.1). Dazu wurde ein aktueller Wert des GWPs von Salpetersäure angefragt (2,63 kgCO₂e/kg aus Ecoinvent V.3) und anstelle des bisherigen Wertes $(3,17 \text{ kgCO}_2\text{e/kg aus})$ Ecoinvent V.2.2) in das Modell implementiert. Allein durch diese Änderung verringert sich der Durchschnitt der modellierten Werke von 3,41 auf 3,28 kgCO₂e/kg TDI. Ein weiterer Grund für die Abweichung der Ergebnisse sind die unterschiedlichen Emissionsfaktoren der Strombereitstellung. Beispielsweise verändert sich der Durchschnittswert der modellierten Werke von 3,41 auf 3,28 kgCO₂e/kg TDI, wenn der Emissionsfaktor des deutschen Strommixes (0,516 kgCO₂e/kWh) durch den europäischen Emissionsfaktor ersetzt wird (0,296 kgCO₂/kWh (EEA 2018)). Allein durch diese beiden Veränderungen kann die Abweichung zwischen dem Wert der Eco-profiles und dieser Studie von 26 % auf 16 % verringert werden. Die verbleibende Abweichung ist sowohl durch die sonstige unterschiedliche Datengrundlage als

auch ggf. durch unterschiedliche Produktionsprozesse zu erklären. So ist es möglich, dass einige Standorte den benötigten Wasserstoff nicht ausschließlich aus Reformern, sondern auch aus der Chloralkali-Elektrolyse in den TDI Produktionsprozess einspeisen. Aufgrund der Massenallokation hat Wasserstoff aus der Chloralkali-Elektrolyse nur ein GWP von 1,14 kgCO₂e/kg im Vergleich zum GWP von 4,2 kgCO₂e/kg aus dem Dampf-Reformer. Bei einer Verwendung von 100 % des Wasserstoffs aus der Chloralkali-Elektrolyse würde sich der modellierte Durchschnittswert von 3.41 auf 3,34 kgCO₂e/kg TDI verringern. Des Weiteren könnte im Reformer auch Biomasse als Energieträger eingesetzt werden, um die THG-Emissionen zu reduzieren.

Da für alle Werke allerdings die gleichen GWPs der Vorprodukte in den Vorketten zugrunde gelegt werden, bleiben die absoluten Unterschiede zwischen den einzelnen Werken unabhängig vom GWP der Vorprodukte konstant. Bei der alleinigen Betrachtung der Systemgrenze "TDI Produktion" (gate-to-gate) kann die veraltete Datenbasis der Vorkette umgegangen werden. Dabei treten werksspezifische Unterschiede in den THG-Emissionen zwischen 1,77 und 2,19 kgCO₂e/kg TDI zutage. Dies entspricht einem möglichen Reduktionspotenzial von 19,2 % (zwischen Werk 2 und Werk 1).

Darüber hinaus gibt ECCO₂-Basic Chemicals in Tabellenform für jedes Werk den Ergebnisvektor B_P aus (Abbildung 5.36), der das GWP des zu bewertenden Produkts, der Zwischenprodukte sowie aller Vorprodukte enthält (vgl. Kapitel 5.2.4.2.1). Auf diese Weise können nicht nur Endprodukte, sondern ganze Wertschöpfungsketten werksspezifisch verglichen werden.

					Standort 4	
Produktions	werk: St	andort 4	•	Produkt	GWP	Einheit
				Schwefelsaure	0.1240	kg CO2e / kg
		Auswerten		Salpetersaure	3.1742	kg CO2e / kg
				Toluol	0.8700	kg CO2e / kg
Rechenzeit:		275		DNT	1.4086	kg CO2e / kg
	enzeit: 1.2	6 S		Wasserstoff	4.2000	kg CO2e / kg
				TDA	1.5007	kg CO2e / kg
				Natriumchlorid	0.0600	kg CO2e / kg
				Chlor	0.7969	kg CO2e / kg
				Kohlenmonoxid	1.5541	kg CO2e / kg
				Phosgen	1.3184	kg CO2e / kg
				TDI	3.3890	kg CO2e / kg

Abbildung 5.36: Ergebnisvektor BP exemplarisch für Werk 4

5.3 Zwischenfazit und kritische Würdigung der Modelle zur Materialherstellung

5.3.1 Übersicht der Modellergebnisse von Systemmodul A

In Kapitel 5 wurden neue Ansätze entwickelt und Modelle konzipiert, mit denen die CO₂e-Emissionen (cradle-to-gate) von Metallen (Teilmodule A1-A4) und Basischemikalien (Teilmodule A5 und A6) werksspezifisch abgeschätzt werden können, ohne vertrauliche Primärdaten zu nutzen. Zusammenfassend werden in Tabelle 5.14 die Ergebnisse dargestellt, die gleichzeitig die Inputdaten für die Systemmodule B und D sind, in denen die THG-Emissionen der Materialverarbeitung/Endproduktherstellung (B) und Nutzungs- und End-of-Life-Phase (D) eines Endprodukts berechnet werden. Tabelle 5.14 führt die entwickelten Modelle je nach Materialart, die Anzahl der modellierten Werke und die Bandbreite der Fallstudienergebnisse ("Best-inClass (BiC)" zu "Worst-in-Class (WiC)") auf. Insgesamt wurden 83 Anlagen in 77 verschiedenen Werken modelliert (chemische Werke haben teilweise mehrere Cracker am Standort). Bis auf die Fallstudie zum ECCO₂-Steel1er Modell (EU), wurden in allen anderen Fallstudien nur deutsche Werke modelliert. In der letzten Tabellenspalte wird die absolute und relative Abweichung zwischen dem schlechtesten und dem besten modellierten Werk angeben.

Teilmodul/	Material	Modellierte	BiC-WiC	Abweichung
Modell	Modell		DurchschnittØ	[tCO₂e/t Output](%)
		Anlagen	[tCO ₂ e/t Output]	
A1/ECCO ₂ -	Primär-	22	1,879-2,990	1,111 (59 %)
Steel1er	stahl		EU Werke: Ø2,352	
			Dt. Werke: Ø2,174	
A2/ECCO ₂ -	Sekundär-	15	0,638-0,894	0,256 (40 %)
Steel2er	stahl		Ø0,801	
A3/ECCO ₂ -	Primär-	4	13,689-14,964	1,275 (9 %)
Alu1er	aluminium		Ø14,111	
A4/ECCO ₂ -	Sekundär-	Remelter: 4	0,441	0 (%)
Alu2er	aluminium	Refiner: 11	0,992	0 (%)
A5/ECCO ₂ -	Propylen	23	0,950-1,510	0,560 (59 %)
HVC			Ø1,200	
A6/ECCO ₂ -	Toluoldiiso-	4	3,170-3,620	0,450 (15 %)
Basic Chemicals	cyanat (TDI)		Ø3,410	

Tabelle 5.14: Übersicht der Fallstudienergebnisse der Teilmodule A1-A6 (cradle-to-gate)

Ein Vergleich der Ergebnisse zeigt, dass für jeden der untersuchten Materialherstellungsprozesse große Unterschiede hinsichtlich der THG-Effizienz der einzelnen Hersteller bzw. Werke bestehen. Die prozentual größten werksspezifischen Unterschiede existieren in der Primärstahl- und Propylenerzeugung (beide 59 %). Zwischen dem BiC und WiC der Primäraluminiumhersteller beträgt die Abweichung nur 9 %, allerdings beläuft sich die absolute Differenz auf 1,275 tCO₂e/t Rohaluminium. Trotz der geringen prozentualen Abweichung herrscht das größte absolute THG-Reduktionspotenzial in der Primäraluminiumherstellung. Investitionsmöglichkeiten zur Reduzierung von THG-Emissionen in der Aluminiumindustrie können Breun (2016) entnommen werden.

Beim Vergleich zwischen Primär-und Sekundärmaterial zeigen die Modellberechnungen für Rohstahl, dass die Herstellung von Sekundärstahl in deutschen Werken (0,801 tCO₂e/t Rohstahl) durchschnittlich nur 37 % der THG-Emissionen der Primärstahlerstellung deutscher Werke (2,174 tCO₂e/t Rohstahl) aufweist. Im Vergleich zur europäischen Primärstahlherstellung sind es sogar nur 34 % (0,801 vs. 2,352 tCO₂e/t Rohstahl). Für Rohaluminium wurde berechnet, dass die untersuchten deutschen Sekundäraluminiumhersteller im Fall vom Remelting lediglich 3,1 % (0,441 vs. 14,111 tCO₂e/t Rohaluminium) und im Fall vom Refining 7 % (0,992 vs. 14,111 tCO₂e/t Rohaluminium) der THG-Emissionen der modellierten Primäraluminiumhütten verursachen.

Um das Potenzial des entwickelten, werksspezifischen Ansatzes im Hinblick auf die Reduzierung von THG-Emissionen einordnen zu können, werden die daraus resultierenden THG-Reduktionspotenziale im Folgenden kurz auf die gesamte Stahl-, Aluminium-, Propylen- und TDI-Produktion der Europäischen Union (EU) übertragen.

5.3.2 Resultierende THG-Einsparpotenziale

In der EU wurden im Jahr 2018 ca. 98,1 Mio. t Primärstahl, 69,6 Mio. t Sekundärstahl (World Steel Association 2019b), 8,0 Mio. t Primäraluminium, 3,1 Mio. t. Sekundäraluminium (GDA 2020), 14,2 Mio. t Propylen (CEFIC 2019) und 0,8 Mio. t TDI (für 2013)⁴² (Merchant Research & Consulting 2013) hergestellt. Eine Hochrechnung dieser Produktionsmengen mit den berechneten durchschnittlichen THG-Emissionen der Materialherstellung gemäß

⁴² Keine aktuelleren Daten kostenfrei verfügbar.

der ECCO₂-Modelle⁴³ (vgl. Tabelle 5.14) zeigt, dass die Herstellung dieser ausgewählten Materialien ca. 11 % (419 Mio. t CO₂e) der gesamten THG-Emissionen der EU (3.893 Mio. t im Jahr 2018 EEA (2020)) ausmacht.⁴⁴

Würden alle Werke der EU das jeweilige Material so effizient wie der BiC-Hersteller erzeugen (vgl. Tabelle 5.14), könnten die jährlichen THG-Emissionen um ca. 64,8 Mio. Tonnen CO₂e reduziert werden (Primärstahl: 46,3 Mio. t; Sekundärstahl: 11,3 Mio. t; Primäraluminium: 3,4 Mio. t; Propylen: 3,5 Mio. t; TDI: 0,2 Mio. t). Dies entspricht einer Einsparung von 1,7 % der jährlichen europäischen THG-Emissionen. Da diese Hochrechnung mit Ausnahme des Durchschnittswerts für Primärstahl auf deutschen Werken basiert, könnte das Einsparpotenzial in der EU je nach Material sogar noch deutlich größer sein, da einige europäische Werke deutlicher weniger effizient produzieren. Beispielsweise wurde für Propylen in der obigen Hochrechnung der im ECCO₂-HVC Modell berechnete durchschnittliche Emissionsfaktor von 1,2 kgCO₂e/kg Propylen angenommen. Der von **PlasticsEurope** erhobene Wert für Europa liegt jedoch bei 1,44 kgCO₂e/kg Propylen. Allein dadurch würde sich das oben berechnete absolute Einsparpotenzial von 64,8 Mio. t auf 68,2 Mio. t CO₂e erhöhen.

Noch viel größer ist das globale Einsparpotenzial der genannten Produktionsanlagen, da die Herstellung der betrachteten Materialien sehr energieintensiv ist und bspw. asiatische Länder, wie z.B. China, einen deutlich schlechteren Emissionsfaktor der Stromerzeugung (China: 1,1483 kgCO₂e/kWh Ecoinvent V.2.2 (2007-2013)) aufweisen als europäische Länder (im Durchschnitt 0,4876 kgCO₂e/kWh Ecoinvent V.2.2 (2007-

⁴³ Für Primärstahl wurde entsprechend der europäische Durchschnittswert verwendet. Für die anderen Materialien konnte nur der Durchschnittswert für Deutschland verwendet werden, da die Fallstudien nur deutsche Werke umfassten.

⁴⁴ Sekundäraluminium wurde in dieser und wird auch in der folgenden Berechnung nicht berücksichtigt, da aufgrund der Datenlage keine werksspezifischen Werte bestimmt werden konnten (vgl. Kapitel 5.1.8).

2013)). Das Einsparpotenzial wird umso deutlicher, wenn man berücksichtigt, dass 51 % der Rohstahlproduktion allein auf China (Deutschland: 2,3 %) (World Steel Association 2020) und 73 % der Primäraluminiumproduktion auf Asien (Europa: 12,8 %) (GDA 2020) entfallen.

5.3.3 Kritische Würdigung und Ausblick

Die fallstudienbasierte Anwendung der Modelle offenbart, dass es aus ökologischer Sicht einen gravierenden Unterschied macht, von welchem Werk bzw. Hersteller metallische und chemische Produkte bezogen werden. Für Hersteller metall- und kunststoffintensiver Produkte wie Unternehmen der Fahrzeug-, Verpackungs- oder Bauindustrie besteht also ein immenses THG-Emissionsminderungspotenzial im Lieferantennetzwerk, indem Materialien bevorzugt von CO2e-effizienten Herstellern bzw. Lieferanten eingekauft werden könnten. Dies ist bislang aufgrund der Intransparenz in den Lieferketten jedoch nicht möglich. Mit den nun vorliegenden Modellen können diese Unternehmen den werksspezifischen PCF ihrer Lieferanten daher als ein bedeutendes Entscheidungskriterium in den Lieferantenauswahlprozess integrieren. Da aufgrund von Kapazitätsbeschränkungen nicht alle Kunden das Material vom BiC-Lieferanten werden beziehen können, stellt dies allerdings nur eine individuelle Perspektive dar. Eine steigende Nachfrage nach "grüner" produzierten Materialien durch die Kunden wird die Lieferanten jedoch dazu drängen, bestehende Prozesse zu überdenken bzw. zu verbessern, um Wettbewerbsvorteile und Marktanteile zu erhalten. Dies wird auch dazu führen, dass selbst der effizienteste BiC-Hersteller danach streben wird, Produktionstechnologien weiterzuentwickeln und die Effizienz der Produktionsprozesse weiter zu maximieren.

Die Validierung der entwickelten Modelle demonstriert, dass die Modellergebnisse nur gering von Herstellerberechnungen abweichen. Trotzdem können noch einige Aspekte in weiteren Forschungstätigkeiten in die Ansätze integriert werden, um die Genauigkeit der Abschätzung werksspezifischer THG-Emissionen und auch die Anwendungsmöglichkeiten weiter zu erhöhen:

- Erweiterung der Modelle um die Integration/Modellierung zukünftiger Produktionsverfahren wie z.B. der Erzeugung von Stahl mit Wasserstoff als Energieträger. Das für die Stahlproduktion benötigte Eisenerz könnte demnach anstatt mit Koks mithilfe von Wasserstoff zu Eisen reduziert werden, das dabei als Eisenschwamm⁴⁵ anfällt (vgl. BMBF 2020). Die oben kalkulierten werksspezifischen Unterschiede der THG-Emissionen könnten zukünftig noch deutlich gravierender sein, wenn eine solch wasserstoffbasierte mit einer koksbasierten Stahlerzeugung verglichen würde.
- 2) Die entwickelten werksspezifischen Ansätze für die Metall- und Chemieindustrie unterscheiden sich bisher insbesondere durch die Berücksichtigung oder Nicht-Berücksichtigung von Nebenprodukten in der THG-Bilanzierung. Für chemische Werke wird wegen der hochintegrierten chemischen Verbundstandorte und der Vielzahl verschiedener Produkte angenommen, dass Nebenprodukte als Kraftstoff oder Rohstoff für andere Prozesse eingesetzt werden können, um eine möglichst effiziente und energiesparende Produktionsweise zu generieren (vgl. Kapitel 5.2.3.3; Fleiter et al. 2013; Saygin 2012). Für die Metallerzeugung, bei der in der Regel nur ein Hauptprodukt (z.B. Rohstahl oder Rohaluminium) erzeugt wird, werden die im Produktionsprozess verursachten THG-Emissionen vollständig dem Hauptprodukt zugeordnet. Bisher wird in den entwickelten Modellen im Rahmen der THG-Bilanzierung kaum berücksichtigt, dass auch die in den Metallerzeugungsprozessen entstehenden Nebenprodukte teilweise weiterverarbeitet werden können. Durch das große Energieeffizienzpotenzial wurde im ECCO2-Steel1er Modell bereits ein besonderes

⁴⁵ Eisenschwamm kann wie in Kapitel 2.4.2.2 in einem Elektrolichtbogenofen zu Rohstahl veredelt werden.

Augenmerk auf die Verwendung der im Stahlwerk entstehenden Prozessgase gelegt, die entweder direkt als Energieträger für andere Prozessschritte oder in werkseigenen Kraftwerken zur Stromerzeugung eingesetzt werden können. Weiterführend wäre eine breitere Betrachtung des **industriellen Handels mit Nebenprodukten** oder Produktionsrückständen denkbar, die ebenfalls im Rahmen eines Gutschriftverfahrens der CO₂e-Effizienz eines Werkes angerechnet werden könnten. Dazu bietet sich z.B. die Verwendung der Hochofenschlacke in der Zementherstellung oder auch die Verwendung überschüssiger Prozessgase der Stahlerzeugung in der chemischen Industrie an, wie z.B. in der "Carbon2chem"-Initiative (Thyssenkrupp AG 2018). Weitere nutzbare Produktionsrückstände sind Staub, Schwefel oder Schwefelsäure, Ammoniumsulfat, Benzol, Koksteer und Kokspech (European Commission 2013).

- 3) Eine zusätzliche Verbesserung der Genauigkeit der Ergebnisse liegt in der Beschaffung weiterer werksspezifischer Daten, wie z.B. die Produktionsvolumina der Kokereien der Stahlwerke für das Modell ECCO₂-Steel1er. Da die werksspezifisch produzierten Mengen an Koks von den Herstellern nicht veröffentlicht werden, diente die Outputmenge des Hochofens (Roheisen) als Berechnungsgrundlage für die Produktionsvolumina vorheriger Prozesse unter Berücksichtigung von Produktionskoeffizienten⁴⁶. Falls manche Hersteller mehr Koks produzieren, als sie am Standort benötigen, und diese Überproduktion am Markt veräußern, kann dies bislang nicht bilanziert werden.
- Zur besseren Vergleichbarkeit der verschiedenen Werke und Materialien bezieht sich die funktionelle Einheit immer auf das jeweilige Rohmaterial und nie auf eine spezielle Legierung. Der Legierungspro-

⁴⁶ Siehe detaillierte Berechnungslogik in Schiessl et al. (2020).

zess wurde bisher bewusst vernachlässigt, da Werke in der Regel unterschiedliche Legierungen produzieren, die stark von den Anforderungen der Kunden abhängen. Hinzu kommt, dass eine Berücksichtigung des Legierungsprozesses keinen Einfluss auf die CO₂-Effizienz eines Werkes hat, da die Herstellung der Legierungselemente⁴⁷ außerhalb der Systemgrenze des Stahl- oder Aluminiumwerks, bei anderen Metallherstellern erfolgt. Grundsätzlich könnten die CO₂e-Emissionen bei der Herstellung der Legierungselemente im Modell jedoch berücksichtigt werden und im Rahmen der Bilanzierung der CO₂e-Emissionen der Vorkette hinzuaddiert werden, wenn spezifische Legierungen bewertet werden sollen. Es wäre allerdings auch die **Übertragung der werksspezifischen Methodik auf** die benötigten Legierungselemente bzw. **anderen Metalle** denkbar, um die THG-Transparenz in der Lieferkette eines Metallherstellers zu steigern.

- 5) Entsprechend wäre auch eine Übertragung der entwickelten Methodiken (Metalle oder chemische Grundstoffe) für viele weitere Inputmaterialien und Roh-, Hilfs- und Betriebsstoffe denkbar, die bisher im Rahmen der Vorkette über Durchschnittsdaten der Ecoinvent-Datenbank abgebildet wurden. So könnten zukünftige Forschungstätigkeiten darauf ausgerichtet sein, die Vorketten tiefer zu durchdringen, sodass der werksspezifische Ansatz schon bei der Förderung von z.B. Eisenerz oder Erdöl ansetzen würde, um vollständige THG-Transparenz entlang der gesamten Lieferkette zu realisieren.
- 6) Desgleichen ist auch eine Ausweitung des werksspezifischen Ansatzes auf nachgelagerte Wertschöpfungsketten denkbar, in denen Metalle oder chemische Grundstoffe weiterverarbeitet werden. So wird in dieser Arbeit im Folgemodell zur Weiterverarbeitung ein wert-

⁴⁷ Z.B. Chrom, Molybdän, Mangan, Magnesium, Kupfer, Silicium oder Zink.

schöpfungskettenspezifischer Product Carbon Footprint für die Herstellung metall- oder kunststoffbasierter Bauteile bestimmt (vgl. Umsetzung in Systemmodul B in Kapitel 6).

- 7) Des Weiteren erscheint eine Ausweitung von Fallstudien auf außereuropäische Werke ebenso vielversprechend, um Transparenz auch in globalen Lieferketten zu schaffen. Für die hier betrachteten Materialien wäre dabei insbesondere China aufgrund der vielen Werke und hohen Produktionskapazitäten interessant.
- 8) Bisher wurde der werksspezifische Ansatz zunächst anhand eines simplified-LCA mit dem Fokus auf die Wirkungskategorie GWP durchgeführt. In zukünftigen Arbeiten könnte der entwickelte Ansatz auf weitere Wirkungskategorien der Ökobilanzierung übertragen werden, um auf diese Weise zu noch mehr ökologischer Transparenz in Lieferketten führen.
- 9) Durch die werksspezifische Bewertung der THG-Emissionen von Lieferanten liefert das Modell die Grundlage, derzeitige Entscheidungsunterstützungssysteme im Material-/Rohstoffeinkauf von Unternehmen zu erweitern. Beispielsweise können bisherige Multi Criteria Decision Making (MCDM)-Systeme mit Kriterien wie Preis/Kosten, Lieferzeit und Qualität um den spezifischen Carbon Footprint des Produkts erweitert werden (vgl. Umsetzung Herstellkosten vs. THG-Emissionen in Modul D in Kapitel 8).

Die neuentwickelten Methoden zur werksspezifischen Bewertung leisten einen wissenschaftlichen Beitrag im Bereich des Nachhaltigkeitsmanagements: Sie ermöglichen den Vergleich von Werken der Metall- und Chemieindustrie hinsichtlich ihrer THG-Emissionen pro zu bewertendem Produkt. Durch die nun verfügbaren Herstellerinformationen können Kaufentscheidungen deutlich ökologischer getroffen werden und die THG-Emissionen in Lieferketten reduziert werden. Die Effizienzunterschiede der modellierten Werke in den Fallstudien zeigen das immense THG-Reduktionspotenzial und bestätigen die Notwendigkeit einer werksspezifischen Bewertung.

6

Systemmodul B: THG-Emissionen und Kosten der Endproduktherstellung

In diesem Kapitel wird das "Systemmodul B" vorgestellt mit dem die THG-Emissionen und Kosten der Fertigung eines Produkts simultan entlang der Wertschöpfungskette quantifiziert und bewertet werden können. Teile dieses Kapitels wurden bereits vom Autor dieser Arbeit in Müller et al. (2018)¹ veröffentlicht. In Kapitel 6.1 wird zunächst ein Überblick über die Problemstellung und Zielsetzung des Systemmoduls B gegeben. Daran anknüpfend erfolgt in Kapitel 6.2 eine Beschreibung des gewählten Forschungsansatzes und der methodischen Herangehensweise. In Kapitel 6.3 wird die Berechnungslogik der Modellierung vorgestellt, einerseits für die Bilanzierung der fertigungsspezifischen THG-Emissionen und andererseits für die Quantifizierung der fertigungsspezifischen Kosten. Nach der Modellentwicklung wird das fertige Systemmodul B in Kapitel 6.4 am Beispiel eines Kraftfahrzeugbauteils angewendet und die Ergebnisse werden präsentiert. In Kapitel 6.5 wird Systemmodul B und seine Annahmen und Berechnungen kritisch gewürdigt sowie ein Ausblick auf zukünftige Forschungspotenziale gegeben.

¹ Siehe Müller, Richard; Loster, Marc; Volk, Rebekka; Schultmann, Frank (2018): CO₂-based assessment for sustainable production planning in the metal processing industry. In: Procedia Manufacturing

6.1 Problemstellung und Zielsetzung

Durch Systemmodul A können THG-Emissionen wichtiger Industriematerialien nun werksspezifisch bewertet werden. Allerdings bezieht sich die Bewertung bisher nur auf das Produktionssystem des Materialherstellers, also des Herstellers der Halbzeuge. Damit ganze Endprodukte und deren Wertschöpfungsketten spezifisch bewertet werden können (vgl. Modellanforderungen Kapitel 4.1), muss das Produktionssystem des **Materialverarbeiters** (Endproduktherstellers), das sich in der Regel über mehrere Fertigungsverfahren erstreckt, ebenfalls modelliert werden.² Dies betrifft die gesamte Fertigungskette der Materialverarbeitung vom Halbzeug bis zum Endprodukt.

Eine wichtige Zielsetzung bzw. gesetzte Modellanforderung ist dabei die Berücksichtigung der **Herstellkosten**³ des Produkts, damit der Modellanwender die Fertigungskette sowohl hinsichtlich der THG-Emissionen als auch bezüglich der Herstellkosten steuern kann (vgl. Kapitel 4.1). Die Literaturanalyse in Kapitel 3.5.3 hat gezeigt, dass sich bisher nur sehr wenige Autoren mit dieser **integrativen Sichtweise** von Herstellkosten eines Produkts und den entsprechenden wertschöpfungskettenspezifischen THG-Emissionen beschäftigt haben (vgl. Kapitel 3.5.3 Literaturanalyse; Rieckhof und Guenther 2018). Seit es einen standardisierten Prozess zur Materialflusskostenanalyse gibt, haben einige Wissenschaftler eine kombinierte Be-

² Modellanforderungen aus Kapitel 4.1 werden "fett" gedruckt.

³ Herstellkosten umfassen im Detail: Fertigungseinzelkosten (z.B. Lohnkosten der Produktionsmitarbeiter), Materialeinzelkosten (z.B. Einkauf von Halbzeugen), Fertigungsgemeinkosten (z.B. kalkulatorische Abschreibungen und kalkulatorische Zinsen), Materialgemeinkosten (z.B. Lohnkosten für Mitarbeiter im Lager) und Sondereinzelkosten der Fertigung (z.B. pro Auftrag erfassbare Kosten für Werkzeuge). Herstellkosten sind abzugrenzen von Selbstkosten, die zusätzlich auch die Kosten aus Forschung, Entwicklung, Verwaltung und Vertrieb beinhalten. (vgl. Coenenberg et al. 2016)
trachtung von Life Cycle Assessment (LCA) und der Materialflusskostenrechnung (MFKR) empfohlen. (Viere et al. 2011; Kokubu et al. 2009; Schmidt und Nakajima 2013) Allerdings gibt es aktuell nur wenige Beiträge, in denen eine Integration beider Methoden tatsächlich umgesetzt wurde (Rieckhoff Günther 2018). Hinsichtlich der THG-Emissionen hat die Literaturanalyse zudem offenbart. dass THG-Emissionen in den existierenden Ansätzen bisher ausschließlich anhand von Durchschnittswerten aus LCA-Datenbanken berücksichtigt wurden (GWP100 in CO₂e) und somit nicht spezifische Liefer- und Fertigungsketten widerspiegeln. In der Literatur existiert derzeit also kein integrierter Ansatz, der Herstellkosten mit einem wertschöpfungskettenspezifischen Product Carbon Footprint kombiniert. Diese Forschungslücke soll in diesem Kapitel durch die Kombination der Methoden LCA und MFKR und die Integration der Ergebnisse von Systemmodul Ageschlossen werden. Durch die Integration der Ergebnisse von Systemmodul A kann darüber hinaus ein Alleinstellungsmerkmal hinsichtlich eines spezifischen PCFs im cradle-to-gate System geschaffen werden, da erstmals spezifische THG-Emissionen der Lieferkette (cradle-to-gate(in)) in der PCF Bilanzierung berücksichtigt werden können.

6.2 Forschungsansatz und Methode

6.2.1 Modellanforderungen

Um die THG-Emissionen und die Herstellkosten eines Produktes gleichzeitig und wertschöpfungskettenspezifisch berechnen zu können, werden im Folgenden die selbst hergeleiteten und notwendigen Modellanforderungen und Grenzen gemäß der Modellanforderungen aus Kapitel 4.1 und gemäß der oben durchgeführten Methodendiskussionen in Kapitel 3.2 kurz zusammengefasst.

- 1) Fokus auf eine generische Modellierungs- und Berechnungslogik, sodass das Modell sowohl von metall- als auch kunststoffverarbeitenden Unternehmen verwendet werden kann.
- 2) Werksspezifische THG-Emissionen der Materialherstellung (modellierte Zulieferer/Hersteller aus Systemmodul A) sollen einbezogen werden können, damit Systemmodul B nicht nur die gate(in)-togate(out) THG-Emissionen sondern auch den vollständigen PCF des Endprodukts (cradle-to-gate(out)) abbilden kann.
- 3) Methoden Ökobilanzierung, Materialflusskostenrechnung und Lebenszykluskostenrechnung sollen gemäß der ISO Normen angewendet und kombiniert werden. Die Kapitel zur Methoden- (Kapitel 3.2.2) und Literaturdiskussion (Kapitel 3.5.3) führten zu dem Ergebnis, dass sich zur integrierten ökologischen und ökonomischen Bewertung von Wertschöpfungsketten vor allem die Kombination der Methoden "Ökobilanzierung" und "MFKR" anbietet.
- 4) Fokussierung auf das GWP in [CO₂e] als Wirkungskategorie des LCA zur Bewertung der ökologischen Dimension. Die ökonomische Dimension umfasst die Herstellkosten, also alle direkten Kosten des Produkts (Prozesskosten) und seine Material- und Produktionsgemeinkosten (vgl. Kapitel 2.1.4).
- 5) Berücksichtigung von Aspekten der Kreislaufwirtschaft im Bewertungsmodell. So soll die Weiter- und Wiederverwendung von Materialien sowohl ökonomisch als auch ökologisch in der Modellierung und Bilanzierung berücksichtigt werden können.
- 6) Hohe thematische Relevanz f
 ür Industrie und Wissenschaft erfordert ein Modell, in dem jeder einzelne Fertigungsprozess einer ganzen Fertigungskette analysiert werden kann, sodass innerhalb des ge-

samten cradle-to-gate(out))-Produktionssystems Potenziale zur Effizienzsteigerung ermittelt werden können, sei es über die Wahl der Materialart oder z.B. durch die Berechnung des Produkt und Non-Produkt-Outputs eines Prozesses (vgl. Kapitel 3.2.4). Zur Fertigung eines Produkts können grundsätzlich verschiedene Fertigungsketten konfiguriert werden, die auf verschiedenen Fertigungsverfahren basieren. Diesbezüglich soll es möglich sein, verschiedene Fertigungsketten in Bezug auf THG-Emissionen und Herstellkosten miteinander vergleichen zu können.

- 7) Ermöglichen der isolierten Modifikation einzelner Modellparameter, um Auswirkungen von Entscheidungen auf das Gesamtsystem analysieren zu können.
- Maschinen, die gekauft oder benutzt werden sollen, sind auf Lebenszyklusbasis zu bewerten, um einen ganzheitlichen Maschinenstundensatz zu berechnen.
- 9) Die hohe Praxisrelevanz dieses kombinierten Ansatzes erfordert zudem eine anwenderfreundliche Konzeptionierung und Umsetzung des Modells, damit es leicht in Unternehmensprozesse integriert werden kann (keine Software- oder Anwendungsbarrieren). Unter den existierenden Ansätzen zur Kombination von LCA und MFKR konnten nur drei Beiträge identifiziert werden, in denen der Berechnungsansatz als Software bzw. Tool programmiert wurde. Ob diese Tools anwendungsfreundlich bzw. für einen Einsatz in der Industrie geeignet sind geht aus den Beiträgen nicht hervor (vgl. Kapitel 3.5.3).

6.2.2 Systemgrenzen und Annahmen

Der Zielstellung der integrierten Betrachtung von Kosten und THG-Emissionen folgend, müssen vor allem hinsichtlich der Festlegung der Systemgrenzen und damit einhergehender zu betrachtender Fertigungsprozesse und Stoffflüsse einige Annahmen getroffen werden. Neben der Definition der Systemgrenzen betrifft dies vor allem Transport- und Recyclingprozesse, die Handhabung von Sekundäroutput, den Umgang mit Energiekosten und die Definition einer Mengenstelle für diese Arbeit.

Die Zielsetzung einer integrierten ökonomischen und ökologischen Bewertung eines Produktionssystems (gate(in)-to-gate(out)) bedingt, dass für die THG-Bilanz und die MFKR dementsprechend die gleichen Systemgrenzen eines Produktionssystems definiert werden (vgl. Abbildung 6.1). Allerdings muss hinsichtlich der zu bilanzierenden Stoffflüsse (hier: Material- und Energieflüsse sowie THG-Emissionen) zwischen den beiden Bewertungsdimensionen, im engeren Sinne zwischen den beiden Methoden (MFKR und LCA), differenziert werden. Differenziert werden muss insbesondere im Bereich der Materialherstellung und des Materialtransports; denn die Kosten für die im Produktionssystem eingesetzten Materialen und deren Transporte fallen erst im Produktionssystem an und können diesem daher eindeutig zugeordnet werden. Kosten externer Transportprozesse werden in der vorliegenden Arbeit nicht als einzelne Kostenposition berücksichtigt, da angenommen wird, dass die Kosten des Transportprozesses im Anschaffungspreis des Materials inkludiert sind und daher gemäß der MFKR in den Materialkosten enthalten sind.

Im Gegensatz zu den Kosten werden die THG-Emissionen der Materialherstellung jedoch im System des Materialherstellers verursacht, sodass diese nicht dem zu bewerteten gate(in)-to-gate(out) Produktionssystem zugeordnet werden können. Auch die THG-Emissionen des Materialtransports werden außerhalb der Systemgrenzen verursacht, da diese auf dem Weg zum Betriebsstandort emittiert werden. Für die THG-Emissionen des Materialtransports erfolgt im Modell eine separate Berechnung, da diese in den THG-Emissionen der Materialherstellung gemäß Systemmodul A nicht enthalten sind und somit noch berücksichtigt werden müssen.

Die Systemgrenzen der MFKR bzw. die im System zu bilanzierenden Stoffflüsse entsprechen somit nicht den Systemgrenzen bzw. den zu bilanzierenden Stoffflüssen für die THG-Bilanz des (gate(in)-to-gate(out)) Produktionssystems (vgl. Abbildung 6.1). Dies stellt nach Schrack (2016) aber kein Problem dar, da es durchaus zulässig ist, für die MFKR die Systemgrenze eines Werks/Betriebs zu wählen, während die Ökobilanzierung anhand eines cradle-to-gate Systems erfolgt (Schrack 2016). Im vorliegenden Ansatz wird in Übereinstimmung dazu und konform zu den oben formulierten Anforderungen sowohl ein cradle-to-gate System für die THG-Emissionen als auch eine reine gate-to-gate Bilanzierung der THG-Emissionen durchgeführt (vgl. Abbildung 6.1).



Abbildung 6.1: Systemgrenzen der Materialflusskostenrechnung und der THG-Bilanz des Systemmodul B am Beispiel eines Fertigungsprozesses i

Sekundäroutput eines Fertigungsprozesses kann auf verschiedene Weise in einem Unternehmen gehandhabt werden (vgl. Müller et al. 2018). In dieser Arbeit werden folgende Fälle unterschieden (vgl. auch Abbildung 6.2):

 Abfallentsorgung (Sammeln und Verkauf von Sekundäroutput an Schrotthändler für externes Recycling oder Entsorgung gegen Gebühr an Abfallunternehmen): Hier wird die Annahme getroffen, dass bei einer Entsorgung bspw. von Metallen Erlöse erzielt werden können (z.B. Verkauf an Schrotthändler) oder bspw. bei Kunststoffen Entsorgungskosten anfallen, die in diesem Fall den Kosten des Prozesses hinzugerechnet werden. Die Erlöse beim Verkauf von Sekundäroutput werden in der Erlösrechnung des Unternehmens berücksichtigt.

- Direkte interne Weiterverwendung ohne Recycling/Aufbereitung: Bei der Weiterverwendung ohne Recycling/Aufbereitung/Einschmelzen wird der Sekundäroutput direkt, d.h. im Betrieb, in den Kreislauf zurückgeführt, wodurch weniger Primärmaterial benötigt wird. Für die THG-Bilanz wird wiederverwertetes Material mit einer Gutschrift versehen (vgl. Kapitel 6.3.1).
- Internes Recycling und anschließende Weiterverwendung oder Verkauf: Wenn der Sekundäroutput innerhalb des betrachteten Betriebs recycelt und danach intern weiterverwendet wird, fließen die Aufwände für diesen Recyclingprozess j (vgl. Abbildung 6.1) in das Kostenmodell ein. Die recycelten Rohstoffe können alternativ auch verkauft werden, und die damit erzielten Erlöse würden, wie im Fall des Verkaufs von Schrotten an einen Schrotthändler, einer separaten Erlösrechnung zugeführt werden.⁴ In der THG-Bilanzierung hat recyceltes Material eine Gutschrift in der Ökobilanz zur Folge; die ökologischen Auswirkungen des Recyclingprozesses an sich müssen allerdings von dieser Gutschrift abgezogen werden (vgl. Kapitel 6.3.1).

⁴ Im Rahmen einer Materialflusskostenrechnung sollten Erlöse nicht mit Kosten saldiert werden, da dies zu falschen Ergebnissen bzw. Erkenntnissen führen kann. Eine Saldierung wäre nur dann möglich und würde die Ergebnisse nicht signifikant verfälschen, wenn die Erlöse prozentual nur weniger als 1 % der Gesamtkosten ausmachen. (vgl. Schrack 2016)



Abbildung 6.2: Darstellung eines Fertigungsprozesses

Jeder in Systemmodul B modellierte und bilanzierte Fertigungsprozess gemäß Abbildung 6.2 wird als Mengenstelle definiert. Für jede Mengenstelle wird angenommen, dass kein Material in der Mengenstelle verbleibt, sodass der Anfangs- und Endbestand jeder Mengenstelle null ist. (vgl. Abbildung 3.4 in Kapitel 3.2.4.2).

Nach DIN EN ISO 14051:2011 zur MFKR werden **Energiekosten** entweder den Materialkosten zugeordnet oder gesondert ausgewiesen. In der industriellen Praxis sind Energiekosten jedoch üblicherweise im Maschinenstundensatz enthalten (Fischer 2008), der im Rahmen der MFKR allerdings den Systemkosten zugeordnet wird (DIN EN ISO 14051:2011). Um eine hohe industrielle Einsatzfähigkeit des hier entwickelten Bewertungsmodells zu ermöglichen, werden hier die Energiekosten den Systemkosten zugerechnet, damit Unternehmen ihre bereits berechneten Maschinenstundensätze direkt ins Bewertungsmodell übernehmen können. Zur Gewährleistung einer trotzdem korrekten Anwendung der MFKR wird außerdem die Option implementiert, dass Energiekosten auch separat ausgewertet werden können, wenn ein Maschinenstundensatz ohne Energiekosten eingetragen wurde.

6.2.3 Modellkonzept für Systemmodul B

Zur Umsetzung der oben formulierten Modellanforderungen wurde ein Modellkonzept entworfen, das zum einen die Integration der Ergebnisse der ECCO₂-Tools (Systemmodul A) zu den werksspezifischen THG-Emissionen von Materialherstellern als Eingangsgröße zulässt, damit der Carbon Footprint eines Endprodukts wertschöpfungskettenspezifisch cradle-to-gate berechnet werden kann. Zum anderen ermöglicht das Konzept aber vor allem die Modellierung industrieller Fertigungsketten, um Kosten und THG-Emissionen, die von einer spezifischen Produktionskette (gate-to-gate) eines bestimmten Unternehmens verursacht werden, bewerten zu können. Abbildung 6.3 veranschaulicht das Modellkonzept der Kombination der Systemmodule A und B sowie der Integration der MFKR mit dem Life Cycle Assessment. Der Fokus des LCAs liegt weiterhin auf der Bewertung des Treibhauspotenzials (GWP) [in CO₂e].



Abbildung 6.3: Modellstruktur von Systemmodul B inkl. der Integration des Systemmoduls A zur Berechnung eines cradle-to-gate PCFs eines Endprodukts

Die (direkten und indirekten) THG-Emissionen eines Produktionssystems werden auf Grundlage von Inputdaten zu Materialien, Transporten und weiteren Produktionsinputs wie Kühlflüssigkeiten, Druckluft und Energie sowie auf Grundlage von Outputdaten wie Sekundäroutputs oder Produktionsausschuss berechnet. Diese Inputdaten zur THG-Bilanzierung des Produktionssystems werden mit einer Kostenberechnungslogik gekoppelt, die auf der MFKR basiert. Kosten von Fertigungsmaschinen werden durch die Methode der Lebenszykluskostenrechnung (LCC) abgebildet. Durch die Koppelung der Kostenberechnungslogik mit der Datenerfassung zur Bilanzierung der THG-Emissionen müssen Stoff- und Energieströme im Modell nur einmal erfasst werden, anstatt sie für jede Methode jeweils separat zu modellieren. Zur integrierten Bewertung müssen daher nur noch die Kostensätze vom Nutzer in Systemmodul B eingetragen werden. Ziel hierbei ist es, weiterhin die Dateneingabe nutzerfreundlich und individualisierbar zu gestalten, sodass Daten nicht mehrfach abgefragt werden. Durch die beschriebene Integration beider Berechnungslogiken (THG-Bilanzierung und Logik zur Durchführung der MFKR) generiert das Systemmodul B eine, für jeden Nutzer individualisierte Abfrage der fehlenden Daten in einem Tabellenblatt "Kostenberechnung". Um die Dateneingabe weiter zu vereinfachen, können Daten in verschiedenen Einheiten eingetragen werden, je nachdem, wie diese dem Nutzer vorliegen (z.B. €/kWh oder €/MJ). Die Modellberechnungen können durchgeführt werden, sobald der Nutzer dem Modell alle erforderliche Daten zur Verfügung gestellt hat. Die Umsetzung von Systemmodul B sowie die Integration der Ergebnisse von Systemmodul A darin erfolgt in VBA und kann über Microsoft Excel aufgerufen und verwendet werden.

6.3 Berechnungslogik

Eine Übersicht über alle im Folgenden verwendeten Parameter, Variablen und Indizes kann Tabelle A.6 im Anhang entnommen werden.

6.3.1 THG-Emissionen einer Fertigungskette

Es seien die Fertigungsprozesse i=1,...,n aufsteigend in der Reihenfolge nummeriert, in der sie bei der Produktion des Endprodukts mitwirken. Das Endprodukt der Fertigungskette ist somit der Primäroutput des letzten Fertigungsprozesses (Prozess n). Dieses Produkt stellt gleichzeitig die funktionelle Einheit für die Ökobilanzierung (bzw. THG-Bilanzierung) dar. Da Fertigungsprozesse in der Praxis meist auf Outputs vorgelagerter Prozesse zurückgreifen, lässt sich B_n als die Bilanz des Primäroutputs von Fertigungsprozess n schrittweise über die Bilanzen vorgelagerter Primäroutputs berechnen. Die funktionelle Einheit der Ökobilanz B_n stellt dabei immer die oberste Zielgröße der Bilanzierung dar. Es sei B_i die Ökobilanz der Fertigung einer Einheit des Primäroutputs von Fertigungsprozess i, dann lässt sich die Bilanz B_n nach dem in Abbildung 6.4 beschriebenen Schema berechnen:



Abbildung 6.4: Berechnungsschema der Ökobilanz des Endprodukts einer Fertigungskette

Zur Bestimmung der Bilanz B_n ist folglich eine sukzessive Berechnung der Bilanzen vorgelagerter Primäroutputs nötig. Diese lassen sich für jeden Fertigungsprozess in Abhängigkeit der Input-/Outputströme bestimmen. Gleichung (6.1) zeigt die Berechnung der gesamten THG-Emissionen eines Fertigungsprozesses *i*. Diese setzen sich zusammen aus den THG-Emissionen der Herstellung und Bereitstellung (inkl. Transport) des verwendeten Materials $(B_{material\ input,i})$ (Ergebnisse aus Systemmodul A), der verwendeten Energie $(B_{energy,i})$, der Kühl- und Schmiermittel $(B_{cooling\ liquids,i})$ und der Druckluft $(B_{compressed\ air,i})$ sowie direkt verursachter THG-Emissionen $(B_{direct\ emissions,i})$ und den THG-Emissionen aus der Handhabung des Sekundäroutputs ($B_{secondary\ output,i}$). (Müller et al. 2018)

$$B_{i} = B_{material input,i} + B_{energy,i} + B_{cooling liquids,i} + B_{compressed air,i} + B_{secondary output,i} + B_{direct emissions,i}$$
(6.1)

In Formel (6.2) werden zunächst die THG-Emissionen von $B_{material input,i}$ berechnet: M_{i,r_f} steht darin für die Menge des Materials $r(r \in R)$ von Lieferant $f(f \in F)$, das in Prozess *i* verwendet wird, und EF_{r_f} für den Emissionsfaktor des Lieferanten f zur Herstellung des Materials r in [kgCO₂e/Materialeinheit]. d_{i,r_f} gibt die Transportentfernung [km] von Lieferant f zum Verwendungsort an, und EF_t bezeichnet den Emissionsfaktor des Transports in Abhängigkeit vom Transportmittel t ($t \in \{1 = Lkw; 2 = Bahn; 3 = Flugzeug; 4 = Binnenschiff; 5 = Hochseeschiff\}$) in [kgCO₂e/1000km]. $u_{i,r}$ definiert die notwendige Einheit des Materialinputs r im Prozess i in Kilogramm [kg], Liter [I] oder Stückgut [Stück]. Diesbezüglich steht $\rho_{i,r}$ [kg/I] für die Dichte des Materials r und m_{i,r_f} [kg] für die Masse eines Stückguts.

$$B_{material input,i} = \sum_{r \in R} \sum_{f \in F} M_{i,r_f} \times EF_{r_f} + \sum_{r \in R} \sum_{f \in F} \left(d_{i,r_f} \times EF_t \times \frac{M_{i,r_f}}{1000} \times \left[(\mathbb{1}_{u_{i,r}=1} \\ \times u_{i,r}) + (\mathbb{1}_{u_{i,r}=2} \times \rho_{i,r}) + (\mathbb{1}_{u_{i,r}=3} \times m_{i,r_f}) \right] \right)$$
(6.2)

mit:
$$u_{r_i} = \begin{cases} 1, \ r \ in \ kg \\ 2, \ r \ in \ l \\ 3, \ r \ in \ St \ ck \end{cases}$$

Als zweite Komponente der THG-Bilanz der Fertigung eines Endprodukts (vgl. Formel (6.1)) zeigt Formel (6.3) die Berechnung der Input-Energieströme ($B_{energy,i}$). Diese sind abhängig von der Höhe des Energiebedarfs der Maschinen im Prozess, vom Herkunftsland der Energie sowie vom Energietypus (elektrische Energie, thermische Energie oder rohstoffliche Energieträger). $E_{i,m,e,l}$ beziffert entsprechend den Energiebedarf des Energietyps eaus Herkunftsland l in [kWh] für Maschine $m(m \in M)$ in Prozess $i. EF_{l,e}$ gibt je nach Land und Energietyp den jeweiligen nationalen Emissionsfaktor der Energiebereitstellung an [kgCO₂e/kWh].

$$B_{energy,i} = \sum_{m \in \mathcal{M}} \sum_{e=1}^{3} \sum_{l=1}^{z} E_{i,m,e,l} \times EF_{l,e}$$

mit:

$$e = \begin{cases} 1, & Elektrische Energie \\ 2, & Thermische Energie \\ 3, & Rohstoffl.Energieträger \end{cases}$$

(6.3)

Im dritten Bestandteil der THG-Bilanz (vgl. Formel (6.1)) werden die Auswirkungen von Kühl- und Schmierstoffen und Reinigungsmitteln (KSS) erfasst (B_{cooling liquids.i}) (siehe Formel (6.4)). Dabei ist es aus ökologischer Sicht von entscheidender Bedeutung, ob die verwendeten KSS im Anschluss an ihre Verwendung im Fertigungsprozess wiederaufbereitet werden oder nicht. Dies wird durch die Entscheidungsvariable $e_{i,k}$ angegeben. $e_{i,k} = 1$, wenn der KSS vom Typ $k \in K$ (z.B. Trinkwasser, Schmieröl etc.) aufbereitet werden kann. $e_{i,k} = 0$, wenn keine Aufbereitung des KSS vom Typ k erfolgt, oder keine Daten zur Aufbereitung vorliegen. Kann ein KSS k zur Wiederverwendung aufbereitet werden, so ist ökologisch lediglich der Aufwand zur Aufbereitung (des Recyclings) zu berücksichtigen. $M_{i,m,k}$ gibt dabei den Bedarf des KSS k in Litern [I] der Maschine m in Prozess i an, und $R_{i,k,j_{i,k}}$ beschreibt den Emissionsfaktor des Recyclings [kgCO2e/l] des in i benutzten KSS k durch den Recyclingprozesses $j_{i,k}$. Findet keine Aufbereitung statt, wird stattdessen der Emissionsfaktor zur vorschriftsgemäßen Entsorgung (EF_k) [kgCO₂e/l] verwendet.

$$B_{cooling \ liquids,i} = \sum_{m \in M} \sum_{k \in K} \left(\left(e_{i,k} \times M_{i,m,k} \times R_{i,k,j_{i,k}} \right) + \left((1 - e_{i,k}) \times M_{i,m,k} \times EF_k \right) \right)$$
(6.4)

mit:

 $e_{i,k} = \begin{cases} 1 \text{ , } Auf bereitung \\ 0 \text{ , } keine \text{ Auf bereitung oder keine Daten verfügbar } \end{cases}$

Der Teil der THG-Bilanz zur Bewertung der Druckluft ($B_{compressed air,i}$) (vgl. Formel (6.5)) ist sowohl von der verbrauchten Menge an Druckluft, als auch von dem Druck, unter dem die Luft steht, abhängig. $D_{i,m,p}$ gibt entsprechend den Druckluftbedarf [m³] der Maschine m mit Druck p für den Prozess i an ($p \in P$, Druck in [bar] aus der Menge der zulässigen Drücke P, die in der Datenbank vom Anwender hinterlegt sind). EF_p definiert den Emissionsfaktor zur Bereitstellung von Druckluft [kgCO₂e/m³] mit Druck p

$$B_{compressed \ air,i} = \sum_{m \in M} \sum_{p \in P} D_{i,m,p} \times EF_p$$
(6.5)

Die fünfte Komponente der THG-Bilanz (vgl. Formel (6.1)) stellt die Sekundäroutputs $B_{secondary output,i}$ dar. Die Stoffe, die als Nebenprodukte bei einem Fertigungsprozess anfallen (z.B. Metallspäne), können entweder nicht weiterverwendet werden {0} (Entsorgung ohne Recycling), nach einem Recyclingvorgang weiterverwendet werden {2} (z.B. Einschmelzen der Metallspäne) oder ohne vorheriges Recycling weiterverwendet werden {1} (z.B. Verschnitte von Metallplatten für das Ausstanzen kleinerer Produkte). Diese Fallunterscheidung beschreibt Entscheidungsvariable $e_{i,s} \in \{0; 1; 2\}$. Wie im Fall der Primäroutputs kann das Modell auch Sekundäroutputs in unterschiedlichen Einheiten berücksichtigen (Rohstoff in [kg], Rohstoff in [l], Stückgüter in [Stück]). Stückgüter werden dabei mit ihrem Gewicht bewertet und haben die gleiche ökobilanzielle Bedeutung wie Materialoutputs in [kg] mit demselben Material und Gewicht. Die Auswirkung des Sekundäroutputs auf die Gesamtbilanz ergibt sich gemäß Formel (6.6).

 $M_{i,s}$ ist die Menge des Sekundäroutputs $s \ (s \in \{1, ..., w\}\$ (Stahl, Aluminium etc.)), die bei Herstellung einer Einheit des Primäroutputs von Fertigungs-

prozess *i* entsteht. *EF_s* beziffert den Emissionsfaktor zur Herstellung des Sekundäroutputs *s* und ist identisch zu *EF_{rf}*, da der Sekundäroutput auf dem von Lieferant *f* bezogenem Material *r* basiert. Der Wert des *EF_s* ist in [kgCO₂e/kg] oder [kgCO₂e/l] definiert, je nachdem, in welcher Einheit *M_{i,s}* angegeben ist (kg oder I). *R_{i,s,ji,s}* ist der Emissionsfaktor des Recyclings eines Sekundäroutputs *s* aus dem Fertigungsprozess *i* durch den Recyclingprozess *j_{i,s}*. *R_{i,s,ji,s}* wird wie *EF_s* je nach der Einheit des *M_{i,s}* in [kgCO₂e/kg] oder [kgCO₂e/l] angegeben.

$$B_{secondary output,i} = \sum_{s \in S} (-M_{i,s} \times EF_s \times \mathbb{1}_{e_{i,s} \ge 1}) + \sum_{s \in S} (M_{i,s} \times R_{i,s,j_{i,s}} \times \mathbb{1}_{e_{i,s} = 2})$$
(6.6)

mit:
$$e_{i,s} = \begin{cases} 2, & Weiterverwendung nach Recycling \\ 1, & Weiterverwendung ohne Recycling \\ 0, & Entsorgung/keine Weiterverwendung \end{cases}$$

Findet eine Entsorgung des Sekundäroutputs *s* ohne vorheriges Recycling statt($e_{i,s} = 0$), so hat dieser Output keine Auswirkung auf die THG-Bilanz zur Folge ($B_{secondary output} = 0$). Bei einer Weiterverwendung des Sekundäroutputs *s* ohne Recycling ($e_{i,s} = 1$) wird der ökologische Wert des Outputs (d.h. die Einsparung von THG für die Primärproduktion von *s*) in vollem Umfang in der Ökobilanzierung berücksichtigt (also abgezogen) ($B_{secondary output} = -M_{i,s} \times EF_s \leq 0$). Muss der Sekundäroutputs *s* vor einer Weiterverwendung erst durch einen Recyclingprozess $j_{i,s}$ aufbereitet werden ($e_{i,s} = 2$), so erfolgt ebenfalls eine positive Berücksichtigung des Materialoutputs, jedoch verringert sich diese um den ökologischen Aufwands des Recyclings, der der THG-Bilanz noch hinzugefügt wird

 $(B_{secondary output} = -M_{i,s} \times EF_s + M_{i,s} \times R_{i,s,j_{i,s}})$. So lange der nötige Recyclingvorgang ökologisch vorteilhafter ist als die Neugewinnung des Materials, ist der Effekt auf die Gesamtbilanz weiterhin positiv $(B_{secondary output} \le 0)$, d.h. THG-reduzierend.

Der letzte Einflussfaktor der THG-Bilanz sind direkte THG-Emissionen eines Fertigungsprozesses i ($B_{direct\ emissions,i}$), die zum Beispiel durch einen Gasnitrierprozess⁵ entstehen können.

6.3.2 Kosten eines Endprodukts auf Basis der MFKR

Nach DIN EN ISO 14051:2011 zur Materialflusskostenrechnung (MFKR) (vgl. Kapitel 3.2.4) ergeben sich die Prozesskosten (CP_i) eines Fertigungsprozesses *i* aus Materialkosten (MC_i), Energiekosten (EC_i), Systemkosten (SC_i) und Abfallmanagementkosten (WC_i) (vgl. Formel (6.7)). Als fünfte Komponente wird optional noch die Möglichkeit zur Berücksichtigung etwaiger THG-Kosten (CB_i) (z.B. aus dem Emissionshandel oder aus CO₂-Steuern) implementiert.

$$CP_i = MC_i + EC_i + SC_i + WC_i + CB_i$$
(6.7)

Durch Addition der ermittelten Prozesskosten (CP_i) mit prozessspezifischen Gemeinkosten (Material- und Fertigungsgemeinkosten) des Prozesses i(MO_i) können die Herstellkosten eines Produkts auf Prozessebene ($C_{Manufacturing,i}$) berechnet werden (vgl. Formel (6.8)). Die gesamten Kosten der Herstellung eines Produkts (vgl. Kapitel 1.2) ($C_{Manufacturing}$) berechnen sich daraufhin nach Formel (6.9).

⁵ Das Gasnitrieren ist ein Oberflächenbehandlungsverfahren, bei dem Stahl in einer Ammoniak-Atmosphäre gehärtet wird (vgl. Kapitel 2.6.7). Beim Gasnitrieren entstehen NOx-, COund CO₂-Emissionen (Gebeshuber et al. 2020).

$$C_{Manufacturing,i} = CP_i + MO_i \tag{6.8}$$

$$C_{Manufacturing} = \sum_{i=1}^{n} C_{Manufacturing,i}$$
(6.9)

In der MFKR ist es überdies möglich, die Kosten für den Materialverlust (Non-Produkt Output) (C_{NPO_i}) zu berechnen, um diejenigen Kosten zu beziffern, die nicht dem gewünschten Produkt zu Gute kommen (z.B. Verschnitt, Ausschuss, Abfallkomponenten). Dazu sieht die MFKR vor, dass sämtliche Kosten eines Prozesses verursachungsgerecht dem Produkt oder dem Nicht-Produkt zugeordnet werden (Produkt-Output und Non-Produkt Output). (vgl. Kapitel 3.2.4)

$$C_{PO_i} = ratio_{PO_i} \cdot C_{Manufacturing,i} \quad \text{mit: } ratio_{PO_i} = \frac{PO_i}{NPO_i + PO_i} \quad (6.10)$$

$$C_{NPO_i} = ratio_{NPO_i} \cdot C_{Manufacturing,i} \quad \text{mit: } ratio_{NPO_i} = \frac{NPO_i}{NPO_i + PO_i} \quad (6.11)$$

Um die Kosten, die durch den Produkt-Output (C_{PO_i}) sowie den Materialverlust verursacht worden sind, zu berechnen (C_{NPO_i}), wird gemäß DIN EN ISO 14051:2011 ein Materialverteilungsschlüssel herangezogen, welcher das Verhältnis der Materialeinsätze darstellt, die in Produkte ($ratio_{PO_i}$) oder Materialverluste ($ratio_{NPO_i}$) eingehen (vgl. Formeln (6.10) und (6.11)). Dafür müssen alle Materialflüsse (PO_i und NPO_i) in eine einheitliche Maßeinheit umgerechnet werden. Im vorliegenden Modell wird die Maßeinheit Masse (Kilogramm) verwendet. Zur Vereinheitlichung werden daher sämtliche Materialflüsse, die in Liter und Stück angegeben wurden (vgl. Kapitel 6.3.1), in Kilogramm umgerechnet (vgl. Formeln (6.12) und (6.13)).

$$PO_{i} = \sum_{r \in R} MPO_{i,r}^{kg} + \sum_{r \in R} (MPO_{i,r}^{1} \cdot \rho_{i,r}) + \sum_{r \in R} (MPO_{i,r}^{Stk} \cdot si_{i,r})$$
(6.12)

$$NPO_{i} = \sum_{s \in S} MS_{i,s}^{kg} + \sum_{s \in S} (MS_{i,s}^{l} \cdot \rho_{i,s}) + \sum_{s \in S} (MS_{i,s}^{Stk} \cdot si_{i,s}) + \sum_{r \in R} (RJ_{i,r}^{Stk} \cdot si_{i,r}) + B_{i}$$
(6.13)

 $MPO_{i,r}^{\text{kg}}$, $MPO_{i,r}^{\text{l}}$ und $MPO_{i,r}^{\text{Stk}}$ geben den Primäroutput auf Basis des Materials r in Prozess i an. Die hochgestellten Einheiten([kg], [I] und [Stück]) beschreiben dabei jeweils die Einheiten des Primär- oder Sekundäroutputs. Analog stehen $MS_{i,s}^{\text{kg}}$, $MS_{i,s}^{\text{l}}$ und $MS_{i,s}^{\text{Stk}}$ für die Sekundäroutputs in Prozess i. $RJ_{i,r}^{\text{Stk}}$ beziffert Produktausschuss [in Stück] des Prozesses i, der aus Material r besteht. B_i sind die in Kapitel 6.3.1 bilanzierten THG-Emissionen des Prozesses i, die bereits in kg vorliegen (kgCO₂e). Die Umrechnung von Materialflüssen, die in Litern eingetragen wurden, erfolgt auf Basis der Dichte des Materials ($\rho_{i,r}$ oder $\rho_{i,s}$) aus dem der Primär- bzw. Sekundäroutput des Prozess i besteht. Entsprechend werden $si_{i,r}$ und $si_{i,s}$ verwendet, um Stückgut in Masse umzurechnen [kg/Stück].

6.3.2.1 Materialkosten

Materialkosten sind gemäß ISO Norm 14051 Kosten für einen Stoff, der in eine Mengenstelle gelangt und/oder diese verlässt (vgl. Kapitel 3.2.4.2). Materialkosten enthalten daher die Kosten aller stofflichen Input- und Outputfaktoren, die bereits zur Berechnung der THG-Emissionen in Kapitel 6.3.1 berücksichtigt wurden (z.B. Menge von Material r von Lieferant f für Prozess i (M_{i,r_f}) oder Menge des KSS k für Prozess i ($M_{i,k}$)). c_{r_f} gibt die Kosten des Materials r von Lieferant f an. Analog steht c_k für die Kosten der Bereitstellung des eingesetzten KSS k.

$$MC_{i} = \sum_{r \in R} \sum_{f \in F} M_{i,r_{f}} \cdot c_{r_{f}} + \sum_{k \in K} M_{i,k} \cdot c_{k} + \sum_{s \in S; \ e_{i,s} = 2} (MS_{i,s} \cdot c_{i,s}^{MS,2} + RJ_{i,s} \cdot c_{i,s}^{RJ,2}) + \sum_{j \in J} \left(\sum_{s \in S; \ e_{i,s} = 1} (MS_{i,j,s} \cdot c_{i,s}^{MS,1} + RJ_{i,j,s} + c_{i,s}^{RJ,1}) \right)$$
(6.14)

Durch die Berücksichtigung von Materialkreisläufen im Sinne der Kreislaufwirtschaft zählen auch die Kosten für intern weiterverwendete, recycelte oder wiederaufbereitete Sekundäroutputs (Materialien/Werkstoffe und KSS) sowie Ausschussteile zu den Materialkosten, wenn diese als Inputmaterial in den Prozess *i* eingehen. Diesbezüglich wird unterschieden, ob der Sekundäroutput bzw. der Ausschuss direkt im Prozess i wiederverwendet werden kann ($e_{i,s}$ =2) oder ob der Sekundäroutput zuvor einen Recyclingprozess j durchläuft und wieder als Input in Prozess i eingespeist wird ($e_{i,s}$ =1). Dabei dient $e_{i,s} \in \{1; 2; 3\}$ als Entscheidungsvariable (1 =*Verwendung nach Recycling;* 2 = Verwendung ohne Recycling; <math>3 =Entsorgung)⁶. Des Weiteren ist definiert, dass alle Materialien r und KSS k als Sekundäroutputs *s* anfallen können ($(r \in R \land k \in K) \sqsubseteq (s \in S)$). Im Fall der Weiterverwendung ohne vorheriges Recycling (e_{is} =2) steht MS_{is} für die Menge an Sekundäroutput s, der in Prozess i direkt wiederverwendet wird. $c_{is}^{MS,2}$ gibt den damit verbundenen Kostensatz an. Gleichermaßen steht RJ_{is} für die Menge an Ausschussteilen auf Basis des Sekundäroutputs s, die als Input zurück in den Prozess *i* geführt werden. $c_{is}^{RJ,2}$ gibt den entsprechenden Kostensatz zur direkten Weiterverwendung des Ausschusses an. Im Fall von

⁶ Fall 3 ist relevant für die Kosten des Abfallmanagements vgl. Kapitel 6.3.2.4.

internem Recycling ($e_{i,s}$ =1) beschreibt ($MS_{i,j,s}$) die in Prozess *i* eingesetzte Menge des in Recyclingprozess *j* recycelten Sekundäroutputs *s* und $c_{i,s}^{MS,1}$ den Kostensatz für das Recycling des Sekundäroutputs *s*. Analog bezeichnet $RJ_{i,j,s}$ die Menge an Ausschussteilen, die in *j* recycelt werden und dem Prozess *i* daraufhin wieder zugeführt werden. Mit $c_{i,s}^{RJ,1}$ wird der damit in Zusammenhang stehende Kostensatz definiert.

6.3.2.2 Energiekosten

Nach DIN EN ISO 14051:2011 sind Energiekosten Kosten für Elektrizität, Treibstoffe, Dampf, Wärme, Druckluft und weitere ähnliche Medien. Entsprechend setzen sich die Energiekosten eines Prozesses i (EC_i) zum einen aus den landesspezifischen Kosten für elektrische Energie, thermische Energie sowie Energieträger zusammen und zum anderen aus den Kosten für verwendete Druckluft (vgl. Formel (6.15)). Dazu gibt $E_{i,m,e,l}$, identisch zur THG-Berechnung (vgl. Formel (6.3)), den Energiebedarf des Energietyps eaus Herkunftsland l für Maschine m in Prozess i an [kWh]. $c_{e,l}$ beziffert die zugehörigen Kosten zur Bereitstellung des Energietyps e aus Land l. Gleichermaßen definiert $D_{i,m,p}$ die benötigte Menge an Druckluft einer Maschine m in Prozess i mit dem Druck p und c_p die zugehörigen Kosten der Bereitstellung der Druckluft mit Druck p.

$$EC_{i} = \sum_{m \in M} \left(\sum_{e \in E} \sum_{l \in L} (E_{i,m,e,l} \cdot c_{e,l}) + \sum_{p \in P} (D_{i,m,p} \cdot c_{p}) \right)$$
(6.15)

6.3.2.3 Systemkosten

Alle Kosten, die infolge der innerbetrieblichen Handhabung von Materialflüssen anfallen, mit Ausnahme der Materialkosten, Energiekosten und Abfallmanagementkosten, werden Systemkosten (SC_i) genannt (DIN EN ISO 14051:2011). Sie setzen sich somit aus Maschinenkosten, den innerbetrieblichen Transportkosten und Lagerkosten für den Materialfluss zusammen. Zur Berechnung der Maschinenkosten gibt $mr_{i,m}$ den Maschinenstundensatz der Maschine m in Prozess i an $[\notin/h]$ und $d_{i,m}$ die Arbeitszeit der Maschine [h]. Die Transport- und Lagerkosten hängen sowohl von den benötigten Mengen an Material und KSS in Prozess i ($M_{i,r}$ bzw. $M_{i,k}$) ab als auch von den Transportkostensätzen ($c_{Tp_{i,r}}$ und $c_{Tp_{i,k}}$) und Lagerhaltungskostensätzen ($c_{Wh_{i,r}}$ und $c_{Wh_{i,k}}$) (vgl. Formel (6.16)).

$$SC_{i} = \sum_{m \in M} (mr_{LCC_{i,m}} \cdot d_{i,m}) + \sum_{r \in R} M_{i,r} \cdot (c_{Tp_{i,r}} + c_{Wh_{i,r}}) + \sum_{k \in K} M_{i,k} \cdot (c_{Tp_{i,k}} + c_{Wh_{i,k}})$$
(6.16)

Der Maschinenstundensatz $mr_{LCC_{im}}$ für Maschine m in Prozess i wird in dieser Arbeit auf Basis der Lebenszykluskosten der Maschine berechnet und basiert auf dem Net Present Life-Cycle Costs Modell von Bornschlegl et al. (2015). Demnach bestehen die Lebenszyklusmaschinenkosten aus Anschaffungskosten (I_m), Kosten für Inbetriebnahme und Training (CT_m), laufenden Kosten ($O_{i,m,t}$), Instandhaltungskosten inklusive der Ersatzteile ($MT_{m,t}$), und zusätzlichen Kosten $(A_{m,t})$ wie zum Beispiel die Entsorgung der Maschine am Ende des Lebenszyklus (Bornschlegl et al. 2015). Der Index t ($t \in T_m$) gibt das jeweilige Jahr an, in dem die Kosten angefallen sind und endet mit dem letzten Betriebsjahr T der Maschine m. Da Maschinenkosten somit überwiegend über den gesamten Lebenszyklus anfallen, muss auch die entsprechende dynamische Veränderung des Geldwerts in Betracht gezogen werden. Dazu integrierten Bornschlegl et al. (2015) und auch Autoren (z.B. Denkena et al. 2010) die Kapitalwertmethode in ihr Lebenszyklusmodell. Bei der Kapitalwertmethode werden die Kosten, die in der Zukunft anfallen, diskontiert, um den Barwert zu errechnen (Becker 2016). Daran angelehnt wird auch in diesem Modell die Kapitalwertmethode in das Lebenszyklusmodell zur Berechnung des Maschinenstundensatzes aufgenommen. Die Variable z gibt dabei den Diskontierungszinsatz an, mit dem abgezinst wird. Die gesamten Lebenszykluskosten einer Maschine m in Prozess i ergeben sich gemäß Formel (6.17).

$$LCC_{i,m} = I_m + CT_m + \sum_{t=1}^{T_m} \left(\frac{A_{m,t}}{(1+z)^t} + \frac{O_{i,m,t} + MT_{m,t}}{(1+z)^t} \right)$$
(6.17)

Die Lebenszykluskosten der Maschine werden dann auf den Stundensatz heruntergebrochen. Hierbei wird auch die Auslastung der Maschine (u_m) berücksichtigt. Je geringer die Auslastung der Maschine, desto höher sind die Kosten pro Outputeinheit, durch die dann stärker gewichteten Fixkosten. Deshalb gilt zu beachten, dass die laufenden Kosten $(O_{i,m,t})$ und die Instandhaltungskosten $(M_{m,t})$ variable Kosten sind. Fixe Kosten ergeben sich aus den zusätzlichen Kosten $(A_{m,t})$, den Anschaffungskosten (I_m) sowie den Kosten für die Inbetriebnahme der Maschine (CT_m) . Damit ergibt sich in Anlehnung an Fischer (2008) die Formel (6.18) zur Berechnung des lebenszyklusorientierten Maschinenstundensatzes in [\notin /Stunde]. Die Variable d definiert die Anzahl der angenommenen Arbeitstage pro Jahr und hdie angenommene, durchschnittliche Anzahl an Arbeitsstunden pro Tag.

$$mr_{LCC_{i,m}} = \frac{I_m + CT_m + \sum_{t=1}^{T_m} \frac{A_{m,t}}{(1+z)^t}}{T_m * d * h * u_m} + \frac{\sum_{t=1}^{T_m} \frac{O_{i,m,t} + MT_{m,t}}{(1+z)^t}}{T_m * d * h}$$
(6.18)

6.3.2.4 Abfallmanagementkosten

Die Abfallmanagementkosten umfassen nach DIN EN ISO 14051:2011 die Kosten, die in einer Mengenstelle durch den Umgang mit Materialverlusten entstehen. In diesem Modell beziehen sich diese Kosten auf die Handhabung des Sekundäroutputs ($MS_{i,s}$) und des Ausschusses ($RJ_{i,s}$) eines Prozesses *i*. Hier steht dabei vor allem die Entsorgung von Sekundäroutput und Ausschuss im Vordergrund ($e_{i,s} = 3$, Abfallbeseitigung/Entsorgung). Unter Entsorgung werden alle Aufwände erfasst, die zur Beseitigung der nicht mehr innerbetrieblich nutzbaren Sekundäroutputs und Produktionsausschüsse beitragen. Dies umfasst Deponierungs-/Entsorgungsgebühren für verschmutzte KSS oder auch Kosten durch den Aufwand des Sammelns und Sortierens von Schrotten, um diese später an ein Recyclingunternehmen verkaufen zu können.⁷ Die Berechnung der Abfallmanagementkosten erfolgt nach Formel (6.19):

$$WC_{i} = \sum_{s \in S: \ e_{i,s} = 3} \left[MS_{i,s} \cdot \left(c_{D_{s}}^{\text{MS},3} + c_{Tp_{i,s}} + c_{Wh_{i,s}} \right) + C_{WHND_{i,s}}^{\text{MS},3} \right] \\ + \left[RJ_{i,s} \cdot \left(c_{D_{s}}^{\text{RJ},3} + c_{Tp_{i,s}}^{\text{RJ},3} + c_{Wh_{i,s}}^{\text{RJ},3} \right) + C_{WHND_{i,s}}^{\text{RJ},3} \right]$$
(6.19)

Darin stehen $c_{D_s}^{MS,3}$ und $c_{D_s}^{RJ,3}$ für die Entsorgungsgebühr des Sekundäroutputs (MS) oder des Produktionsausschusses (RJ). $c_{Tp_{i,s}}$ und $c_{Wh_{i,s}}$ sind die Kostensätze, die durch innerbetrieblichen Transport (Tp) und Lagerhaltung (Wh) für den Sekundäroutput s aus Prozess i anfallen. Ebenso geben $c_{Tp_{i,s}}^{RJ,3}$ und $c_{Wh_{i,s}}^{RJ,3}$ die Kostensätze für den Transport und die Lagerhaltung des Produktionsausschusses an. $C_{WHND_{i,s}}^{MS,3}$ und $C_{WHND_{i,s}}^{RJ,3}$ fassen darüber hinaus die

⁷ Mögliche Erlöse aus dem Schrottverkauf würden in einer separaten Erlösrechnung betrachtet werden.

Personal- und/oder Maschinenkosten für das Sammeln und Sortieren des in Prozess *i* entstandenen Sekundäroutputs oder Ausschusses *s* zusammen.

6.3.2.5 THG-Emissionskosten

Zudem kann im Modell ein bspw. politisch festgesetzter oder ein unternehmensinterner, intrinsisch festgelegter THG-Kostensatz c_{GHG} integriert werden. Dieser kann mit den in Kapitel 6.3.1 berechneten prozessspezifischen THG-Emissionen B_i multipliziert werden (vgl. Formel (6.20)), um die THG-Emissionskosten eines Prozesses i (CB_i) zu erhalten.

$$CB_i = B_i \cdot c_{GHG} \tag{6.20}$$

6.4 Anwendung von Systemmodul B am Beispiel eines Pkw-Bauteils

Zur Anwendung des entwickelten Bewertungsmoduls zur Materialverarbeitung (Systemmodul B) wurde eine Fallstudie am Beispiel eines deutschen Automobilzulieferers durchgeführt. Als Fallstudienbauteil wurde eine Fahrzeugkomponente⁸ ausgewählt, die in jedem Pkw verbaut wird und sowohl aus Stahl als auch aus Aluminium hergestellt werden kann. Zunächst wird der Fertigungsprozess des Bauteils vorgestellt und die erforderliche Datenbasis, die im Bewertungsmodell verwendet wird (Kapitel 6.4.1). In Kapitel 6.4.2 werden Annahmen definiert, die zur Durchführung der Fallstudie getroffen werden müssen. Die Präsentation und Diskussion der Fallstudienergebnisse erfolgt in Kapitel 6.4.3.

⁸ Komponente und Bauteil werden im Folgenden synonym verwendet.

6.4.1 Fertigungsprozess und Datengrundlage

Der Fertigungsprozess des ausgewählten Pkw-Bauteils erfolgt in sieben Prozessschritten, die gemäß der MFKR als Mengenstellen definiert werden (vgl. Kapitel 3.2.4). Zu Beginn wird der Rohstahl durch eine Stanzpresse umgeformt (1.), anschließend gereinigt (2.) und dann an einer Drehmaschine (3.) weiterbearbeitet. Im vierten Prozessschritt wird das gedrehte Teil rolliert (4.), um die Festigkeit und Oberflächengüte zu verbessern. Um die geforderte Maß- und Formgenauigkeit zu erzielen, wird das Bauteil im fünften Prozessschritt durch eine Schleifmaschine (5.) bearbeitet. Danach wird es gereinigt (6.) und im letzten Prozessschritt nitriert (7.), um die Oberfläche zu härten. Die sieben Prozessschritte sind detailliert in Abbildung 6.5 dargestellt. Der Abbildung sind auch die Ein- und Ausgangsströme und zugrundeliegenden Daten eines jeden Prozessschritts zu entnehmen. Zur Erklärung der Abbildung wird exemplarisch Mengenstelle 7 (Fertigungsprozess Nitrieren) erläutert. Mengenstelle 7 zeigt, dass in die Mengenstelle ein gereinigtes Teil eingeht und dieses Teil diese Mengenstelle als fertiges Bauteil wieder verlässt. Für den Fertigungsprozess dieser Mengenstelle werden 0,224 kWh Erdgas und 23,81 | Ammoniak sowie 21,98 | Stickstoff benötigt. Zudem werden beim Nitrierprozess 0,0018 m³ CO₂ pro Bauteil direkt emittiert (entspricht 0,00362 kgCO₂ pro Bauteil).



Abbildung 6.5: Stoffströme entlang des Fertigungsprozesses des Fallstudienbauteils

Weitere, vor allem ökonomisch relevante Eingangsdaten zum Herstellungsprozess sind in Tabelle 6.1 ersichtlich. Die Daten stammen überwiegend vom Fallstudienunternehmen (Datenstand 2018) und werden in diesem Fall als Primärdaten bezeichnet.

Tabelle 6.2 und Tabelle 6.3 komplettieren die für die Modellierung benötigte Datenbasis hinsichtlich der Materialdichten und des GWPs der für die Modellierung relevanten Roh-, Hilfs- und Betriebsstoffe (basierend teilweise auf Systemmodul A dieser Arbeit und auf Ecoinvent V2.2 (2007-2013).

Tabelle 6.1:	Ökonomische Daten zum Fertigungsprozess des Fallstudienbauteils (Region:
	Deutschland, Datenstand: 2018)

Prozess/Mengenstelle	Ökonomische Daten	Quelle	
1. Stanzen	Maschinenstundensatz: 270 [€/h]	Primärdaten	
	(inkl. Kosten für Schmieröl)		
	Stahlpreis: 569 [€/t] ⁹	Research concepts Ltd. (2018)	
	Aluminiumpreis: 1.770 [€/t] ¹⁰	Adeos Media GmbH (2018)	
2. Vorreinigen	Maschinenstundensatz: 45 [€/h]	Primärdaten	
	Reinigungsmittel: 3,5 [€/l]	Primärdaten	
	Wasser: 2,25 [€/m³]	Stadtwerke Karlsruhe (2018b)	
	Entsorgung Öl-Wasser-Reinigungs-	Primärdaten	
	mittel-Gemisch: 250 [€/m³]		
3. Drehen	Maschinenstundensatz: 250 [€/h]	Primärdaten	
4. Rollieren	Maschinenstundensatz: 100 [€/h]	Primärdaten	
5. Schleifen	Maschinenstundensatz: 220 [€/h]	Primärdaten	
	Wasser: 2,25 [€/m³]	Stadtwerke Karlsruhe (2018b)	
	Emulsion: 3 [€/I]	Primärdaten	
	Entsorgung Emulsion-Wasser-Ge-	Primärdaten	
	misch: 250 [€/m³]		
6. Reinigen	Maschinenstundensatz: 45 [€/h]	Primärdaten	
	Reinigungsmittel: 3,5 [€/l]	Primärdaten	
	Wasser: 2,25 [€/m³]	Stadtwerke Karlsruhe (2018b)	
	Entsorgung Öl-Wasser-Reinigungs-	Primärdaten	
	mittel-Gemisch: 250 [€/m³]		
7. Nitrieren	Maschinenstundensatz: 350 [€/h]	Primärdaten	
	(inkl. Kosten für Ammoniak und		
	Stickstoff)		

⁹ Warmgewalztes Band kostete im 2. Quartal 2018 durchschnittlich 569,04 € pro Tonne (Research concepts Ltd. 2018).

¹⁰ Aluminiumpreis vom 22.08.2018 (Adeos Media GmbH 2018).

Roh-, Hilfs- und Be- triebsstoffe	Annahmen/ Beschreibung	Dichte [g/cm³]	Quelle
Schmieröl	Umformöl 60 (Tigrol)	0,89	Lubes Schmierstoff GmbH (2018)
Wasser	25°C	0,99705	IFA (2012)
Reinigungsmittel	Benzol, 20°C	0,88	IFA (2016)
Emulsion	Dichte von Schmieröl	0,89	Lubes Schmierstoff GmbH (2018)
Ammoniak	Wasserfrei, 15°C	0,0007198	IFA (2013)
Stickstoff	Normaltemperatur	0,0012504	IFA (2015)
Öl-Wasser-Reini- gungsmittel-Gemisch	Mischungsverhältnis: 3:10:2	0,96	Eigene Berechnung
Emulsion-Wasser- Gemisch	Mischungsverhältnis: 3:20	0,981	Eigene Berechnung

Tabelle 6.2:	Dichte der verwendeten Roh-, Hilfs- und Betriebsstoffe
1000110 0.2.	Dicitic del Verwendeten non , mis dia Detriebsstorie

Tabelle 6.3: GWP der verwendeten Roh-, Hilfs- und Betriebsstoffe

Roh-, Hilfs- und Betriebs- stoffe	Beschreibung/Annahmen (zur Zuordnung in Ecoin- vent-Datenbank)	GWP100 [kgCO₂e/kg]	Quelle
Sekundärstahl DD13	Sekundärstahl DD13 "Supplier Stahl" ¹¹ (geheim		Teilmodul A2 ¹²
Aluminium AIMg3	"Supplier Alu"13 (geheim)	11,5540	Teilmodul A3 ¹⁴
Stickstoff	-	0,4336	Ecoinvent V2.2
Ammoniak	-	2,0974	Ecoinvent V2.2
Reinigungsmittel	Solvent	2,4340	Ecoinvent V2.2
Emulsion	Lubricant	1,0506	Ecoinvent V2.2
Entsorgung Öl-Wasser-Reini- gungsmittel-Gemisch	Disposal of solvent mix.	1,9839	Ecoinvent V2.2
Entsorgung Emulsion-Wasser- Gemisch	Disposal of waste oil	2,8526	Ecoinvent V2.2

6.4.2 Sonstige Prozessinformationen und Annahmen

Im Schleifprozess (5.) ist nach Herstellerinformationen ein Kühlmittelaufbereitungssystem integriert, dessen Prozesskosten in den oben genannten Daten bereits enthalten sind. Darüber hinaus existiert im Unternehmen kein interner Recyclingprozess, d.h. dass der gesamte Sekundäroutput gesammelt und entsorgt (z.B. Emulsion-Wasser-Gemische) oder gesammelt und verkauft (z.B. Stahlschrott) wird. Den Produktionsausschuss betreffend, wurden keine Angaben vom Hersteller gemacht. Der Ausschuss an Bauteilen (Zwischenprodukte und fertige Teile) ist laut Hersteller so gering, dass dieser in den Berechnungen vernachlässigt werden kann. Da auch manche Kostensätze oder Betriebsinformationen des Automobilzulieferers aus Geheimhaltungsgründen nicht preisgegeben wurden, mussten zusätzliche Annahmen getroffen werden:

- Für die Kostensätze für elektrische Energie wurden 0,14 [€/kWh] und für Gas 0,0524 [€/kWh] angenommen (Stadtwerke Karlsruhe 2018a).
- Interne Transportprozesse und Lagerkosten werden nicht berücksichtigt.
- Für die Stahllieferung wird eine Strecke von ca. 500 km mit dem Lkw zurück gelegt.

¹¹ "Supplier Stahl" ist der Name des Stahlherstellers, von dem das Unternehmen Stahl bezieht, um das Bauteil herzustellen. Der reale Name steht unter Geheimhaltung.

¹² In Kombination mit einem Legierungs-Tool, das der Verfasser dieser Arbeit entwickelt hat, welches aber nicht Inhalt dieser Arbeit ist. Mit dem Legierungstool kann das GWP einer spezifischen Legierung (z.B. DD13, AlMg3) berechnet werden. Für das GWP von Rohstahl verwendet das Legierungs-Tool die Ergebnisse aus Systemmodul A (hier Teilmodul A2: ECCO₂-Steel2er), und für die GWPs der Legierungselemente wird die Ecoinvent Datenbank konsultiert.

¹³ "Supplier Alu" ist der Name des Aluminiumherstellers, von dem das Unternehmen Aluminium bezieht, um das Bauteil herzustellen. Der reale Name steht unter Geheimhaltung. Da der Bauteilhersteller zwei Aluminiumlieferanten hat, wurde von beiden der GWP-Durchschnittswert ermittelt.

¹⁴ Bei der Berechnung des GWPs wurde ein marktüblicher Aluminiumproduktionsmix (von 60 % Primär und 40 % Sekundäraluminium (UBA 2015), Prozessdetails: Aluminium, Gusslegierung) berücksichtigt. Basierend auf Expertengesprächen wurde Primäraluminium hier mit 2/3 gewichtet (ECCO₂-Alu1er) und sortenreiner Schrott mit 1/3 (ECCO₂-Alu2er Remelter). Demnach ergibt sich für Rohaluminium ein GWP von ca. 9,6 kgCO₂e/kg Rohaluminium. Durch das Hinzufügen von Magnesium als Legierungselement berechnet sich gemäß des Legierungstools ein GWP von 11,5540 kgCO₂e/kg AlMg3.

- In den Primärdaten des Herstellers wurde der Maschinenstundensatz nur vollständig angegeben (ohne die Kosten der Bestandteile einzeln aufzuführen). Das oben entwickelte Lebenszykluskostenmodell zur Bestimmung von Maschinenkosten kann daher nicht angewendet werden. Allerdings ist bekannt. dass der Maschinenstundensatz die Kosten für die kalkulatorische Abschreibung der Maschine, das benötigte Personal, die Wartung der Maschine, die benötigte Energie und in einigen Fällen auch die Kosten für die benötigten Roh-, Hilfs- und Betriebsstoffe enthält (vgl. Tabelle 6.1). Die jeweiligen Kostenbestandteile am Maschinenstundensatz bleiben aber unbekannt.
- Wie oben beschrieben, kann das Bauteil auch aus Aluminium gefertigt werden. Die Fertigungskette bleibt nach Informationen des Herstellers identisch und da der Hersteller keine weiteren Informationen für das Aluminiumbauteil zur Verfügung gestellt hat, wird angenommen, dass sämtliche Prozessdaten gleich bleiben. Somit ändert sich nur das Eingangsmaterial (AIMg3 statt DD13). Dies hat zur Folge, dass statt der 0,525 kg Stahl die Aluminiumlegierung AIMg3 mit 0,3 kg in den Stanzprozess eingeht (vgl. Abbildung 6.5). Das fertige Aluminiumbauteil wiegt am Ende 0,188 kg. Zur Abgrenzung wird die Fertigungskette der Stahlversion "Fertigungskette a" und die der Aluminiumversion "Fertigungskette b" genannt. Die THG-Emissionen des Aluminiumlieferanten bestimmen sich gemäß Systemmodul A (vgl. Tabelle 6.3). Für die Transportstrecke werden ebenfalls 500 km angenommen.

6.4.3 Fallstudienergebnisse

Der für die Fallstudie ausgewählte Automobilzulieferer fertigt das Fallstudienbauteil wie beschrieben in zwei verschiedenen Versionen: in einer Stahl- und einer Aluminiumversion. Beide Versionen werden im Rahmen dieser Arbeit mithilfe des Systemmodul B hinsichtlich ihrer Herstellkosten und THG-Emissionen (sowohl cradle-to-gate als auch gate-to-gate) bewertet und verglichen.



Abbildung 6.6: Vergleich der Herstellkosten und (cradle-to-gate) THG-Emissionen zwischen der Stahl- und Aluminiumversion des Fallstudienbauteils

Der Vergleich beider Bauteilversionen zeigt, dass die Aluminiumversion in der Herstellung 0,233 € (24,8 %) teurer ist (1,171 € vs. 0,938 €) (vgl. Abbildung 6.6). Das liegt vor allem daran, dass Aluminium in der Materialbeschaffung deutlich teurer als Stahl ist. Der viel größere Unterschied besteht jedoch im Product Carbon Footprint. So werden für die Bauteilfertigung inklusive der Materialherstellung und des Transports in der Stahlversion 0,780 kgCO₂e/Bauteil und in der Aluminiumversion 3,801 kgCO₂e/Bauteil emittiert. Das heißt, das Aluminiumbauteil ist 24,8 % teurer und hat gleichzeitig einen knapp fünffach (387,3 %) höheren Carbon Footprint (cradle-togate). Die THG-Emissionen der Stahlversion setzen sich aus 0,424 kgCO₂e/Bauteil für die Stahlherstellung (54,4 %), 0,049 kgCO₂e/Bauteil für Materialtransporte (0,063 %) und 0,307 kgCO₂e/Bauteil für die gateto-gate Emissionen der Materialverarbeitung (39,4 %) zusammen. Bei der

Aluminiumversion sind dies 3,466 kgCO₂e/Bauteil für die Aluminiumherstellung (91,2 %), 0,028 kgCO₂e/Bauteil für den Materialtransport (0,74 %) und 0,307 kgCO₂e/Bauteil für die gate-to-gate Emissionen der Materialverarbeitung (8,9 %).

Innerhalb der betrachteten cradle-to-gate Systemgrenze wäre es daher für einen Kunden ökonomisch und ökologisch vorteilhafter die Stahlversion auszuwählen. Ob die Stahlversion jedoch weiterhin vorteilhafter ist, wenn die Systemgrenze um die Nutzungs- und End-of-Life-Phase eines Fahrzeugs erweitert wird, werden die entwickelten Systemmodule C und D zeigen. Das leichtere Gewicht des Aluminiumbauteils (0,188 kg vs. 0,352 kg) trägt zur Gewichtsreduktion des Fahrzeugs bei, wodurch die CO₂-Emissionen in der Nutzungsphase reduziert werden.

Darüber hinaus wertet Systemmodul B die Herstellkosten im Sinne der Materialflusskostenrechnung auch prozessspezifisch aus und stellt diese den gate-to-gate THG-Emissionen gegenüber. Abbildung 6.7 zeigt die Ergebnisse für die Stahlversion des Fallstudienbauteils und Abbildung 6.8 die Ergebnisse der Aluminiumversion.



Abbildung 6.7: Herstellkosten und (gate-to-gate) THG-Emissionen der Fertigung des Fallstudienbauteils auf Stahlbasis (DD13)



Abbildung 6.8: Herstellkosten und (gate-to-gate) THG-Emissionen der Fertigung des Fallstudienbauteils auf Aluminiumbasis (AIMg3)

Größter Kostentreiber bei der Herstellung ist der Stanzprozess mit 45,5 % (0,427 €/kg Primäroutput) in der Stahlversion und 56,4 % (0,66 €/kg Primäroutput) in der Aluminiumversion. Gleichzeitig ist dies auch der Prozess, in dem die meiste Wertschöpfung durch Materialverlust bzw. Non-Produkt Output verloren geht: 0,115 € von 0,427 €, also 26,9 % der Kosten des Stanzprozesses (Stahlversion) bzw. 26,7 % der Kosten des Stanzprozesses der Aluminiumversion gehen nicht in das spätere Produkt ein. Der zweitgrößte Kostentreiber ist der Prozess des Nitrierens, der in der Stahlversion 17,8 % und

in der Aluminiumversion 14,3 % der Herstellkosten ausmacht. Dahinter folgen das Drehen mit 12,7 % (Stahlversion) bzw. 10,2 % (Aluminiumversion) und das Schleifen mit 12,2 % bzw. 9,7 %. Eine untergeordnete Rolle in den Herstellkosten spielen die Prozesse des Rollierens mit 5,1 % (Stahlversion) bzw. 4,1 % (Aluminiumversion) und des Reinigens mit 3,4 % bzw. 2,7 %. Die Herstellkosten belaufen sich ohne Einberechnung des Materialeinkaufs für Stahl oder Aluminium auf 0,64 €/Bauteil (vgl. Abbildung 6.9). Aufgrund der gleichen Fertigungskette sind die gate-to-gate Fertigungskosten hier für beide Bauteilversionen gleich. Für die Stahlvariante des Bauteils entfallen also ca. 32 % der Herstellkosten auf die Stahlbeschaffung. Bei der Aluminiumvariante macht die Beschaffung des Aluminiums sogar ca. 45 % der Herstellkosten aus. Größter Kostentreiber ohne Berücksichtigung der Stahl- und Aluminiumkosten ist dann der Nitrierprozess mit 26 %. Dahinter folgen das Stanzen (20 %), Drehen (19 %), Schleifen (18 %), Rollieren (8 %) und die Reinigungsprozesse (jeweils 5 %).



Abbildung 6.9: Herstellkosten ohne die Kosten der Stahl- oder Aluminiumbeschaffung und (gate-to-gate) THG-Emissionen der Fertigung des Fallstudienbauteils

Die Gegenüberstellung mit den gate-to-gate THG-Emissionen zeigt, dass durch den Nitrierprozess bei weitem die meisten THG emittiert werden (56 %). Den größten Unterschied zwischen Herstellkosten und THG-Emissionen weist der Stanzprozess auf (vgl. Abbildung 6.7 und Abbildung 6.8). Das liegt daran, dass in diesem entsprechend der MFKR zwar die Materialkosten des Stahls bzw. Aluminiums berücksichtigt wurden, die THG-Emissionen der Stahlherstellung jedoch nicht; diese fallen in der Systemgrenze der Stahlherstellung an. In der gate-to-gate Betrachtung der THG-Emissionen fallen daher beim Stanzprozess nur indirekte THG-Emissionen durch die Bereitstellung und Nutzung von elektrischer Energie, Erdgas und Schmiermitteln an (0,035 kgCO₂e/Bauteil s Abbildung 6.9).

6.5 Kritische Würdigung und Ausblick

In diesem Kapitel wurde Systemmodul B vorgestellt, mit dem sowohl THG-Emissionen als auch Herstellkosten entlang spezifischer Wertschöpfungsketten, d.h. lieferanten/werks- und fertigungsspezifisch, quantifiziert und bewertet werden können. Systemmodul B kann Unternehmen der Metallund Kunststoffindustrie bei der ökologischen und ökonomischen Analyse ihrer Fertigungsprozesse sowie bei der strategischen und taktischen Entscheidungsfindung unterstützen. Verbesserungspotenziale können identifiziert sowie Liefer- und Fertigungsketten unter Berücksichtigung von THG-Emissionen wirtschaftlich geplant werden. Methodisch wurden die Bilanzierungsund Managementinstrumente LCA und MFKR miteinander kombiniert, die sich besonders für eine integrierte gate-to-gate- und cradle-to-gate-Betrachtung eignen (vgl. Kapitel 3.2.2).

Dieser kombinierte Ansatz ist methodisch neu und von großem wissenschaftlichen und industriellem Interesse, da eine Integration des LCA mit der MFKR, trotz der hohen Kompatibilität der beiden Verfahren (Viere et al. 2011; Kokubu et al. 2009; Bierer et al. 2015), bisher nur in wenigen Beiträgen durchgeführt wurde (vgl. Kapitel 3.5.3). Der vorliegende Beitrag betritt methodisch Neuland, weil eine Vielzahl an werksspezifischen THG-Emissionen der Materialhersteller/ Zulieferer berechnet werden können (Systemmodul A) und in das kombinierte LCA und MFKR Modell (Systemmodul B) zur
vergleichenden Analyse hinsichtlich der folgenden Fertigungskette integriert werden können (vgl. Kapitel 6.4.3). In Zusammenhang mit der Modellierung der THG-Emissionen entlang der Verarbeitungsprozesse lassen sich die THG-Emissionen eines Produkts dadurch wertschöpfungskettenspezifisch berechnen. Durch die Verwendung der MFKR können Kostentreiber identifiziert werden. Die Allokation der Kosten auf Produkt Output und Non-Produkt Output ermöglicht Aussagen zur Ressourceneffizienz zu treffen und Ineffizienzen aufzudecken. Weiterführend wurde die MFKR im vorliegenden Beitrag methodisch um die Lebenszykluskostenrechnung (LCC) ergänzt, um Maschinenkosten lebenszyklusbasiert abzubilden. Aufgrund der Komplementarität der MFKR und des LCAs konnte im Rahmen der Integration beider Methoden eine gemeinsame Datenbasis verwendet werden, sodass Prozesse nicht doppelt modelliert und Daten nicht doppelt eingetragen werden müssen.

Nachteilig für den Modellanwender ist jedoch der sehr hohe Datenbeschaffungsaufwand. Ein Teil der benötigten Daten ist zwar im Modell anhand einer durchgeführten Fallstudie und anhand von Ecoinvent V.2.2 vorkonfiguriert: zum Beispiel die Beschaffungskosten und die GWPs von Roh-, Hilfsund Betriebskosten (z.B. Schmieröl) oder die GWPs für Transportmittel wie Lkws, Schiffe oder Güterzüge, aber diese Kosten und GWPs entsprechen nur Durchschnittswerten. Damit das Modell möglichst präzise Ergebnisse liefert, müssen solche Durchschnittswerte durch Primärdaten ersetzt werden (z.B. tatsächliche Beschaffungskosten von Schmieröl). Bezüglich der vorkonfigurierten GWP-Daten (z.B. für Schmieröl) ist außerdem von Nachteil, dass diese regelmäßig aktualisiert werden müssen, um den PCF stets so präzise wie möglich bilanzieren zu können. Ggf. ist zukünftig eine Kopplung an eine LCIA/LCI-Datenbank denkbar, sodass die Aktualisierung der GWP-Daten automatisch erfolgen kann. Zusätzlich ist eine Aktualisierung der Lieferantendatenbank von Systemmodul B erforderlich, sobald anhand von Systemmodul A neue Lieferanten bewertet wurden oder für bestehende Lieferanten eine Neubewertung durchgeführt wurde. Auch diese Aktualisierung könnte in weiteren Arbeiten automatisiert werden. Außerdem ist eine präzise Berechnung der Herstellkosten oder des PCF mit Systemmodul B nur möglich, wenn der Anwender sämtliche Inputs und Outputs des zu bewertenden Fertigungsprozesses kennt und diese quantifizieren kann. Ebenso muss der Anwender Kenntnis von den Kosten des eingesetzten Personals und der verwendeten Maschinen (inkl. Energiekosten) haben. Der große Datenbedarf und Datenbeschaffungsaufwand von Systemmodul B führte daher zu Datenlücken in der durchgeführten Fallstudie. So musste in der Fallstudie die Annahme getroffen werden, dass die fertigungsbedingten gate-to-gate THG-Emissionen und Kosten des Stahl- und Aluminiumbauteils identisch sind. Dies ist jedoch infrage zu stellen, da sich die Materialkennwerte der beiden Materialien unterscheiden und bspw. die Umformbarkeit eines Materials Einfluss auf den zur Umformung benötigten Energieaufwand hat. Zudem musste aufgrund fehlender Daten angenommen werden, dass alle Materialhersteller ihr Material zum gleichen Preis verkaufen. So konnten nur Preisunterschiede zwischen Stahl und Aluminium, aber nicht zwischen den jeweiligen Stahl- und Aluminiumherstellern berücksichtigt werden. Die berechneten Unterschiede zwischen den Herstellkosten der Stahl- und der Aluminiumvariante des Bauteils könnten daher noch größer sein.

Systemmodul B ermöglicht die Analyse der THG-Effizienz und Herstellkosten verschiedener Fertigungsketten zur Fertigung eines identischen Produkts. Umstellungskosten, die sich aus einer Umstrukturierung der Produktionslinie ergäben, werden bislang nicht betrachtet. Zukünftig könnte die Berechnung von Umstellungskosten zwischen einem Status quo und einer alternativen Fertigungskette implementiert werden. Diese Umstellungskosten könnten als weiteres Entscheidungskriterium in die Wertschöpfungskettenplanung eingehen oder auf das Produkt umgelegt, und den Herstellkosten zugerechnet werden.

Überdies könnte Systemmodul B dahingehend erweitert werden, dass dem Non-Produkt Output auch der Energieverlust, in Form von Wärmeverlust oder Maschinenvibrationen, zugerechnet wird. Das wäre allerdings nur dann

möglich, wenn die physikalischen Mengen des Energieverlusts bekannt sind. Im Rahmen dieser Studie gab es keine Möglichkeit, diese nach Schmidt et al. (2015) zu quantifizieren. Hier stellt sich allerdings sowohl die Frage nach einer sinnvollen Maßeinheit für die verschiedenen Energieverluste also auch nach der Zuordnung zu Produkt und Non-Produkt Output. (Schmidt et al. 2015) Des Weiteren könnten neben der Wirkungskategorie GWP noch weitere Wirkungskategorien der Ökobilanzierung in das Modell implementiert werden, um weitere ökologische Auswirkungen in die Entscheidungsfindung mit aufzunehmen. Sinnvoll wäre auch eine zukünftige Ergänzung des Modells um eine automatisierte Sensitivitätsanalyse aller Parameter. So könnten noch aussagekräftigere Analysen zu den Kostentreibern und den Non-Produkt Outputs durchgeführt werden. Eine nützliche Erweiterung wäre außerdem die Implementierung einer separaten Erlösrechnung in die Materialflusskostenrechnung. Erlösströme aus internem Recycling oder aus Schrottverkäufen könnten dann den entsprechenden Kosten gegenüberstellt werden. Auf diese Weise ließen sich laut Schrack (2016) auch die Vorteile der Nutzung von Reduzenda¹⁵ abbilden, damit auch Unternehmen der Reduktionswirtschaft¹⁶ sinnvoll mit der MFKR bewertet werden können.¹⁷

¹⁵ Reduzenda charakterisieren sogenannte Übel wie Abfälle oder Abwässer aus vorgelagerten Wertschöpfungsstufen, die inputseitig in das betrachtete Produktionssystem eingehen und sich dadurch auszeichnen, dass ihr Einsatz nicht mit Aufwänden, sondern Erträgen verbunden ist Dyckhoff 1992; Prammer 2009 (vgl. Kapitel 3.5.3).

¹⁶ Der Begriff Reduktionswirtschaft umfasst nach Schrack (2016) sämtliche Betriebe und Maßnahmen zur Behandlung, Verwertung und Entsorgung von sogenanntem Übeloutput, das sind Abfälle, Abwässer und Emissionen.

¹⁷ Schrack (2016) stellt verschiedene Möglichkeiten zum Einbezug von Erlösen in die Materialflusskostenrechnung vor; aber auch Schmidt et al. (2015) behandeln dieses Thema.

7 Systemmodul C: THG-Emissionen von Produkten in Nutzungs- und End-of-Life-Phase

Das folgende Kapitel beschreibt das entwickelte Systemmodul C, mit dem die THG-Emissionen der Nutzungs- und End-of-Life-Phase von Produkten materialspezifisch bestimmt werden können. Systemmodul C ist speziell für Produkte konzipiert, die in Kraftfahrzeugen genutzt werden, da die Nutzungsphase für solche Produkte (Pkw-Bauteile) eine hohe Komplexität in der Bewertung aufweist. In Kapitel 7.1 wird zunächst ein Überblick über die Zielsetzung des Systemmoduls C gegeben. Daran anschließend erfolgt in Kapitel 7.2 eine Definition und Erläuterung der wichtigsten Komponenten des zu untersuchenden Systems. In Kapitel 7.3 wird die Nutzungsphase modelliert und beschrieben, welche Daten für die Berechnung verwendet werden. Auf identische Weise wird in Kapitel 7.4 die Berechnung der End-of-Life-Phase geschildert. Im Anschluss wird Systemmodul C in Kapitel 7.5 am Beispiel des deutschen Fahrzeugmarkts angewendet und die Ergebnisse präsentiert. In Kapitel 7.6 werden die Annahmen und Berechnungslogiken des Systemmoduls C kritisch gewürdigt und ein Ausblick auf zukünftige Forschungs- und Entwicklungspotenziale gegeben.

7.1 Zielsetzung

Ziel von "Systemmodul C" ist entsprechend der Modellanforderungen in Kapitel 4.1 die zuvor durchgeführten cradle-to-gate Berechnungen um die Nutzungs- und End-of-Life (EoL)-Phase von Produkten zu erweitern, damit Material- und Fertigungsentscheidungen auf einer cradle-to-grave Basis getroffen werden können. Die Nutzungs- und Entsorgungsphase eines Produkts bezieht sich in diesem Modell auf die Nutzungsphase und das Lebensende (EoL) von Fahrzeugkomponenten¹ in Kraftfahrzeugen. Systemmodul C soll es ermöglichen, Bauteile mit verschiedenen Materialien aus ökologischer Sicht zu bewerten, um damit beispielsweise den Materialentscheidungsprozess für ein Bauteil transparent und objektiv bewerten zu können. Dabei soll das Modell möglichst generisch aufgebaut sein sowie verschiedene Szenarien (z.B. Laufleistung des Fahrzeugs [km], Antriebstechnologien oder auch Fahrzeugsegmente) berücksichtigen können.

7.2 Definition des Untersuchungsrahmens

7.2.1 Wartungsphase

In der Literatur herrscht Uneinigkeit darüber, ob Wartungsarbeiten (z.B. Reparatur oder Austausch) in die Ökobilanz aufgenommen werden sollten oder nicht. Einige Quellen vernachlässigen diese, weil ihr Beitrag und Einfluss auf das Gesamtergebnis als zu gering angesehen wird (Sullivan et al. 2010). In anderen Arbeiten werden diese als Teil der Nutzungs- oder End-of-Life-Phase betrachtet (Das 2011). Wieder andere Arbeiten betrachten die Wartung sogar als eigenständige Phase mit bis zu 5 % Anteil am gesamten Lebenszyklus (Kim et al. 2003). Ob und in welcher Häufigkeit Wartungsarbeiten anfallen, ist dabei sehr stark vom jeweiligen Bauteil abhängig. Um die Lebenszeit von Bauteilen realitätsnah im Modell abzubilden, müssten spezifische Bauteilanalysen und Überlebensfunktionen aufgestellt werden (Mayyas et al. 2012). Aus Mangel an Daten und aus Komplexitätsgründen werden jedoch häufig Vereinfachungen genutzt. Mayyas et al. (2012) kalkulieren zum Beispiel mit einem Aufschlag in Höhe von 1 % der gesamten

¹ Der Begriff Fahrzeugkomponente wird weiterhin synonym für Fahrzeugteil/Bauteil verwendet.

Energie bzw. Emissionen. Für die Fallstudie der vorliegenden Arbeit liegen jedoch keine bauteilspezifischen Lebenserwartungen vor. Da bisherige Ergebnisse in der Literatur nur einen sehr geringen Einfluss der Wartungsphase auf den PCF belegen (Sullivan et al. 2010), werden Wartungsphasen in diesem Modell nicht berücksichtigt.

7.2.2 Fahrzeugsegmente und Antriebstechnologien

Obwohl diesel- und benzinbetriebene Fahrzeuge aktuell und auch in den nächsten Jahren die deutliche Mehrheit im deutschen Fahrzeugbestand stellen werden (IKA 2014), sollen in dieser Arbeit auch die steigenden Quoten der hybriden und elektrischen Fahrzeuge berücksichtigt werden (Kraftfahrtbundesamt 2016). Der Anteil elektrischer und hybrider Fahrzeuge an den Neuzulassungen in Deutschland wird für das Jahr 2020 auf 8,9 % geschätzt (CAM 2020). Zahlreiche internationale Studien betonen die hohe Relevanz, das große Potenzial und die Schlüsselrolle der Elektromobilität, um die THG-Emissionen im Straßenverkehr zu senken und die internationalen Klimaziele zu erreichen (Umweltbundesamt Österreich 2016b).

Im Rahmen der Modellierung von Systemmodul C werden daher die Antriebstechnologien Dieselmotor, Ottomotor (Benziner), PHEV (plug-in hybrid electric vehicle) und BEV (battery electric vehicle) betrachtet (vgl. Modellanforderungen Kapitel 4.1). Betrachtet man die Referenzfahrzeuge der Ökobilanzstudien in der Literatur, so werden dort meist Fahrzeuge der Kompakt- oder Mittelklasse wie bspw. der VW Golf herangezogen. Auch in Deutschland bildet die Kompaktklasse mit knapp 29 % am gesamten Fahrzeugbestand das größte Segment (Kraftfahrtbundesamt 2016). Um die Vergleichbarkeit der Ergebnisse zu anderen Studien und zwischen den verschiedenen Antriebstechnologien in dieser Arbeit zu gewährleisten, wird auch für die vorliegende Arbeit die Nutzungs- und EoL-Phase eines Fahrzeugs aus der Kompaktklasse simuliert.

7.2.3 Bereitstellung der Antriebsenergie

Wird die Nutzungsphase von Elektrofahrzeugen betrachtet, so weist diese keine direkten THG-Emissionen auf (Canals et al. 2016). Um die tatsächlichen Auswirkungen auf die Umwelt zu erfassen, muss daher zusätzlich die energetische Vorkette, also die Stromerzeugung, berücksichtigt werden. Bei Fahrzeugen mit Verbrennungsmotor bilden dagegen die direkten Emissionen den größten Anteil, wobei auch hier zusätzliche Emissionen bei der Kraftstoffherstellung verursacht werden (Ehrenberger et al. 2013). Beim Vergleich verschiedener Antriebstechnologien ist es also entscheidend sowohl direkte als auch indirekte THG-Emissionen zu berücksichtigen, um die Vergleichbarkeit entsprechend zu gewährleisten (Umweltbundesamt Österreich 2016b; Ke et al. 2017). Laut Umweltbundesamt Österreich (2016b) ist der alleinige Vergleich der direkten Emissionen zwischen konventionellen und elektrischen Fahrzeugen sogar als nicht zulässig zu betrachten, und die Systemgrenze muss entsprechend um die Energiebereitstellung erweitert werden. Neben den bereits genannten Arbeiten wird auch in den meisten anderen Arbeiten zur Ökobilanzierung der Antriebstechnologien dieser so genannte well-to-wheel-Ansatz (WtW) gewählt (Mayyas et al. 2012; Canals et al. 2016; Prevedouros und Mitropoulos 2016). Dieser besteht aus den Abschnitten well-to-tank (WtT) und tank-to-wheel (TtW). Letztere TtW-Wirkkette bezieht sich auf die eigentliche Nutzung des Fahrzeugs, während die WtT-Wirkkette alle vorgelagerten Stationen der Kraftstoff- oder Strombereitstellung umfasst. Häufig wird im Zusammenhang der WtT-Emissionen auch von sogenannten indirekten Emissionen gesprochen. Die Systemgrenze der WtT-Wirkkette wird über sämtliche prozessbedingten Emissionen, vom Abbau der benötigten Rohstoffe, deren Weiterverarbeitung und Transport bis zur Bereitstellung beim Kunden definiert. Dazu zählen auch jene vorgelagerten Emissionen, wie sie unter anderem beim Bau von Kraftwerken entstehen (Umweltbundesamt Österreich 2016b).

In Tabelle 7.1 ist für die in Systemmodul C zu bewertenden Antriebstechnologien (vgl. Kapitel 7.2.2) eine Übersicht der THG-Emissionen und des kumulativen Energieaufwands der well-to-tank Wirkkette bis zur Zapfsäule abgebildet. Als Datengrundlage dient die ProBas-Datenbank des deutschen Umweltbundesamtes nach UBA (2015). Als Referenzjahr zur Bewertung wird das Jahr 2020 gewählt. Für Fahrzeuge mit Verbrennungsmotor wird der Datensatz für die Bereitstellung des durchschnittlichen Benzin- bzw. Diesel-Mixes inklusive darin enthaltener bzw. teilweise zugemischter Biokraftstoffe verwendet.²

Tabelle 7.1:	THG-Emissionen und kumulativer Energieaufwand (KEA) bei der Bereitstellung
	der Antriebsenergie in Deutschland (Daten gemäß UBA 2015)

Kenn- zahl	Einheit	Benzin-Mix 2020	Diesel-Mix 2020	Strom-Mix 2020	Strom-Mix 2030
CO ₂	kg/TJ	14.300	10.983	104.450	67.209
CO ₂ e	kg/TJ	15.928	13.308	110.806	71.974
KEA	TJ/TJ	1,31401	1,22036	2,22682	1,77070

BEVs besitzen als Antriebsquelle nur einen Elektromotor und verwenden elektrische Energie, die in diesem Modell auf Basis des deutschen Strommixes des Jahres 2020 erzeugt wird. Neben dem Strommix für das Jahr 2020 soll auch ein geschätzter Strommix für das Jahr 2030 in einem zusätzlichen Szenario betrachtet werden, um die Auswirkungen des Strommix auf die Ergebnisse evaluieren zu können.³ PHEVs besitzen neben einem konventionellen Verbrennungsmotor zusätzlich einen Elektromotor und einen Akkumulator. Der Elektromotor wird in bestimmten Anwendungsfällen, wie zum

² Die genaue Bezeichnung der Datensätze in der ProBas-Datenbank lautet "Benzin-Mix-DE-2020 (inkl. Biokraftstoffe)-Basis" und "Diesel-Mix-DE-2020 (inkl. Biokraftstoffe)-Basis".

³ Die Bezeichnung der Datensätze in der ProBas Datenbank gemäß UBA (2015) lauten "Strom-Bonus-el-mix-DE-2020" und "Strom-Bonus-el-mix-DE-2030". Der geschätzte Strommix für das Jahr 2030 beinhaltet einen größeren Anteil an regenerativ erzeugtem Strom.

Beispiel beim Starten oder Anfahren des Fahrzeugs oder auch im Stadtverkehr genutzt (van Basshuysen und Schäfer 2015). Die Batterie kann zum einen mittels Rekuperation und zum anderen über das öffentliche Stromnetz geladen werden (Umweltbundesamt Österreich 2016b). Folglich müssen bei der THG-Bilanzierung von PHEVs die Wirkkette der Kraftstoffherstellung und der Strommix der Energieerzeugung berücksichtigt werden.

7.2.4 Implementierter Fahrzyklus

Um den Kraftstoff- oder Energieverbrauch von Fahrzeugen quantifizieren und vergleichen zu können, muss eine einheitliche und standardisierte Datengrundlage geschaffen werden. Zu diesem Zweck werden sogenannte Fahrzyklen herangezogen. (Koffler und Rohde-Brandenburger 2010) Fahrzyklen spezifizieren dabei das Geschwindigkeitsprofil, die Beschleunigung und den gewählten Gang in Abhängigkeit von der Zeit (Eberle 2000). Verschiedene Teilzyklen mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten und mit spezifischen Anteilen an Verzögerung, Beschleunigung und Stillstand sollen dabei in der Regel die Abschnitte Stadtverkehr, Landstraße und Autobahn simulieren (Koffler und Rohde-Brandenburger 2010). Zusätzlich sind Rahmenbedingungen wie Verbraucherleistung und Umgebungstemperatur reguliert (HBEFA 2014).

Ein großer Kritikpunkt an der Verwendung von Fahrzyklen ist die geringe Realitätsnähe der so gemessenen Verbrauchsergebnisse. Zahlreiche Studien belegen, dass die realen Fahrsituationen und Verhaltensweisen der Fahrzeugführer in fest definierten Zyklen nur unzureichend abgebildet werden (Canals et al. 2016). So wird oftmals angegeben, dass die Geschwindigkeiten sowohl im Maximum wie auch im Durchschnitt zu niedrig sind. Auch das Fahrverhalten wird im Allgemeinen als dynamischer betrachtet, als es in Fahrzyklen abgebildet wird (ICCT 2016). Unabhängig davon, ob nun Realfahrten, Simulationen oder theoretische Berechnungen durchgeführt werden, schafft die Nutzung von Fahrzyklen dennoch eine Vergleichbarkeit der Ergebnisse einer Bilanzierung der Fahrzeugnutzung (Koffler und Rohde-Brandenburger 2010). Durch das stetige Bestreben, einen möglichst realen Fahrzyklus abzubilden und zu simulieren, wurden im Laufe der Jahre viele verschiedene nationale und internationale Fahrzyklen entwickelt (Canals et al. 2016). In Amerika wird der sogenannte EPA-Testzyklus (Environmental Protection Agency - Testzyklus) verwendet, der durch verschiedene Teilzyklen für bspw. Kaltstarts oder Hochgeschwindigkeitsfahrten in den letzten Jahren stetig ergänzt wurde (U.S. Department of Energy 2016).

In Deutschland wurde bis August 2018 der "Neue Europäische Fahrzyklus" (NEFZ) als Referenzzyklus für Verbrauchs- und Emissionsmessungen verwendet. Die Messung erfolgt über eine Dauer von 1.180 Sekunden bei 4 km Stadt- und 7 km Überlandverkehr mit Durchschnittsgeschwindigkeiten in Höhe von 18,7 km/h (Stadt) bzw. 62,5 km/h (Überland) (ICCT 2016). Im NEFZ sind niedrige Drehzahlen und eine geringe Leistungsabgabe des Motors typisch, da gerade die Beschleunigungsphasen sehr sanft und gleichmäßig verlaufen. Außerdem wird sehr häufig mit konstanter Geschwindigkeit in Kombination mit der Leerlaufdrehzahl des Motors gefahren (Koffler und Rohde-Brandenburger 2010; ICCT 2016). Aus genannten und weiteren Gründen⁴ war der NEFZ bei Experten sehr umstritten und wurde oft kritisiert (ICCT 2016). Zu diesem Zweck wurde der "Worldwide Harmonized Light-Duty Vehicles Test Procedure" (WLTP) als neuer Referenzzyklus eingeführt, der von europäischen, japanischen und indischen Experten gemeinsam entwickelt wurde. Der WLTP löste den NEFZ zum 1. September 2018 ab, sodass dann für alle neuzugelassenen Fahrzeugtypen (Pkw) WLTP Prüfergebnisse vorliegen mussten. (VDA 2017a; Mock et al. 2014) Ein Vergleich der Parameter und Kennwerte zeigt, dass der WLTP deutlich dynamischer durchgeführt wird, wodurch eine Verbrauchs- und Emissionssteigerung im Vergleich zum NEFZ prognostiziert und erwartet wird (IKA 2014).

⁴ Zum Beispiel ist die Messung der NOx-Emissionen in diesem Zyklus besonders kritisch, da im Vergleich zu Realfahrten kaum NOx erzeugt wird (Schmitt et al. 2013).

Während der Entwicklung des Systemmoduls C, fehlten für die Kalkulation mittels WLTP die notwendigen Daten, sodass in dieser Arbeit die Verbrauchswerte gemäß NEFZ als Grundlage dienen. Als Datenquelle der Verbrauchswerte wird der Leitfaden gemäß DAT GmbH et al. (2016) verwendet, der im Auftrag des Verbands der deutschen Automobilindustrie und des Verbands internationaler Kraftfahrzeughersteller erstellt wurde. Der Leitfaden enthält Verbrauchswerte für Benzin-, Diesel- und Elektrofahrzeuge, die auf Basis des NEFZ gemessen wurden. Um die Zukunftsfähigkeit des Modells und einen möglichst realistischen Verbrauchswert zu gewährleisten, werden die Werte des NEFZ mit entsprechenden Korrekturfaktoren bewertet, um eine Annäherung an den WLTP zu erreichen. In Mock et al. (2014) wurden verschiedene Fahrzeuge aus unterschiedlichen Segmenten simuliert und getestet, um den Unterschied zwischen NEFZ und WLTP zu ermitteln. Als Datenbasis wurden Daten der Firmen AVL und Ricardo sowie des ADAC verwendet. Der in Mock et al. (2014) ermittelte und in dieser Arbeit verwendete Korrekturfaktor ergibt sich dabei aus dem veränderten Fahrzyklus, der höheren Zuladung bei dem Test und der Temperaturkompensation⁵. Der ermittelte Korrekturfaktor beträgt +7,7 % (Mock et al. 2014).

7.2.5 Laufleistung

Die Laufleistung⁶ eines Fahrzeugs ist ein Schlüsselindikator für die Berechnung der Ergebnisse, da die Einsparungen in der Nutzungsphase direkt von der Lebensdauer abhängig sind (Fraunhofer IPA et al. 2012). Ebenfalls ist die Laufleistung eine entscheidende Komponente, um die Vergleichbarkeit zu

⁵ Durchführung des WLTP bei 23 Grad Celsius (1. Durchgang) und 14 Grad Celsius (2. Durchgang), während der NEFZ im Temperaturbereich zwischen 20 und 30 Grad Celsius durchgeführt wurde (VDA 2017b).

⁶ Die Laufleistung beziffert die Strecke (z.B. in Kilometer) die ein Kraftfahrzeug im Laufe seiner Lebensdauer zurücklegt.

anderen Studien und Ökobilanzen zu gewährleisten. In der vorliegenden Arbeit wurden über 15 verschiedene Studien betrachtet, die sich mit der Ökobilanz von Bauteilen und Fahrzeugen auseinandersetzen. Aus allen untersuchten Studien ergibt sich eine durchschnittliche Laufleistung eines Pkw von etwa 190.000 km. Der jeweils kleinste und größte Wert der betrachteten Studien liegt bei 60.000 bzw. 360.000 km und stammt aus O'Reilly et al. (2016). Bei der Volkswagen AG wird ein Wert von 150.000 km festgesetzt, bei der Daimler AG wird durchschnittlich mit 250.000 km gerechnet (Fraunhofer IPA et al. 2012). Zusätzlich findet sich bei der Daimler AG eine Unterteilung nach Fahrzeugsegment, mit 160.000 km für eine A-Klasse und 300.000 km für Premiumfahrzeuge. In Koffler (2014) wird eine Laufleistung von 245.000 km als Durchschnittswert für den amerikanischen Markt angegeben. Betrachtet man die Häufigkeit der verwendeten Werte, so wird eine Laufleistung von 150.000 bzw. 200.000 km am häufigsten verwendet. Die Laufleistung von 150.000 km wird in manchen Studien auch als Expertenschätzung bezeichnet (Weymar und Finkbeiner 2016). Weymar und Finkbeiner (2016) modellieren die Laufleistung von Fahrzeugen auf dem deutschen Markt mittels statistischer Methoden. Die Ergebnisse liegen zwischen 170.000 km für Kleinwagen und 230.000 km für Mittelklassefahrzeuge. Um die Sensitivität der Ergebnisse zu testen, werden in Systemmodul C Laufleistungen von 100.000 km, 150.000 km (Basisszenario), 200.000 km und 300.000 km konfiguriert.

7.3 Modellierung der Nutzungsphase

Im Folgenden werden die Ansätze zur Modellierung und Berechnung der Nutzungsphase vorgestellt. Dabei geht es in einem ersten Schritt um die Allokation des Kraftstoffverbrauchs und um die Bestimmung der gewichtsabhängigen Kraftstoffeinsparung. Auf Grundlage dessen können in einem zweiten Schritt THG-Emissionen einer Fahrzeugkomponente (eines Bauteils)⁷ und von Alternativkomponenten (z.B. leichter konstruierte Bauteile oder Verwendung eines anderen Materials) berechnet werden.

7.3.1 Konzept und Methode

Der erste Beitrag, in dem der Kraftstoffverbrauch ins Verhältnis zu Fahrzeugkomponenten bzw. deren Gewicht gesetzt wurde, stammt von Lynne Ridge aus dem Jahr 1998. Darin werden zwei verschiedene Ansätze vorgestellt, die den theoretischen Minderverbrauch erklären sollen: zum einen der inkrementelle und zum anderen der proportionale Ansatz. Beide Ansätze unterstellen einen linearen Zusammenhang zwischen Kraftstoffverbrauch (V) [l/100km] und Fahrzeuggewicht (M) [kg]. (Ridge 1998)

$$V_{Komponente} = V_{Referenzfahrzeug} \cdot \frac{M_{Komponente}}{M_{Referenzfahrzeug}}$$
(7.1)

Der proportionale Ansatz basiert auf der Annahme, dass der gesamte Energieverbrauch mit dem Gewicht des Fahrzeugs zusammenhängt. Darin werden auch massenunabhängige Verbrauchsanteile wie der Luftwiderstand berücksichtigt. Grundsätzlich lassen sich die Fahrwiderstände, die den Grundenergieverbrauch definieren, in einen gewichtsabhängigen und gewichtsunabhängigen Teil unterteilen (vgl. Kapitel 7.3.2.1). Der Rollwiderstand, die Beschleunigung und der Steigungswiderstand hängen von der Fahrzeugmasse ab, der Luftwiderstand jedoch nicht. Die inkrementelle Methode geht auf dieses Problem ein und betrachtet nur gewichtsinduzierte Verbrauchsanteile. (Egede 2017) Die inkrementelle Methode liefert daher deutlich geringe Werte für den Anteil eines Bauteils am Kraftstoffverbrauch eines Fahrzeugs. Ribeiro et al. (2007) empfehlen, den inkrementellen Ansatz für

⁷ Komponente und Bauteil werden synonym verwendet.

Fahrzeugkomponenten zu verwenden, die weniger als 20 % der Masse des Gesamtfahrzeugs ausmachen. In vielen anderen Studien wird dagegen mit dem massenproportionalen Ansatz gerechnet (Das 2011; Fitch und Smith Cooper 2004; Hakamada et al. 2007). Für die Berechnung der THG-Emissionen eines Bauteils in der Nutzungsphase (mittels Systemmodul C) wird in dieser Arbeit zunächst der proportionale Ansatz (vgl. Formel (7.1)) gewählt, damit auch Fahrzeugkomponenten bilanziert werden können, die einen Einfluss auf den Luftwiderstand haben (z.B. Karosserie).

Kommt es wegen einer Neukonstruktion oder Materialveränderung jedoch zu einer Gewichtsveränderung der Fahrzeugkomponente, wird die dadurch entstehende Änderung des Verbrauchs über die inkrementelle Methode berechnet. In Wissenschaft und Praxis hat es sich etabliert, dass die Verbrauchsänderung mit der inkrementellen Methode über sogenannte Minderverbrauchsfaktoren berechnet wird (Cheah 2010; Eberle 2000; Koffler und Rohde-Brandenburger 2010; Friedrich 2013; Eberle und Franze 1998; Egede 2017). Minderverbrauchsfaktoren für Verbrennungsmotoren werden FRVs (fuel reduction value) genannt und für Elektromotoren ERVs (energy reduction values) (vgl. Egede 2017). Ein Minderverbrauchsfaktor, z.B. der FRV, gibt an, wie viel Liter eines Kraftstoffs auf 100 km pro 100 kg Gewicht eingespart werden können. Cheah (2010) untersuchte u.a. 22 Literaturquellen und ermittelte für Mittelklassewagen in den USA Minderverbrauchsfaktoren im Bereich von 0,36 l/100km100kg bis 0,58 l/100km100kg. Eine Einsparung von 100 kg am Fahrzeuggewicht führe diesen Minderverbrauchsfaktoren gemäß zu einer Kraftstoffeinsparung von 0,36 bis 0,58 l/100km. Mittels FRVs können somit der aufgrund von Gewichtsveränderungen reduzierte bzw. zusätzliche Kraftstoffverbrauch berechnet werden (Koffler und Rohde-Brandenburger 2010).

Diese Arbeit stützt sich jedoch nicht auf allgemeine Minderverbrauchsfaktoren aus der Literatur. Stattdessen werden diese Faktoren in Systemmodul C eigenständig nachmodelliert, um die Grundlage für eine möglichst präzise Bilanzierung der THG-Emissionen der Nutzungsphase zu schaffen. Die Werte in der Literatur scheinen dafür weniger geeignet, da sie teilweise auf verschiedenen Testzyklen basieren (z.B. EPA-Testzyklus in Cheah (2010)) und in zu großen Bandbreiten angegeben sind (s.o.). Darüber hinaus wird mit einer eigenen Modellierung der FRVs gewährleistet, dass sämtliche ergebnisrelevanten Parameter im Modell berücksichtigt werden. Einem Modellanwender bieten sich dadurch vielfältige Möglichkeiten für Sensitivitätsanalysen. So könnten Parameter wie der Rollwiderstand oder der Triebstrangwirkungsgrad individuell variiert, und die Auswirkungen auf die THG-Emissionen bilanziert werden. Eine solch komplexe Berechnung der FRVs wurde methodisch in Koffler und Rohde-Brandenburger (2010) umgesetzt und dient hier als Vorbild.⁸

Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird die Vorgehensweise der Modellierung der Nutzungsphase kurz skizziert:

- 1. Fahrzyklusspezifische Modellierung der Minderverbrauchsfaktoren nach Koffler und Rohde-Brandenburger (2010) (vgl. Kapitel 7.3.2).
- 2. Massenproportionaler Ansatz nach Ridge (1998) (s.o.), um den spezifischen Verbrauch einer Fahrzeugkomponente berechnen zu können.
 - Die Masse eines zu bewertenden Bauteils ist bekannt (z.B. Ergebnis aus Systemmodul B). Der Verbrauch und das Gewicht des entsprechenden Fahrzeugs sind allerdings unbekannt. Es muss also je nach Antrieb ein Referenzfahrzeug erstellt werden, das bzgl. Verbrauch und Gewicht ein für den Fahrzeugmarkt typisches neuzugelassenes Fahrzeug darstellt. (vgl. Kapitel 7.3.3.2)
 - Eine Literaturanalyse zu existierenden Referenzfahrzeugmodellen lässt jedoch keine zuverlässige Aussage bzgl. Gewicht und Verbrauch

⁸ Eine ähnliche Methodik findet sich auch in Friedrich (2013) oder van Basshuysen und Schäfer (2015) sowie erste Ansätze bereits in Eberle und Franze (1998).

zu. Um eine hohe Genauigkeit des Modells zu gewährleisten wird daher eine eigene Fahrzeugmodellstudie erstellt, um plausible und aktuelle Referenzfahrzeuge zu erzeugen. (vgl. Kapitel 7.3.3.3)

- 3. Berechnung der THG-Emissionen eines Bauteils (vgl. Kapitel 7.3.3.4).
 - Berechnung des Kraftstoff- und Stromverbrauchs.
 - Berechnung des Primärenergiebedarfs und der THG-Emissionen.

7.3.2 Fahrzyklusspezifische Minderverbrauchsfaktoren

Der in der Nutzungsphase durch die Gewichtsreduktion eingesparte Kraftstoff kann über sogenannte Minderverbrauchsfaktoren/Treibstoffreduktionswerte (FRV) berechnet werden. Minderverbrauchsfaktoren geben die *gewichtsinduzierte* Verbrauchseinsparung in Litern pro 100km und 100kg Gewicht an (vgl. Kapitel 7.3.1), die im Folgenden bestimmt wird. (Koffler und Rohde-Brandenburger 2010)

7.3.2.1 Gewichtsinduzierter Energieverbrauch

Die benötigte Energie zur Absolvierung eines Streckenprofils (z.B. das des NEFZ) ergibt sich aus unterschiedlichen Fahrwiderständen, die das Fahrzeug überwinden muss. Im Allgemeinen werden vier verschiedene Fahrwiderstände genannt, die in den Formeln (7.2), (7.3), (7.4) und (7.5) aufgeführt sind (van Basshuysen und Schäfer 2015). Zur Berechnung der Fahrwiderstände [in N] gibt μ den Rollwiderstandsbeiwert, m die Masse, g die Erdbeschleunigung, α den Steigungswinkel, a die Beschleunigung, ρ die Dichte der Luft, c_W den Luftwiderstandsbeiwert, A die Stirnfläche und v die Fahrgeschwindigkeit an.

Rollwiderstand:
$$F_{\rm R} = \mu \cdot m \cdot g$$
 (7.2)

Steigungswiderstand:
$$F_{St} = \sin \alpha \cdot m \cdot g$$
 (7.3)

Beschleunigungswiderstand⁹:
$$F_A = m \cdot a$$
 (7.4)

Luftwiderstand:
$$F_{\rm L} = \frac{1}{2} \cdot \rho \cdot c_W \cdot A \cdot v^2$$
 (7.5)

Unter der Berücksichtigung, dass Start- und Endpunkt auf dem gleichen Höhenniveau liegen, wird der Steigungswiderstand in fast allen Berechnungen vernachlässigt. Um aus den Fahrwiderständen den Energieverbrauch zu berechnen, werden die jeweiligen Widerstände über die Strecke (*s*) integriert. Da das Geschwindigkeitsprofil nicht durch eine einfache mathematische Funktion ausgedrückt werden kann, wird das Integral als die Summe aller Arbeitsinkremente über die Zeit berechnet. Für den NEFZ beträgt die Zeit z.B. zwischen t = 0 und t = 1.180, da der NEFZ Zyklus 1.180 Sekunden dauert. Auf diese Weise werden die benötigte Roll- (W_R), Luft- (W_L) und Beschleunigungsenergie (W_A) eines Fahrzeugs (vgl. Formeln (7.6), (7.7) und (7.8)) sowie die gesamte benötigte Energie (vgl. Formel (7.9)) ermittelt. Der Gesamtenergieverbrauch ergibt sich als Summe der drei Energieanteile. C_{WR} , C_{WL} und C_{WA} beschreiben in den Formeln die Roll-, Luftwiderstands- bzw. Beschleunigungskonstante. (Koffler und Rohde-Brandenburger 2010)

$$W_{\rm R} = \sum (F_{\rm R} \cdot \Delta s_i) = \mu \cdot m \cdot g \cdot \sum \Delta s_i = \mu \cdot m \cdot g \cdot C_{\rm WR}$$
(7.6)

$$W_{\rm L} = \sum (F_{\rm L} \cdot \Delta s_i) = \frac{1}{2} \cdot \rho \cdot c_{\rm W} \cdot A \cdot \sum (v_i^2 \cdot \Delta s_i) = \frac{1}{2} \cdot \rho \cdot c_{\rm W} \cdot A \cdot C_{\rm WL}$$

$$A \cdot C_{\rm WL}$$
(7.7)

⁹ Vereinfachte Darstellung ohne Berücksichtigung translatorisch und rotatorisch beschleunigter Massen (Koffler und Rohde-Brandenburger 2010).

$$W_{\rm A} = \sum (F_{\rm A} \cdot \Delta s_i) = m \cdot \sum (a_i \cdot \Delta s_i) = m \cdot C_{\rm WA}$$
(7.8)

$$W_{\text{Gesamt}} = (1 - \delta) \cdot W_R + W_A = m \cdot ((1 - \delta) \cdot g \cdot \mu \cdot C_{WR} + C_{WA})$$

$$(7.9)$$

Die Konstanten C_{WR}, C_{WL} und C_{WA} sind jeweils nur vom gewählten Fahrzyklus abhängig und unabhängig vom Fahrzeug. Mit Ausnahme des Luftwiderstands sind alle weiteren Widerstände von der Masse des Fahrzeugs abhängig. Der Luftwiderstand ist von den Fahrzeugabmessungen und der gefahrenen Geschwindigkeit abhängig und daher für die Berechnung des massebasierten Energieverbrauchs nicht relevant. (Helms und Lambrecht 2007) Zusätzlich muss berücksichtigt werden, dass die Energie zur Beschleunigung als kinetische Energie gespeichert wird und beim Verzögern zum Überwinden des Roll- und Luftwiderstands genutzt wird. Daher muss das Modell um einen Faktor ergänzt werden, der diesen Umstand beschreibt. Da der Rollwiderstand unabhängig von der Verzögerung ist, entspricht dieser Faktor (δ) dem Anteil an Verzögerung im jeweiligen Fahrzyklus. (Koffler und Rohde-Brandenburger 2010) Der Anteil an Rollenergie wird also entsprechend um diesen Faktor verringert. Die Beschleunigungsenergie bleibt davon unabhängig. Durch die Summe beider Energien ergibt sich der gesamte, gewichtsbasierte Energiebedarf W_{Gesamt} , wie in (7.9) dargestellt. Dieser wird in der Regel auf eine Fahrstrecke und ein Gewicht normiert, sodass als Einheit MJ pro 100 km und pro 100 kg [MJ/100km100kg] angegeben wird.

7.3.2.2 Gewichtsinduzierter Kraftstoffverbrauch

Nachdem die benötigte Energiemenge W_{Gesamt} berechnet wurde, kann diese in die entsprechend äquivalente Menge an Kraftstoff umgerechnet werden (Koffler und Rohde-Brandenburger 2010). Die Effizienz eines Verbrennungsmotors hängt im Wesentlichen von seinem Betriebspunkt ab, der wiederum durch das Drehmoment und die Drehzahl charakterisiert wird. In der Praxis wird hier zumeist der spezifische Kraftstoffverbrauch $b_{\rm e}$ in l/kWh oder l/MJ herangezogen. Dieser ergibt sich aus dem effektiven Wirkungsgrad $\eta_{\rm e}$, dem Heizwert des Kraftstoffs $H_{\rm u}$ [MJ/kg] und der Dichte des Kraftstoffs ($\rho_{\rm Benzin/Diesel}$) [kg/l] oder er ergibt sich alternativ als Produkt aus dem indiziertem Wirkungsgrad $\eta_{\rm i}$ und dem mechanischem Wirkungsgrad $\eta_{\rm m}$ (vgl. Formel (7.10)). (van Basshuysen und Schäfer 2015)

$$b_{\rm e} = \frac{1}{\eta_{\rm e} \cdot H_{\rm u} \cdot \rho_{\rm Benzin/Diesel}} = \eta_{\rm i} \cdot \eta_{\rm m}$$
(7.10)

Eine gute Näherung zur Bestimmung des Wirkungsgrads η_e bieten die sogenannten Willans-Linien, die den Kraftstoffverbrauch [l/h] in das Verhältnis zur abgegebenen Energie [kW] setzen (van Basshuysen und Schäfer 2015). Nach Koffler und Rohde-Brandenburger (2010) ergibt sich so für den NEFZ in guter Näherung ein Wirkungsgrad von 42 % für benzinbetriebene Saugmotoren. Für benzinbetriebene Turbomotoren ergibt sich ein Wirkungsgrad von 40 % und für dieselbetriebene Turbomotoren von 46 %. Dabei werden die Verluste innerhalb des Motors durch Lager, Reibung und ähnliche Faktoren berücksichtigt. Bei zusätzlicher Berücksichtigung des spezifischen Wirkungsgrads im Antriebsstrang η_{ATS} und der daraus resultierenden Verluste, nach Formel (7.11)der Kraftstoffverbrauch ergibt sich nun (V) [l/100km100kg] anhand des massebasierten Energiebedarfs W_{Gesamt} (7.9) und des spezifischen Kraftstoffverbrauchs b_e (7.10). (Koffler und Rohde-Brandenburger 2010)

$$V = W_{\text{Gesamt}} \cdot \left(1 + (1 - \eta_{\text{ATS}})\right) \cdot b_{\text{e}}$$
(7.11)

7.3.2.3 Berechnung der Minderverbrauchsfaktoren im Neuen Europäischen Fahrzyklus (NEFZ)

Im Folgenden werden der Energieverbrauch (Kapitel 7.3.2.1) und der Kraftstoffverbrauch (Kapitel 7.3.2.2) im Referenzzyklus NEFZ nach Koffler und Rohde-Brandenburger (2010) berechnet. Der Referenzzyklus NEFZ und seine Charakteristika wurden bereits in Kapitel 7.2.4 vorgestellt. Auf Basis charakteristischer Daten zum NEFZ (Tabelle 7.2) sowie einem Rollwiderstandsbeiwert (μ) von 0,01, einer Erdbeschleunigung (g) von 9,81 $\frac{m}{s^2}$ und der Normierung des Ergebnisses auf Strecke und Gewicht ergibt sich nach Formel (7.9) ein Energieverbrauch (W_{Gesamt}) von ca. 1,95 MJ/100km100kg (vgl. Formel (7.12)) (Koffler und Rohde-Brandenburger 2010). Die Energie, die also für die Überwindung des Roll- und des Beschleunigungswiderstands im NEFZ benötigt wird, beträgt 1,95 MJ für ein Gewicht von 100 kg über eine Distanz von 100 km. Die Werte der Tabelle 7.2 wurden identisch in Systemmodul C implementiert, können vom Anwender jedoch verändert werden (z.B. zur Durchführung von Sensitivitätsanalysen).

$$W_{\text{Gesamt}} = \frac{100 \text{ km}}{11,013 \text{ km}} \cdot 100 \text{ kg}$$
$$\cdot \left((1 - 0,15) \cdot 9,81 \frac{\text{m}}{\text{s}^2} \cdot 0,01 \cdot 11013 \text{ m} \right. (7.12)$$
$$+ 1227 \frac{\text{m}^2}{\text{s}^2} \right) \approx 1,95 \frac{\text{MJ}}{100 \text{ km} \cdot 100 \text{ kg}}$$

Bezeichnung	Einheit	Wert
C _{WR}	m	11.013
C _{WL}	m³/s²	3.989.639
C _{WA}	m²/s²	1.227
δ	%	15
μ	-	0,01
g	m/s ²	9,81
H _u	MJ/kg	Benzin: 43,5 Diesel: 42,5
$ ho_{ m Benzin}$	kg/l	0,75
$ ho_{ m Diesel}$	kg/l	0,84
n		Benzin Saugmotor: 0,42
η _e	-	Diesel Turbomotor: 0,46
η_{ATS}	-	0,98

 Tabelle 7.2:
 Charakteristische Werte für den NEFZ Fahrzyklus und sonstige benötigte Daten zur Berechnung des Energie- und Kraftstoffverbrauchs für einen Fahrzyklus (Koffler und Rohde-Brandenburger 2010)

Des Weiteren berechnet sich der spezifische Kraftstoffverbrauch b_e gemäß der Daten (Tabelle 7.2) zu 0,0733 I/MJ. Mit Verlusten im Antriebsstrang (1- η_{ATS}) von 2 %, ergibt sich für benzinbetriebene Saugmotoren nach Formel (7.11)ein gewichtsinduzierter Kraftstoffverbrauch von 0,15 l pro 100 km pro 100 kg (vgl. Formel (7.13)). Nach analoger Berechnung wird für benzinbetriebene Turbomotoren (vgl. Formel (7.14)) ebenfalls ein gewichtsinduzierter Verbrauch von 0,15 l/100km100kg und für dieselbetriebene Turbomotoren (vgl. Formel (7.15)) ein gewichtsinduzierter Verbrauch von 0,12 l/100km100kg berechnet. (Koffler und Rohde-Brandenburger 2010). Wiegt ein Fahrzeugbauteil beispielsweise 1 kg, bedeutet dies, dass der gewichtsinduzierte Benzinverbrauch dieses Bauteils bei 0,15 ml pro 100 km liegt.

$$V_{\text{Benzin}} = 1,95 \frac{MJ}{100 \ km \cdot 100 \ kg} \cdot (1 + 0,02) \cdot 0,0733 \frac{l}{MJ}$$

= 0,15 $\frac{l}{100 \ km \cdot 100 \ kg}$ (7.13)

$$V_{\text{Benzin,Turbo}} = 0.15 \ \frac{l}{100 \ km \cdot 100 \ kg}$$
(7.14)

$$V_{\text{Diesel,Turbo}} = 0.12 \frac{l}{100 \, km \cdot 100 \, kg}$$
(7.15)

7.3.2.4 Berechnung im NEFZ mit Sekundäreffekten

Alle Berechnungen gehen bislang davon aus, dass keine konstruktiven Änderungen am Fahrzeug vorgenommen wurden. Wird das Fahrzeuggewicht nun durch Veränderungen an einem Bauteil verringert, wird weniger Motorleistung für die gleiche Fahrleistung und das gleiche Fahrverhalten benötigt. Durch die folglich geringeren Belastungen für den Antriebsstrang (Bremsen, Getriebe etc.) könnte dieser ebenfalls angepasst werden. Man spricht in diesem Kontext auch von umgekehrter Gewichtsspirale und Sekundäreffekten (Fuchs 2014).

Ein Grundsatz in der Entwicklung von Fahrzeugen ist es, zu Beginn der Entwicklung ein Lastenheft zu formulieren, in dem unter anderem die gewünschte Zielperformance des Fahrzeugs festgehalten wird (Friedrich 2013). Werden nun die erzielten Gewichtseinsparungen im Laufe der Entwicklung bzw. möglichst frühzeitig erfasst, können entsprechende Anpassungen an weiteren Bauteilen vorgenommen werden und der Kraftstoffverbrauch wird zusätzlich gesenkt. Diese zusätzlichen Einsparungen (Sekundäreffekte) werden bei der Ökobilanzierung berücksichtigt und dem spezifischen Bauteil gutgeschrieben (Koffler 2014; Helms und Lambrecht 2007). Wichtig ist dabei die Annahme, dass die Gewichtseinsparung auch tatsächlich für die Kraftstoffeinsparungen genutzt wird und nicht – wie heute teilweise in der Praxis zu finden – um die Performance zu steigern. Die Performance des Fahrzeugs wird also trotz Anpassungen im Antriebsstrang in Systemmodul C als konstant festgesetzt (vgl. Koffler und Rohde-Brandenburger 2010).

Werden die Sekundäreffekte berücksichtigt, ergeben sich also deutlich höhere Minderverbrauchsfaktoren als in den Formeln (7.13) bis (7.15) berechnet. In der Dissertation von Eberle (2000) wurden die Einsparungen durch Anpassungen im Antriebsstrang simuliert und lagen bei einem heckangetriebenen Benziner mit 0.41 l/100km100kg dreimal höher als bei dem gleichen Fahrzeug ohne Anpassungen (0,13 l/100km100kg). Andere Simulationen reichen von insgesamt 0,34 bis hin zu 0,48 l/100km100kg als Einsparung und bei sportlicher Fahrweise sogar bis zu 0,51 l/100km100kg (Helms und Lambrecht 2007). In der Literatur sind teilweise auch Einsparungen von bis zu 1 l/100km100kg zu finden, jedoch werden diese in der Regel als zu optimistisch erachtet (Ridge 1998; Helms und Lambrecht 2007) oder sogar als falsch bezeichnet (Rohde-Brandenburger und Obernolte 2008). In Rohde-Brandenburger und Obernolte (2008) wurden ebenfalls die Sekundäreffekte für verschiedene Fahrzeuge im NEFZ simuliert. Es ergab sich eine Abhängigkeit dieser Effekte vom Fahrzeugleergewicht, dem Hubraum und der Aufladung. Beim Hubraum spielen kleinere Motoren und Downsizing-Effekte eine wesentliche Rolle. Zusätzlich ist die Achsübersetzung ein wichtiger Stellhebel. Ein verringertes Fahrzeuggewicht verschiebt das Fahrwiderstandsmoment zu einem niedrigeren Moment. Die Verlängerung der Achsübersetzung verschiebt den Betriebspunkt dagegen zu einem höheren Moment bei gleichzeitig niedrigerer Drehzahl. Der Betriebspunkt wird verbessert, ohne die Fahrleistung und insbesondere die Elastizität in den einzelnen Gängen zu verschlechtern (Eberle 2000).

Mit der Gewichtsveränderung wird eine sog. Gewichtsspirale in Gang gesetzt, woraufhin Anpassungen an der Übersetzung oder im Hubraum durchgeführt werden. Zum Beispiel führt ein leichteres Fahrzeug zur Anpassung von Federn, Lager und Bremsen und dies wiederum zur Anpassung des Getriebe (vgl. Fuchs 2014). In Tabelle 7.3 sind Minderverbrauchsfaktoren für die einzelnen Anpassungen an der Übersetzung oder im Hubraum abgebildet (vgl. Koffler und Rohde-Brandenburger 2010). Als Mittelwerte haben sich Minderverbrauchsfaktoren mit 0,35 l/100kg100km für Benziner und 0,28 l/100kg100km für Dieselfahrzeuge als Industriestandard etabliert und werden so unter anderem bei der Volkswagen AG verwendet (Koffler und Rohde-Brandenburger 2010). Auch zahlreiche weitere Studien verwenden diese Werte, unter anderem Hardwick und Outteridge (2016), Koffler (2014), Ehrenberger et al. (2013) oder Fraunhofer IPA et al. (2012).

 Tabelle 7.3:
 Minderverbrauchsfaktoren für Benziner und Diesel in [l/(100km100kg)] mit

 Sekundäreffekten (Koffler und Rohde-Brandenburger 2010)

Treibstoff	Ohne Sekun- däreffekte	Anpassung	Minimum	Maximum	Durchschnitt
Benzin	0,15	Übersetzung	0,29	0,39	0,32
		Hubraum	0,36	0,45	0,39
Diesel	0,12	Übersetzung	0,27	0,30	0,29
		Hubraum	0,24	0,29	0,26

Die Analyse der Daten in Tabelle 7.3 ergibt, dass die FRVs mit Sekundäreffekten um den Faktor 1,93 bis 3,0 höher liegen als die FRVs ohne Sekundäreffekte. Im Mittel liegt dieser "Aufschlagsfaktor" bzw. Sekundärfaktor bei 2,37. Werden die FRVs ohne Sekundäreffekte der Gleichungen (7.13) bis (7.15) entsprechend mit diesem Faktor multipliziert, ergibt sich der Minderverbrauchsfaktor mit Sekundäreffekten.

7.3.2.5 Berücksichtigung hybrider und elektrischer Fahrzeuge

Der berechnete gewichtsbasierte Energiebedarf W_{Gesamt} (vgl. Formel (7.12)) in Höhe von 1,95 MJ/100km100kg (entspricht 0,542 kWh/100km100kg) gilt ebenso für PHEVs und BEVs. Zur Berechnung des gewichtsabhängigen Stromverbrauchs (ERVs), muss im Vergleich zu den Berechnungen der FRVs noch die Energierückgewinnung berücksichtigt werden. ζ gibt dazu den Anteil der durchschnittlichen zurückgewonnen Bremsenergie an. Die Energierückgewinnung kann auf Basis der verlorenen Energie bei der Verzögerung bestimmt werden, abzüglich der Fahrwiderstände und des Energieverlusts durch mechanisches Bremsen (Canals et al. 2016). Nach Canals et al. (2016) und Helms et al. (2010) wird hier ein Wert von ζ =0,7 verwendet.

Die Gesamteffizienz des elektrischen Antriebs (η_{EPT}) ergibt sich für Elektrofahrzeuge als Produkt aus den jeweiligen Wirkungsgraden für das Aufladen der Batterie, für die Batterie selbst, für den Elektromotor und für den Antriebsstrang (Canals et al. 2016). Für die verschiedenen Wirkungsgrade gilt in der Regel ein Wertebereich zwischen 93 % und 99 %. (Egede 2017) Für den gesamten elektrischen Antrieb ergibt sich daher durch Multiplikation der einzelnen Wirkungsgrade im Mittel ein Wirkungsgrad von ca. 80 % ($\eta_{\rm FPT}$ = 0,8) (Canals et al. 2016), der im Rahmen dieser Arbeit verwendet wird. Unter Anwendung dieser Aspekte ergibt sich der gewichtsabhängige Stromverbrauch (V_{BEV}) für den elektrischen Antriebsstrang gemäß Formel (7.16)(vgl. Egede 2017) zu 0,298 kWh/100km100kg. Der Wert für Benziner lag bei 0,15 l/100km100kg (vgl. Kapitel 7.3.2.3), das sind umgerechnet ca. 1,36 kWh/100km100kg. Der Minderverbrauchsfaktor für Benziner ist also etwa 4.6 mal höher als bei BEVs und zeigt, dass die Energieeinsparungen durch Leichtbauweise bei konventionellen Fahrzeugen deutlich höher sind als bei BEVs.¹⁰

¹⁰ Zum Vergleich: In Egede (2017) wird ein Verhältnis von 3,7 berechnet (aufgrund der Verwendung anderer Wirkungsgrade).

$$V_{\rm BEV} = W_{\rm Gesamt} \cdot \frac{1}{\eta_{\rm EPT}} \cdot (1 - \eta_{\rm EPT} \cdot \zeta)$$
(7.16)

Der berechnete Minderverbrauchsfaktor für BEVs in Höhe von 0,298 kWh/100km100kg beinhaltet aber noch keine Sekundäreffekte. Da keine spezifischen Simulationen und Ergebnisse für die Auswirkung von Sekundäreffekten bei Elektrofahrzeugen im Rahmen dieser Arbeit vorliegen, wird angenommen, dass die Ergebnisse mit denen für konventionelle Antriebe vergleichbar sind. Daher werden für BEV die "Aufschlagsfaktoren" aus der Anpassung der Übersetzung nach Tabelle 7.3 verwendet. Daraus ergibt sich für den Sekundärfaktor für BEVs ein Wertebereich von 1,9 bis 2,6 zur Überführung in Minderverbrauchsfaktoren mit Sekundäreffekten. Als Mittelwert wird ebenfalls ein Sekundärfaktor von 2,37 angenommen.

Für PHEVs werden entsprechend die Minderverbrauchsfaktoren für den Benzin- und für den Stromverbrauch zu unterschiedlichen Anteilen verwendet. Die Minderverbrauchsfaktoren für PHEVs werden im Modell je nach implementiertem Fahrzyklus bzw. Streckenprofil über Gewichtungen berechnet. Wie in Kapitel 7.3.3.3 beschrieben, wurde der Hybridmodus wie folgt im Modell vorkonfiguriert: im Stadtverkehr 10 % Verbrennung und 90 % elektrischer Antrieb; auf der Landstraße 50 % Verbrennung und 50 % elektrischer Antrieb; und auf Autobahn 90 % Verbrennung und 10 % elektrischer Antrieb (vgl. Helms et al. 2010).

7.3.3 Kraftstoff- und Stromverbrauch aktueller Fahrzeugmodelle

7.3.3.1 Allokationsansatz nach Ridge

Gemäß Ridge (1998) werden zu Berechnung des spezifischen Kraftstoffverbrauchs einer Fahrzeugkomponente ($V_{Komponente}$) der Kraftstoffverbrauch des Gesamtfahrzeugs ($V_{Referenzfahrzeug}$), das Gewicht der Komponente

 $(M_{Komponente})$ und das Gewicht des Gesamtfahrzeugs $(M_{Referenzfahrzeug})$ benötigt (vgl. Formel (7.1)).

Die vorliegende Arbeit geht davon aus, dass dem Modellanwender diese Daten zur Fahrzeugkomponente bekannt sind, da es sich um das zu bilanzierende Objekt handelt (z.B. Bauteil aus Systemmodul B). Sollten dem Modellanwender auch die Daten des oder der Fahrzeugmodelle vorliegen, in die das Bauteil verbaut wird, kann der spezifische Verbrauch des Bauteils je Fahrzeugmodell berechnet werden. Für den Fall, dass dem Modellanwender keine Daten (Verbrauch und Gewicht) zu den Fahrzeugen vorliegen, wird im Systemmodul C ein Referenzfahrzeug erstellt, an dem die Bewertung durchgeführt werden kann. Damit die Ergebnisse der Bauteilbewertung möglichst plausibel und aktuell sind, sollte ein Referenzfahrzeug erstellt werden, das die neu am Markt zugelassenen Fahrzeuge möglichst präzise abbildet. Das folgende Kapitel bietet dazu eine kurze Literaturübersicht über den Kraftstoffverbrauch von Referenzfahrzeugen.

7.3.3.2 Kraftstoffverbrauch von Referenzfahrzeugen existierender Studien

In einer Literaturanalyse konnten zunächst die beiden Kraftstoffverbrauchsfunktionen nach Hakamada et al. (2007) (vgl. Formel (7.17)) und nach Sullivan und Hu (1995) (vgl. Formel (7.18)) gefunden werden. Beide unterstellen einen nichtlinearen Zusammenhang zwischen Kraftstoffverbrauch V(M)und Fahrzeuggewicht M. Zur Datengrundlage, Regressionsgüte und zu sonstigen Funktionsparametern liegen für beide Funktionen in beiden Studien keine weiteren Informationen vor. Insbesondere die Frage nach dem verwendeten Kraftstoff kann nicht zweifelsfrei beantwortet werden. Da jedoch innerhalb dieser Studien nur mit benzinbetriebenen Fahrzeugen gerechnet wurde, erscheint es naheliegend, dass sich diese Funktionen nur auf benzinbetriebene Fahrzeuge anwenden lassen. Die Formel (7.17) nach Hakamada et al. (2007) berechnet den Kraftstoffverbrauch in [km/l]. Eine Auswertung zur Verbrauchseinsparung in Hakamada et al. (2007) ergibt eine durchschnittliche Verbrauchseinsparung von 0,84 l/100km bei einer Gewichtsreduktion von 100 kg. Die Formel (7.18) wurde in Sullivan und Hu (1995) entwickelt, rechnet in [mpg] (miles per gallon) und hat als Kurve einen sehr flachen Verlauf. Die durchschnittliche Verbrauchseinsparung ergibt sich darin zu 0,27 l/100km100kg. (Sullivan und Hu 1995)

$$V(M)_{Hakamada} = 64.000 \cdot M^{-1.2} \tag{7.17}$$

$$V(M)_{Sullivan\&Hu} = 1.052,57 \cdot M^{-0.5}$$
(7.18)

$$V(M)_{Cheah} = 0,0053 \cdot M + 2,0081 \tag{7.19}$$

$$V(M)_{Cheah}^{Mittelklasse} = 0,004 \cdot M + 3,836$$
(7.20)

In der Dissertation von Cheah (2010) werden zwei lineare Verbrauchsfunktionen vorgestellt, die eine Korrelation von Fahrzeuggewicht und Kraftstoffverbrauch angeben. Die Funktionen nach Cheah (2010) lassen sich im Gegensatz zu den vorherigen Funktionen besser nachvollziehen, da für beide Funktionen die zugrunde gelegte Datenbasis angegeben wurde. Analysiert wurde zum einen der Fahrzeugmarkt der USA in den Jahren 2006 bis 2008, woraus Formel (7.19) resultierte. Das Ergebnis einer Gewichtsreduktion um 100 kg liegt hier bei einer durchschnittlichen Verbrauchseinsparung von 0,53 l/100km. Zum anderen wurde in Cheah (2010) mithilfe der Simulationssoftware AVL© ADVISOR der Kraftstoffverbrauch speziell von Mittelklassewagen simuliert (vgl. Formel (7.20)). Diese Software errechnet anhand des geforderten Drehmoments, der Geschwindigkeit und der Leistung den jeweiligen Kraftstoffverbrauch und ermittelt zusätzlich eine Beschleunigungsfunktion. Anhand dieser Beschleunigungsfunktion wurden die Ergebnisse validiert und mit den realen Fahrzeugen verglichen. Als Einsparung ergaben sich 0,39 l/100km für einen Mittelklassewagen. (Cheah 2010)

7.3.3.3 Entwicklung eigener Referenzfahrzeuge

Im folgenden Kapitel 7.3.3.3 wird ein eigenes Verbrauchsmodell aufgestellt, da die Datengrundlage der Funktionen (7.17) und (7.18) unbekannt ist, sich die Funktionen (7.19) und (7.20) nur auf den amerikanischen Fahrzeugmarkt beziehen und alle vorgestellten Funktionen zudem älter als zehn Jahre sind. Als Grundlage dient dazu eine Fahrzeugstudie, die von der Deutschen Automobil Treuhand (DAT) GmbH im Auftrag des VDA (Verband der Automobilindustrie e.V.) und des VDIK (Verband der internationalen Kraftfahrzeughersteller e.V.) erstellt wurde (vgl. DAT GmbH et al. 2016). Auf Basis der Daten dieser Fahrzeugstudie wird im Modell der Verbrauch aller neuen auf dem deutschen Fahrzeugmarkt zugelassenen Fahrzeugmodelle berechnet.

Die Fahrzeugmodellstudie von DAT GmbH et al. (2016) umfasst alle Neuwagenmodelle, die im vierten Quartal 2016 auf dem deutschen Fahrzeugmarkt zum Kauf angeboten wurden. Insgesamt sind in der Studie 4.838 verschiedene Fahrzeugmodelle (ohne Nutzfahrzeuge) zu finden, davon 2.561 Benziner und 2.150 Dieselfahrzeuge (4.711/4.838, Anteil Verbrenner = 97,4 %). Die Leergewichte der betrachteten Fahrzeugmodelle liegen in einem Bereich von 825 kg bis 3.021 kg. Für alle Benzinfahrzeuge ergab sich ein Durchschnittsgewicht von 1.502 kg. Für Dieselfahrzeuge lag dieses bei 1.613 kg. Dieselbetriebene Fahrzeuge sind also im Durchschnitt 111 kg schwerer. Für die Bestimmung der Referenzfahrzeuge im Systemmodul C wird daher angenommen, dass ein gleiches Fahrzeugmodell in der Ausführung mit Dieselmotor 111 kg schwerer ist als die Version des Benziners. In Systemmodul C wurden die Fahrzeugmodelle eines jeden Fahrzeugsegmentes modelliert. Auf diese Weise kann ein Bauteil in Abhängigkeit von jedem Fahrzeugsegment und -antrieb bilanziert werden. Üblicherweise wird zwischen den Segmenten Kleinwagen, Kompaktklasse, Mittelklasse, Obere Mittelklasse,

Oberklasse, SUV, Geländewagen, Sportwagen und Van unterschieden (Kraftfahrtbundesamt 2019).

Die Fahrzeugmodelle in der Studie des DAT GmbH et al. (2016) wurden nicht in die oben genannten Segmente differenziert, sondern nach Fahrzeugmarken aufgelistet. Daher wird zur Bestimmung des segmentspezifischen Fahrzeuggewichts eine Auswertung des Kraftfahrtbundesamtes aus dem Vorjahr gemäß Kraftfahrtbundesamt (2015) verwendet. Nach dieser Auswertung beträgt zum Beispiel das durchschnittliche Gewicht eines Kompaktklassewagens 1.386 kg. Für das zu entwickelnde Modell wird vereinfachend angenommen, dass sich die 1.386 kg nur auf benzin- und dieselbetriebe Fahrzeugmodelle beziehen, und sich dieses Leergewicht gemäß DAT GmbH et al. (2016) im Verhältnis 54 % (2.561/4.711) benzinbetriebe und 46 % (2.150/4.711) dieselbetriebe Fahrzeuge ergibt. Bei einem durchschnittlichen Mehrgewicht des Diesels von 111 kg gegenüber einem Benziner (s.o.) ergibt sich das durchschnittliche Gewicht eines Kompaktklasse Benziners nach Lösung des entsprechenden linearen Gleichungssystems zu 1.335 kg und das eines Diesels zu 1.446 kg. Die Ergebnisse für die weiteren hier betrachteten Fahrzeugsegmente können Tabelle 7.4 entnommen werden.

	Leergewicht Referenzfahrzeuge				
Antrieb	Ø (Benziner	Benziner	Diesel	PHEV	BEV
Segment	u. Diesel)				
Kleinwagen	1.150	1.099	1.210	1.199	1.364
Kompaktklasse	1.386	1.335	1.446	1.435	1.600
Mittelklasse	1.611	1.560	1.671	1.650	1.825
Obere Mittelklasse	1.861	1.810	1.921	1.910	2.075
Oberklasse	2.027	1.976	2.087	2.076	2.241
SUV	1.523	1.472	1.583	1.572	1.737
Geländewagen	1.891	1.840	1.951	1.940	2.105
Sportwagen	1.579	1.528	1.639	1.628	1.793
Van	1.417	1.366	1.477	1.466	1.631

Tabelle 7.4:	Leergewicht der erstellten Referenzfahrzeuge (eigene Berechnung gemäß der
	Daten aus DAT GmbH et al. (2016) und Kraftfahrtbundesamt (2015))

Für jedes Fahrzeugmodell hat die Studie in DAT GmbH et al. (2016) jeweils den vom Fahrzeughersteller angegebenen Kraftstoffverbrauch gemäß NEFZ mit aufgelistet. Aus diesen Verbrauchsdaten folgt ein segmentübergreifender Durchschnittsverbrauch von 6,7 l/100km für Benziner und 4,7 l/100km für Dieselfahrzeuge. Überführt in den realistischeren WLTP-Zyklus durch Berücksichtigung des Korrekturfaktors von 1,077 (vgl. Kapitel 7.2.4) ergibt sich ein durchschnittlicher Verbrauch von 7,22 l/100km (Benzin) bzw. 5,06 l/100km (Diesel).

Der Zusammenhang zwischen Fahrzeuggewicht und Kraftstoffverbrauch wird als näherungsweise linear betrachtet und gilt vor allem im Vergleich zu exponentiellen Ansätzen als genauer (Eberle 2000). Außerdem wird der lineare Zusammenhang auch in anderen Modellierungsansätzen häufiger verwendet (z.B. in Cheah (2010)). So wird auch in dieser Arbeit der lineare Funktionstyp gewählt. Die Formeln (7.21) und (7.22) sind das Ergebnis der erstellten linearen Regressionen durch die der Verbrauch eines Fahrzeugs (V(M)) [I/100km] in Abhängigkeit von der Fahrzeugmasse M berechnet

werden kann. Zur Umrechnung von NEFZ in WLTP wird im Modell noch mit dem Korrekturfaktor (1,077) multipliziert (vgl. Kapitel 7.2.4).

$$V(M)_{Benziner} = 0,0054 \cdot M - 1,4534 \tag{7.21}$$

$$V(M)_{Diesel} = 0,003 \cdot M - 0,1026 \tag{7.22}$$

Das Bestimmtheitsmaß R² der linearen Regression zu den Kraftstoffverbräuchen beträgt für Benziner 0,6107 und für Dieselfahrzeuge 0,6481. Die durchschnittlichen Verbrauchseinsparungen pro 100 kg liegen gemäß dieser linearen Regression für Benziner bei 0,54 l/100km und für Dieselfahrzeuge bei 0,30 l/100km. Die Funktionen und Datenpunkte sind im Anhang in Abbildung A.5 und Abbildung A.6 dargestellt.

Für PHEVs werden ebenfalls die Fahrzeugmodelldaten aus DAT GmbH et al. (2016) verwendet. Der Verbrauch an elektrischer Energie wird nicht mit einem Korrekturfaktor bewertet, da dieser nur für Benzin- und Dieselfahrzeuge berechnet wurde (Mock et al. 2014). Eine Auswertung der Fahrzeugdaten der Studie in DAT GmbH et al. (2016) ergibt, dass in PHEVs, neben dem elektrischen Antrieb, vorwiegend Benzinmotoren eingesetzt werden. Es wird daher lediglich der Benzinmotor für PHEVs betrachtet und somit für die spätere Berechnung der indirekten THG-Emissionen auch nur die Wirkkette der Benzinherstellung berücksichtigt. Der Benzinverbrauch des PHEVs wird entsprechend mit dem WLTP-Korrekturfaktor bewertet. Beim Fahrzeuggewicht eines PHEVs wird im Vergleich zum reinen Benziner ein Mehrgewicht von 100 kg durch die elektrischen Komponenten berücksichtigt (z.B. Batterie) (Helms et al. 2010) (vgl. Tabelle 7.4). Für die Kalkulation der Emissionen und des Verbrauchs wird ein entsprechender Fahrtenmix nach Helms et al. (2010) angesetzt, der das Zusammenspiel von Verbrennungsmotor und Elektromotor in verschiedenen Fahrsituationen beschreibt (Helms et al. 2010). Demnach wird wie in Kapitel 7.3.2.5 im Stadtverkehr 90 % elektrisch gefahren, außerorts beträgt die Aufteilung jeweils 50 %, und auf der Autobahn wird lediglich zu 10 % mit elektrischer Energie gefahren. Als Ergebnis erhält man die Strecke, die mit dem jeweiligen Antrieb absolviert wurde. Zusätzlich wird beim PHEV eine Effizienzsteigerung des Verbrennungsmotors um 20 % berücksichtigt (Helms et al. 2010), da dieser durch den Elektromotor in besseren Betriebspunkten und damit effizienter betrieben werden kann (van Basshuysen und Schäfer 2015).

Die Verbrauchsdaten für BEVs aus DAT GmbH et al. (2016) sind deutlich niedriger als vergleichbare Literaturwerte (z.B. Canals et al. (2016), Helms et al. (2010) oder ADAC (2020)), die zeigen, dass der Verbrauch von BEV im Bereich von 20 bis 25 kWh/100km anzusetzen ist. Gemäß DAT GmbH et al. (2016) lagen die Werte im NEFZ zum Vergleich nur bei 15 kWh/100km. Dies könnte daran liegen, dass hauptsächlich Kleinwagen in der Studie vertreten waren. Außerdem ist die Anzahl der in der Studie berücksichtigen BEV-Fahrzeugmodelle sehr gering, weshalb der Wert zusätzlich keine repräsentative Datengrundlage darstellt. So werden hier für BEVs die Daten aus Helms et al. (2010) verwendet, die für ein Fahrzeug der Kompaktklasse erstellt wurden und im Vergleich zu aktuellen Verbrauchsdaten (ADAC 2020) noch immer sehr plausibel sind.¹¹ Im Stadtverkehr wird mit einem Verbrauch von 20,4 kWh/100km, auf der Landstraße mit 20,8 kWh/100km und auf der Autobahn mit 24,9 kWh/100km gerechnet. Dabei wird eine Häufigkeit von 29 % Stadtfahrten, 39 % Landstraße und 32 % Autobahn unterstellt. (Helms et al. 2010)

¹¹ Die Werte aus Helms et al. (2010) wurden allerdings im CADC-Fahrzyklus (CADC: Common Artemis Driving Cycle) gemessen. Der CADC weicht um +5 % (Klemp et al. 2012) bis +10 % (Helms et al. 2010) vom NEFZ-Zyklus ab. Es wird angenommen, dass dies ungefähr dem Korrekturfaktor von +7,7 % für die Verbrennungsmotoren vom NEFZ- zum WLTP-Fahrzyklus entspricht. Dies gewährleistet die Vergleichbarkeit zwischen den Ergebnissen von Benzinern, Dieseln und PHEVs mit den Ergebnissen für BEVs trotz einem anderen zugrunde gelegten Fahrzyklus.

Alle Verbrauchswerte und angenommenen Häufigkeiten sind in Systemmodul C so implementiert, dass diese vom Anwender bei Bedarf variiert werden können. Das Leergewicht eines Kompaktklasse-BEVs wurde in Helms et al. (2010) mit 1.600 kg angenommen, also 265 kg mehr als das des oben berechneten durchschnittlichen Kompaktklasse-Benziners (1.335 kg). Dieses Mehrgewicht scheint plausibel, denn beispielsweise liegt das Leergewicht eines aktuellen e-golfs bei 1.615 kg und das eines Golf 8 TSI 1,5 bei 1.364 kg (siehe volkswagen.de) (Abweichung 251 kg). Das hier ermittelte Zusatzgewicht von 265 kg von BEVs im Vergleich zu Benzinern wird entsprechend auch für die anderen Segmente berücksichtigt (vgl. Tabelle 7.4).

7.3.3.4 Zusammenfassung Kraftstoff- und Stromverbrauch eines Bauteils

Der spezifische Kraftstoff- und/oder Stromverbrauch eines Fahrzeugbauteils $(V_{Referenz})$ ergibt sich also nach Formel (7.23). Die erste zu bewertende Version eines Bauteils wird Referenzbauteil genannt mit dem alternative Bauteilversionen $(V_{Alternativ})$ mit diesem Referenzbauteil verglichen werden können. Formel (7.23) basiert auf Formel (7.1) zuzüglich des Korrekturfaktors von 1,077 zur Umrechnung des Verbrauchs vom NEFZ- in den WLTP-Nutzungszyklus (vgl. Kapitel 7.2.4). Der Verbrauch an Kraftstoff und/oder Strom $(V_{Fahrzeug})$ und das Gewicht $(M_{Fahrzeug})$ des Gesamtfahrzeugs berechnen sich nach den Gleichungen (7.21) und (7.22) der in Kapitel 7.3.3.3 erstellten Referenzfahrzeuge.

$$V_{Referenz} = V_{Fahrzeug} \cdot 1,077 \cdot \frac{m_{Referenz}}{M_{Fahrzeug}}$$
(7.23)

Der Verbrauch an Kraftstoff und/oder Strom durch die Verwendung eines Alternativbauteils wird gemäß Formel (7.24) unter Verwendung der oben

beschriebenen Minderverbrauchsfaktoren¹² (inkl. Sekundäreffekte) (vgl. Kapitel 7.3.2) kalkuliert:

$$V_{Alternativ} = V_{Referenz} + (m_{Alternativ} - m_{Referenz}) \cdot FRV$$

$$\cdot 0,01 \qquad (7.24)$$

7.3.4 Berechnung der THG-Emissionen von Bauteilen in der Nutzungsphase

Die THG-Emissionen (CO₂e) aus der Nutzungsphase eines Bauteils setzen sich aus direkten und indirekten Emissionen zusammen (vgl. Kapitel 7.2.3). Die direkten THG-Emissionen (*THG*_i^{direkt}) [kgCO₂e] berechnen sich nach Formel (7.25). $V_{i,k}$ gibt den oben berechneten spezifischen Verbrauch [l/100km] des Kraftstoffs $k(k \in K)$ für ein Bauteil i an (z.B. Referenz oder Alternativbauteil). L steht für die Laufleistung des Fahrzeugs (z.B.: 150.000 km) und EF_k^{direkt} für den Emissionsfaktor des verwendeten Kraftstoffs (k= Benzin oder Diesel) [kgCO₂e/l]. Nach HBEFA (2014) wird für Benzin ein Emissionsfaktor von 2,42 kgCO₂e/l und für Diesel ein Emissionsfaktor von 2,67 kgCO₂e/l im Modell vorkonfiguriert.

$$THG_i^{\text{direkt}} = V_{i,k} \cdot L \cdot 0,01 \cdot EF_k^{\text{direkt}}$$
(7.25)

Die indirekten THG-Emissionen (THG_i^{indirekt}) [kgCO₂e] bzw. WtT-Emissionen (vgl. Kapitel 7.2.3) können gemäß Formel (7.26) ermittelt werden. Diese berechnen sich auf Basis der gesamten Energie ($Energie_{i,k}^{\text{Gesamt}}$), die zur Bereitstellung des Kraftstoffs (bzw. des Stroms) k indirekt über die Nutzungsphase in Anspruch genommen wurde sowie auf Basis der entsprechenden

¹² FRV (fuel reduction value) steht in den Formel stellvertretend f
ür alle Minderverbrauchsfaktoren und umfasst auch die ERVs (energy reduction values).

Emissionsfaktoren der Vorketten des jeweiligen Kraftstoffs (bzw. der Stromerzeugung) (EF_k^{Vorkette}) (vgl. Kapitel 7.2.3). In der Regel wird Formel (7.26) anhand nur eines Kraftstoffs k angewendet; nur für PHEVs wird die Summe der Ergebnisse für k=Benzin und für k=Strom berechnet. Die Emissionsfaktoren der Vorkette (EF_k^{Vorkette}) zur Bereitstellung von Benzin und Diesel sowie von Strom basierend auf dem Strommix für 2020, bzw. dem geschätzten Strommix für 2030, können Tabelle 7.1 in Kapitel 7.2.3 entnommen werden.

$$THG_{i}^{\text{indirekt}} = \sum_{k \in K} Energie_{i,k}^{\text{Gesamt}} \cdot EF_{k}^{\text{Vorkette}} \cdot 10^{-6}$$
(7.26)

mit:

$$Energie_{i,k}^{\text{Gesamt}} = (V_{i,k=Benzin/Diesel} \cdot H_{u_k} \cdot \rho_k \cdot KEA_k + V_{i,k=Strommix2020/2030} \cdot KEA_k \cdot 3,6) \cdot L \quad (7.27)$$
$$\cdot 0,01$$

Die gesamten Energiebedarfs eines Bauteils Berechnung des (Energie^{Gesamt}) [MJ] während der Nutzungsphase erfolgt auf Grundlage des Kraftstoff- und/oder Stromverbrauchs eines Bauteils i (V_i) gemäß der Formeln (7.23) und (7.24) in Kapitel 7.3.3.4. Für benzin- und dieselbetriebene Fahrzeuge erfolgt die Berechnung von Energie^{Gesamt} durch den Energiegehalt des jeweiligen Kraftstoffs (Heizwert $H_{u\nu}$) [MJ/kg] und dessen Dichte (ρ_k) [kg/l] (Hakamada et al. 2007; Fitch und Smith Cooper 2004). Der Primärenergieaufwand der Vorketten zur Bereitstellung von k wird durch den KEA-Faktor (KEA_k) ausgedrückt (vgl. Tabelle 7.1 in Kapitel 7.2.3). Der gesamte Energiebedarf (Energie^{Gesamt}) elektrischer Antriebe kalkuliert sich ohne die Umrechnung über den Heizwert und die Dichte. Stattdessen erfolgt die Umrechnung von kWh in MJ (entspricht einem Faktor von 3,6) und die entsprechende Berücksichtigung des KEA-Faktors [TJ/TJ] (vgl. Tabelle 7.1).
7.4 Modellierung der End-of-Life-Phase

7.4.1 Grundlagen

7.4.1.1 Einführung

Im Hinblick auf das End-of-Life-Konzept (EoL) und dessen Berücksichtigung im Modell gibt es eine Reihe von Parametern und Faktoren, die eine korrekte Erfassung erschweren. Der in dieser Arbeit im Fokus stehende Produkthersteller hat keine unmittelbare Möglichkeit, die Verwertungsverfahren und den tatsächlichen Weg der Bauteile und Produkte zu beeinflussen (Eberle 2000) oder auch am Lebensende überhaupt Kenntnis darüber zu erlangen. Der Hersteller kann lediglich versuchen, den Weg über verschiedene Aspekte und Faktoren wie eine recyclinggerechte Konstruktion zu beeinflussen (Bilitewski und Härdtle 2013). Außerdem ist der tatsächliche Verwertungspfad in hohem Maße von externen Faktoren bzw. politischen und regulatorischen Rahmenbedingungen (bspw. der Altfahrzeug-Verordnung), technischen Möglichkeiten und Anlagen, Marktgegebenheiten wie Sekundärmaterialpreisen und Aufbereitungskosten abhängig (Ehrenberger et al. 2013).

So schreibt die EU-Altfahrzeug-Richtlinie 2000/53/EG seit Januar 2015 eine Quote von 85 % für Wiederverwendung und Recycling und eine Quote von 95 % für die Verwertung insgesamt vor (EU 2000). Beide Quoten beziehen sich dabei auf das Fahrzeuggewicht. Des Weiteren sind verschiedene weitere Abläufe und Vorschriften zur Behandlung von Altfahrzeugen darin vorgeschrieben. So wird bspw. für Glas und auch für große Kunststoffbauteile, sofern keine Trennung nach dem Schreddern möglich ist, eine Demontage und eine stoffliche Verwertung gefordert. (Bundesministerium der Justiz und für Verbraucherschutz 2012). Ein weiteres Problem stellt die große Zeitspanne zwischen Herstellung und Verwertung dar. Zum einen erscheint es schwierig, zukünftige gesetzliche, technische oder marktwirtschaftliche Entwicklungen zu prognostizieren. Zum anderen bleibt die Ungewissheit durch Qualitätsminderungen, Funktionseinbußen und deren Auswirkungen am Lebensende. (Eberle 2000) Vor allem bei Kunststoffen zeigt sich mitunter durch Umwelteinwirkungen wie Feuchtigkeit, UV-Strahlung und Hitze eine hohe Alterung und damit einhergehend große Qualitätsverluste (Domininghaus et al. 2012). Im Folgenden wird ein allgemeiner materialübergreifender Verwertungsweg beschrieben, der auf Basis verschiedener Studien kombiniert wurde und der Modellierung zugrunde liegt. Damit wird versucht, die End-of-Life-Phase möglichst vieler Bauteile im Systemmodul C berücksichtigen zu können.

7.4.1.2 Recyclingtechnologien und Ablauf

Am Ende des Fahrzeuglebens gelangt ein Altfahrzeug (End-of-Life-vehicle -ELV) zu einem Autoverwerter. Dort müssen in einem ersten Schritt gefährliche Flüssigkeiten wie Benzin, Öl und Kühlflüssigkeit und einzelne Komponenten wie die Batterie entfernt werden (Gruden 2008). Im Anschluss daran können verwertbare und erlösfähige Komponenten demontiert werden. Diese werden entweder als Ersatzteile in Fahrzeugen wiederverwendet oder werden werkstofflich recycelt (Jochem et al. 2004). Auf diese Weise werden zwischen 5 % und 35 % des Gesamtfahrzeuggewichts entfernt, je nach Demontage-Grad (Sakai et al. 2014). Anschließend wird die Restkarosse einer Presse zugeführt, um das Volumen zu reduzieren, was zu einer Senkung der Transportkosten zur Schredderanlage führt. (Martens und Goldmann 2016)

Im Schredder wird die gepresste Restkarosse mechanisch in etwa handgroße Stücke zerkleinert. In daran anknüpfenden Sortieranlagen (z.B. Windsichtungsanlage) werden die zerkleinerten Stücke in eine Schwer- und eine Leichtfraktion aufgeteilt (Eberle 2000). Die Leichtfraktion besteht dabei überwiegend aus Glas, Kunststoffen und Staub, aber auch Holz, Textilien, Rost und geringfügige Metallreste sind darin zu finden. (Nourreddine 2007; Fonseca et al. 2013) Aus der Schwerfraktion werden alle eisenhaltigen Komponenten mittels Magnetabscheidern extrahiert (Gruden 2008). Insgesamt beläuft sich der gewonnene Eisenschrott aus einem ELV auf bis zu 65 % bei einem Reinheitsgrad von etwa 98 % (Sakai et al. 2014). Die Abscheidung von Nichteisen-Metallen erfolgt mittels Wirbelstromanlagen oder Schwimm-Sink-Anlagen. Dabei wird primär Aluminium abgetrennt. Weitere Metalle werden meist über eine Abschmelztrennung im Drehofen separiert (Jochem et al. 2004) Die Reste der Schwerfraktion belaufen sich letztlich auf 2 % bis 8 % (Sakai et al. 2014).

Insgesamt bleiben am Ende ca. 20 % des ELV-Fahrzeuggewichts übrig. Dieser Rest besteht überwiegend aus der Leichtfraktion (Martens und Goldmann 2016). In der Literatur wird diese Restfraktion als Automotive Shredder Residue (ASR) oder Reststoffe-Schredder (RESH) bezeichnet. Vor allem dem Umgang mit dieser Restfraktion wird das größte Potenzial zur Erfüllung der geforderten Verwertungsquoten durch die Rückgewinnung von Kunststoffen beigemessen (Fonseca et al. 2013). Früher wurde der ASR direkt Abfalldeponien zugeführt (Bilitewski und Härdtle 2013). Im Zuge der angesprochenen Altfahrzeugrichtlinie wurde immer mehr energetisch verwertet. Der Heizwert des ASR schwankt dabei je nach Zusammensetzung.

Um zukünftig höhere Recyclingquoten zu erzielen, werden eine Erhöhung des Demontagegrads und eine sortenreine Erfassung der Kunststoffe als Schlüssel angesehen (Zhang und Chen 2014). Darüber hinaus gelten so genannte "Post-Shredder-Technologies" als aussichtsreich. Darunter fallen z.B. die Aufbereitung des ASR zu Füllmaterial für die Bauindustrie (Nourreddine 2007), die Verwendung des ASR als Mineralölersatz bzw. Synthesegas in Hüttenwerken oder die Pyrolyse im Rahmen des chemischen Recyclings (Gruden 2008).

7.4.2 Recyclingquoten und Deponierung

Jochem et al. (2004) machen auf den Umstand aufmerksam, dass in der Literatur zahlreiche Definitionen und Berechnungsvarianten für Recyclingquoten existieren, die oft inkonsistent verwendet werden. In Jochem et al. (2004) nehmen sich die Autoren dieser Problematik an und sammeln und analysieren die am häufigsten verwendeten Definitionen. Die Autoren definieren schließlich die Berechnung einer Gesamtrecyclingquote, die sinnvoll und konsistent verwendet werden kann. Diese Gesamtrecyclingquote ergibt sich für ein Material aus der Multiplikation einer Erfassungsquote mit einer technischen Recyclingquote. Die Erfassungsquote gibt die Menge eines Sekundärmaterials an, die über Sammelsysteme erfasst wurde, bezogen auf die theoretisch zur Verfügung stehende Menge des Sekundärmaterials. Die technische Recyclingquote gibt den Materialanteil an, der nach Durchführung von Recyclingprozessen (z.B. sammeln, zerkleinern, sortieren, verhütten) tatsächlich als Sekundärmaterial zur Verfügung steht.

Die technische Recyclingquote ergibt sich durch Multiplikation der Aufbereitungsquote und der Schmelzausbeute. Als Aufbereitungsquote wird das Verhältnis aus dem der Verhüttung zugeführten Sekundärmaterial zu dem der Aufbereitung zugeführten Material definiert. Die Schmelzausbeute gibt das Verhältnis des geschmolzenen Materials zu der der Verhüttung zugeführten Materialmenge an. Am Beispiel von Aluminium berücksichtigt dies z.B. die Materialmenge, die in der Salzschlacke und Krätze verbleibt und somit nicht als Flüssigmetall in eine nutzbare Form gebracht wird.

Im Folgenden werden die aktuellen Recyclingquoten der für diese Arbeit wichtigen Materialien aus viel zitierten Studien zu Recyclingquoten von Metallen und Kunststoffen zusammengestellt untersucht. Dabei fällt auf, dass die angegeben Recyclingquoten nach wie vor stark schwanken, und die Definitionen der verwendeten Recyclingquoten nicht eindeutig sind. Zudem wurde in den betrachteten Studien eine nach Jochem et al. (2004) definierte Erfassungsquote nicht berücksichtigt und der Fokus lag eher auf technischen Recyclingquoten.¹³ Auch diese Arbeit konzentriert sich auf die technische Recyclingquote, da diese bewertet wieviel Prozent Sekundärmaterial aus dem Materialschrott gewonnen werden kann.

Zudem ist für einige Studien anzunehmen, vor allem für jüngere Veröffentlichungen (z.B. VDI 2014, Koffler 2014, BMU 2017), dass die darin gewählten oder berechneten Recyclingquoten inhaltlich mit der Aufbereitungsquote nach Jochem et al. (2004) gleichzusetzen sind. Zum Beispiel definiert Koffler (2014) die Recyclingquote als den Anteil eines Materials, der einem Recycling zugeführt wird. Die Schmelzausbeute der Verhüttung scheint darin noch nicht enthalten zu sein. In viel zitierten, älteren Studien nimmt die technische Recyclingquote für Stahl Werte zwischen 75 % und 90 % an (vgl. Mayyas et al. 2012; Fitch und Smith Cooper 2004; Jochem et al. 2004). In neueren Studien liegt die Quote nach eigenen Berechnungen zwischen 93 % und 95 %. Diese Berechnungen basieren auf den Aufbereitungsquoten von Stahl nach VDI (2014), Koffler (2014) und BMU (2017) (99 %, 98 % bzw. ca. 100 %), die mit einer nach Jochem et al. (2004) angenommen Schmelzausbeute von 95 % multipliziert wurden, um so die technische Recyclingquote von Stahl zu ermitteln.

¹³ Diese These bzw. dieses Ergebnis wird dadurch gestützt, dass die Erfassungsquote vor allem im Bereich der Altfahrzeuge schwer zu beziffern und eher niedrig ist. Dies ist darauf zurückzuführen, dass Fahrzeuge großteils im Ausland weiterverwendet werden und zwar in Ländern, in denen die Erfassung möglicherweise schlechter geregelt ist (Jochem et al. 2004).

Material	Technische Recyclingquote (Aufbereitungsquote*Schmelzaus- beute)	Nur Aufbereitungsquote (→ Überführung in technische Recyc- lingquote)		
	90 % (Mayyas et al. 2012)	99 % (VDI 2014) → 94 %		
Stahl	75 % (Fitch und Smith Cooper 2004)	98 % (Koffler 2014) → 93 %		
	90 % (Jochem et al. 2004)	~100 % (BMU 2017) → 95 %		
	82 % (Jochem et al. 2004)	95 % (Hakamada et al. 2007) → 90 %		
Alumi	85 % (Fitch und Smith Cooper	95 % (Fraunhofer IPA et al. 2012) →		
nium	2004)	90 %		
	93 % (Buchner et al. 2015)			
	90 % (Paraskevas et al. 2016)			

Tabelle 7.5: Übersicht zu technischen Recyclingquoten von Stahl und Aluminium

Für Aluminium liegen die Aufbereitungsquoten nach Jochem et al. (2004) zwischen 77 % und 98 %. Problematisch sind speziell beim Aluminiumrecycling die verschiedenen Legierungen, die beim Recycling getrennt werden müssen, um im daraus entstehenden Material die entsprechenden Eigenschaften und Qualitäten von Primärlegierungen zu erreichen und zu gewährleisten (VDI 2014). Im Gegensatz zu Stahl herrscht bei Aluminium zudem eine Abhängigkeit vom Demontage-Grad sowie der betreffenden Baugruppe des Fahrzeugs. Für Aluminiumfelgen kann z.B. eine Aufbereitungsquote von 100 % angenommen werden (Jochem et al. 2004). Unter Berücksichtigung eines hohen Demontage-Grads und einer angenommenen Schmelzquote von 89 % ergibt sich die technische Recyclingquote von Aluminium in Jochem et al. (2004) zu 82 %. Fitch und Smith Cooper (2004) kalkulieren mit 85 %. In Fraunhofer IPA et al. (2012) und Hakamada et al. (2007) werden Aufbereitungsquoten von 95 % erwähnt, die noch in technische Recyclingquoten überführt werden müssen (Resultat: 90 %, unter Annahme einer Schmelzausbeute von ca. 95 % nach Paraskevas et al. (2016)). In Buchner et al. (2015) wird eine Aufbereitungsquote von 98 % und eine Schmelzausbeute von 95 % angegeben, sodass sich die Recyclingquote auf 93 % beläuft. In Paraskevas et al. (2016) wurde simuliert, dass in den Aufbereitungsprozessen 4,8 % des Aluminiums verloren

geht und beim Einschmelzen durch Oxidationsverluste nochmals 5,2 %. Daraus resultiert eine technische Recyclingquote von 90 %. Zusammenfassend wird in Systemmodul C für die technische Recyclingquote von Stahl 94 % und für Aluminium 91 % vorkonfiguriert. Diese Werte sind Mittelwerte aus Studien ab 2012 (vgl. Tabelle 7.5).

Für Kunststoffe und Faserverbundkunststoffe ist die Ermittlung einer Recyclingquote uneindeutiger. Ein großer Anteil der Kunststoffe landet gemischt im ASR¹⁴ und muss dort aufwändig getrennt werden. Bei der Demontage werden bis zu 30 % der Kunststoffe abgetrennt und können sortenrein zurückgewonnen werden. Dabei handelt es sich primär um Bauteile wie Stoßfänger, Armaturenbrett und Teile der Innenraumverkleidung. (Zhang und Chen 2014) Nach Schönmayr (2016) wird eine durchschnittliche Recyclingquote für alle Kunststoffe im Fahrzeug von 10 % erreicht. In Fitch und Smith Cooper (2004) wird für reine Kunststoffe und Blends (Mischungen aus mehreren Polymeren) eine Quote von 25 % angenommen. Bei faserverstärkten Kunststoffen mit geringem Fasergehalt wird eine Quote von 4 % und mit hohem Fasergehalt von 0 % angenommen. Für endlosfaserverstärkte Kunststoffe wird in Fraunhofer IPA et al. (2012) eine Quote von 1 % angegeben. Daraus lässt sich die Aussage ableiten, dass je nach Höhe des Faservolumengehalts die Quantität und Qualität von Recycling gemindert wird. (Gruden 2008; VDI 2014; Martens und Goldmann 2016). Auch die Daten der EduPack-Datenbank von CES (2016) liefern ähnliche Recyclingquoten, wobei hier keine spezielle Einschränkung auf den Automobilsektor stattfindet, sondern eine industrieübergreifende Quote für Kunststoffe angegeben wird. Aus Mangel an besseren und neueren Daten werden in dieser

¹⁴ Im ASR liegt der Kunststoffanteil bei bis zu 50 % (Nourreddine 2007; Buekens und Zhou 2014) bzw. bis zu 70 % (Sakai et al. 2014). Umgerechnet auf das Gesamtgewicht wären dies durchschnittlich etwa 150 kg Kunststoff.

Arbeit für recycelbare Kunststoffe die kunststoffspezifischen Recyclingquoten nach Fitch und Smith Cooper (2004) verwendet. Die Information über die Recyclingfähigkeit eines Kunststoffs stammt aus CES (2016).

Für die nicht dem Recycling zuführbaren Kunststoffe (z.B. PUR) wird im Gegensatz zu Fitch und Smith Cooper (2004) nicht ausschließlich von Deponierung, sondern auch von energetischer Verwertung ausgegangen (Buekens und Zhou 2014; Fraunhofer IPA et al. 2012). Hier ist vor allem die Verwendung als Ersatzbrennstoff in Müllverbrennungsanlagen oder Pyrolyse-Verfahren zu nennen (Martens und Goldmann 2016). Der nicht verwertungsfähige Anteil aller Werkstoffe, die beim Schreddern anfallen, lag in Deutschland im Jahr 2017 bei ca. 1,8 % (BMU 2017). Für die Deponierung von Kunststoffen wird daher im Modell eine Quote von 1,8 % angenommen. Für Polypropylen (PP) und Polyurethan (PUR) ergeben sich die in Tabelle 7.6 aufgeführten Quoten, die im Modell voreingestellt sind.

Tabelle 7.6:	Übersicht zu Recyclingquoten ausgewählter Kunststoffe
--------------	---

Kunststoff	Recyclingquote	Thermische Verwertung	Deponierung	
Polypropylen	25 % (Fitch und Smith Cooper 2004)	73,2 %	1,8 % (BMU 2017)	
Polyurethan	0 % (Fitch und Smith Cooper 2004)	98,2 %	1,8 % (BMU 2017)	

7.4.3 Berechnung der EoL-THG-Emissionen

Die Berechnung der THG-Emissionen der EoL-Phase für Stahl und Aluminium erfolgt nach Formel (7.28), die sich als Kombination der Ansätze von Mayyas et al. (2012), Fitch und Smith Cooper (2004), Fraunhofer IPA et al. (2012) und Buekens und Zhou (2014) ergibt.

$$THG_r^{\text{EOL}} = THG_r^{\text{Schred}} + THG_r^{\text{Sek}} + \gamma_r \cdot THG_r^{\text{Dep}} - \tau_r$$

$$\cdot THG_r^{\text{Pri}} - (1 - \tau_r - \gamma_r) \cdot THG_r^{\text{therm}}$$
(7.28)

 THG_r^{Pri} beziffert die ursprünglich emittierten THG-Emissionen der Primärherstellung des Materials r. τ_r gibt die materialspezifische Recyclingquote an (vgl. Kapitel 7.4.2). Das Produkt aus $\tau_r \cdot THG_r^{\text{Pri}}$ wird entsprechend von den sonstigen THG-Emissionen der EoL-Phase im Sinne einer Gutschrift abgezogen. Analog erfolgt eine Gutschrift für die thermische Verwertung des Materials r (THG_r^{therm}) auf Basis der Verwertungsquote, die sich aus $(1 - \tau_r - \gamma_r)$ ergibt. γ_r definiert darin die Deponierungsquote. THG_r^{Schred} weist die indirekten THG-Emissionen für die eingesetzte Energie zum Schreddern und Aufbereiten des Materials r aus. THG_r^{Sek} bezeichnet die THG-Emissionen, die direkt oder indirekt bei der Herstellung des Sekundärmaterials emittiert werden. Alle THG-Variablen werden in kgCO₂e/kg angegeben. THG_r^{Dep} steht für die THG-Emissionen, die aufgrund der Deponierung des Materials r emitiert werden. Dieser Wert wird in CalEPA (2004) auf 0,004 kgCO₂e/Fahrzeug beziffert. Mit dem Durchschnittsgewichts eines Kompaktklassefahrzeugs (1.386 kg für Benziner und Diesel, vgl. Kapitel 7.3.3.3) ergeben sich die THG-Emissionen der Deponierung zu 2,87·10⁻⁶ kgCO₂e/kg. Weitere voreingestellte Werte für die Formelvariablen können Tabelle 7.7 entnommen werden.

Variable	THG_r^{Pri}	$E_r^{\rm Schred}$	THG _r ^{Schred}	THG _r ^{Sek}	$ au_r$	THG_r^{therm}	γr	THG_r^{Dep}
Einheit	[kg/kg]	[kWh/t]	[kg/kg]	[kg/kg]	[%]	[kg/kg]	[%]	[kg/kg]
Stahl	2,35	68,5	0,026	0,801	94	-	-	-
Aluminium	14,11	127,5	0,048	0,992	91	-	-	-
PP	3,06	127,5	0,048	1,040	25	3,22	5	2,87·10 ⁻⁶
PUR	3,37	127,5	0,048	-	0	2,10	5	2,87·10 ⁻⁶

Tabelle 7.7: Im Modell vorkonfigurierte Werte zur Berechnung der EoL THG-Emissionen

Für THG_r^{Pri} und THG_r^{Sek} werden Durchschnittswerte angenommen, um eine Vergleichbarkeit bei der EoL-Bilanzierung von Produkten zu schaffen. Denn basiert ein Bauteil bereits teilweise oder vollständig auf Sekundärmaterial, ist letztlich nicht bekannt, mit welchem Carbon Footprint das Primärmaterial ursprünglich erzeugt wurde. Zur Berechnung der Gutschrift werden für Stahl und Aluminium deshalb die in Kapitel 5 berechneten Durchschnittswerte der wichtigsten Primär- und Sekundärmaterialhersteller verwendet. Für die Materialien PP und PUR stammen die Durchschnittswerte aus CES (2016), da sich Kapitel 5 auf die Vorprodukte Propylen bzw. TDI fokussiert, aber nicht die Weiterverarbeitung zu PP bzw. PUR beinhaltet. Die eingesparten THG-Emissionen je nach Kunststoff THG_r^{therm} basieren ebenfalls auf CES (2016). Die Recycling- und Deponierungsquoten au_r und γ_r stammen aus Kapitel 7.4.2. Die gewählten Werte für die THG-Emissionen des Schredderns und Sortierens (THG_r^{Schred}) basieren auf der dazu benötigten Energie $(E_r^{\text{Schred}}, \text{ vgl. Tabelle 7.7})$, die mit dem Emissionsfaktor des nationalen Strommixes multipliziert wird (vgl. Strommix, Kapitel 7.2.3). E_r^{Schred} setzt sich aus den folgenden Prozessen zusammen: Trockenlegung und Teildemontage mit 5 kWh_{el}/t bzw. im Falle einer Volldemontage 9 kWh_{el}/t (das Verhältnis von Teil- zu Volldemontage wird auf 1:4 festgesetzt) sowie dem Schreddern einer teildemontierten Karosse mit 46 kWhel/t bzw. 32 kWhel/t im Falle einer volldemontierten (leichteren) Karosse (Jochem et al. 2004). Für Windsichtung und Transport kann materialunabhängig ein Energiebedarf von 25 kWh_{el}/t angenommen werden (Wallau 2001). Für Stahl ergibt sich demnach eine benötigte Energiemenge von 68,5 kWh_{el}/t¹⁵. Für Aluminium und Kunststoffe ergibt sich durch die zusätzliche Energiemenge einer Schwimm-Sink-Anlage (59 kWhel/t) (Jochem et al. 2004) ein Wert von 127,5 kWh_{el}/t.

¹⁵ $E_{Stahl}^{Schred} = 0.75 \cdot (9 + 32) + 0.25 \cdot (5 + 46) + 25 = 68.5.$

7.5 Anwendung am Beispiel des deutschen Fahrzeugmarktes

7.5.1 Funktionsweise

In diesem Kapitel wird das entwickelte Systemmodul C anhand des Fallstudienbauteils aus Systemmodul B angewendet. Für die Berechnungen liegt der deutsche Fahrzeugmarkt zugrunde, für den in Kapitel 7.3.3.3 Referenzfahrzeuge erstellt wurden, die bezüglich Fahrzeuggewicht und Kraftstoffbzw. Stromverbrauch Neuzulassungen des deutschen Fahrzeugmarkts widerspiegeln. Für sämtliche Modellparameter und -variablen werden die in den Kapitel 7.2, 7.3 und 7.4 recherchierten oder berechneten Werte herangezogen. Diese wurden im Rahmen der Modellentwicklung als Standardwerte implementiert. Solche voreingestellten Modellparameter sind z.B. der Rollwiderstand, Motorenwirkungsgrade oder Recyclingquoten. Davon ausgenommen sind die Variablen, anhand derer Szenarien für die Fallstudie erstellt werden. Dies sind die Lebensdauer bzw. die Laufleistung eines Kraftfahrzeugs und der zugrunde gelegte Strommix für BEVs und PHEVs (vgl. Kapitel 7.5.2). Grundsätzlich ist eine Anpassung aller Werte durch den Modellanwender für weitere Analysen natürlich möglich.



Abbildung 7.1: Funktionsweise zur Anwendung des Systemmodul C

7.5.2 Szenarien

Insgesamt werden die THG-Emissionen für vier verschiedene Szenarien berechnet (vgl. Tabelle 7.8): Ein Szenario "Basis" in dem mit einer Laufleistung von 150.000 km und einem Strommix aus dem Jahr 2020 gerechnet wird. Ein Szenario "km_max", in dem ceteris paribus (c.p.) die Laufleistung auf 300.000 km hochgesetzt wird . Ein Szenario "Strommix_2030", in dem der geschätzte Strommix des Jahres 2030 verwendet wird (c.p.) sowie ein Szenario "Strommix_2030; km_max", welches sowohl den Strommix des Jahres 2030 als auch eine Laufleistung von 300.000 km umfasst.

Das Fallstudienbauteil existiert in einer Stahlversion mit einem Gewicht von 0,352 kg und einer Aluminiumversion, die 0,188 kg wiegt. Für beide Bauteilversionen werden alle vier Szenarien berechnet. Darüber hinaus werden die THG-Emissionen in direkte (tank-to-wheel) und indirekte Emissionen (wellto-tank) aufgegliedert. Auf diese Weise kann der Einfluss der Vorketten, also der indirekten Emissionen, auf die Gesamtemissionen gezeigt werden.

Szenario:	Basis	km_max	Strom- mix_2030	Strommix_2030; km_max		
Laufleistung [km]:	150.000	300.000	150.000	300.000		
Strommix [Jahr]:	2020	2020	2030	2030		
Fahrzeugsegment:	Kompaktklasse					
Gewicht Stahlversion [kg]:		0	,352			
Gewicht Aluminiumversion [kg]:		0	,188			

Tabelle 7.8: Erstellte Szenarien für die Berechnung der THG-Emissionen der Nutzungs- und EoL-Phase

7.5.3 Auswertung

Die mithilfe von Systemmodul C berechneten Ergebnisse zeigen die THG-Emissionen eines Fahrzeugbauteils (hier das Fallstudienbauteil aus Systemmodul B) im Hinblick auf die vier gewählten Szenarien. Die Ergebnisse sind vor allem für Systemmodul D in Kapitel 8 relevant, in welchem die Ergebnisse aller anderen Systemmodule (A, B und C) zur Entscheidungsunterstützung zusammengeführt werden. Zur Beantwortung der Frage, welche Bauteilvariante schließlich in welchem Fahrzeug verbaut werden sollte, wird daher auf Kapitel 8 verwiesen. Im Folgenden werden jedoch einige Zwischenergebnisse präsentiert, die durch eine isolierte Betrachtung der Nutzungs- und EoL-Phase erzielt werden konnten. In Tabelle 7.9 wird für jedes Szenario und jede Bauteilvariante (Stahl oder Aluminium) veranschaulicht, welche Antriebsart zu den niedrigsten THG-Emissionen führt. Die niedrigsten THG-Emissionen eines Bauteils in der Nutzungsphase sind dazu hellgrün markiert und die niedrigsten THG-Emissionen aus der Nutzungs- und EoL-Phase dunkelgrün (vgl. Tabelle 7.9).

THG-Emissionen	des Fallstu-		Stahlva	ariante		Aluminiumvariante			
dienbauteils in [kgCO₂e/Bauteil] je Material und Antriebsart		Benzi- ner	Diesel	PHEV	BEV	Benzi- ner	Diesel	PHEV	BEV
	Direkt	5,96	4,44	1,31	-	3,82	2,54	0,73	-
Szenario	Indirekt	1,67	0,97	3,88	6,37	1,07	0,55	2,78	4,82
Basis:	Nutzung:	7,62	5,41	5,19	6,37	4,88	3,09	3,51	4,82
150.000 km	EoL:		-0,	,49			-2,	22	
	Gesamt:	7,13	4,93	4,70	5,88	2,66	0,87	1,29	2,60
	Direkt	11,92	8,89	2,63	-	7,63	5,08	1,47	-
Szenario	Indirekt	3,33	1,93	7,76	12,74	2,13	1,10	5,55	9,64
km_max:	Nutzung:	15,25	10,82	10,39	12,74	9,77	6,18	7,02	9,64
300.000 km	EoL:		-0,	,49		-2,22			
	Gesamt:	14,76	10,33	9,90	12,25	7,55	3,96	4,80	7,42
	Direkt			1,31	-			0,73	-
Szenario Strom-	Indirekt	≙Basiss	zenario	2,35	3,29	≙Basiss	zenario	1,63	2,49
mix_2030:	Nutzung:			3,66	3,29			2,36	2,49
150.000 km	EoL:		-0,	,54		-1,33			
	Gesamt:	7,09	4,87	3,12	2,75	3,55	1,76	1,03	1,15
Szenario Strom-	Direkt	11,92	8,89	2,62	-	7,63	5,08	1,46	-
mix 2030;	Indirekt	3,33	1,93	4,70	6,58	2,13	1,10	3,26	4,98
km_max:	Nutzung:	15,25	10,82	7,32	6,58	9,77	6,18	4,72	4,98
Strommix 2030,	EoL:		-0,	,54		-1,33			
300.000 km	Gesamt:	14,71	10,28	6,79	6,04	8,43	4,85	3,39	3,64
Legende		Niedrigs	te THG-	Emission	en in de	er Nutzui	ngsphas	e	
		Niedrigste THG-Emissionen in der Nutzungs- und EoL-Phase							

 Tabelle 7.9:
 Szenariobedingte THG-Emissionen der Nutzungs- und EoL-Phase des

 Fallstudienbauteils [kgCO2e/Fallstudienbauteil] je Material und Antriebsart

Zunächst kann bestätigt werden, dass es bezüglich der THG-Emissionen der Nutzungsphase eines Fahrzeugbauteils eine große Rolle spielt, mit welcher Antriebstechnik das Fahrzeug betrieben wird, in welches das Bauteil eingebaut wird. Die Abweichung zwischen dem Minimal- und Maximalwert beträgt im Basis-Szenario für die Stahlvariante des Fallstudienbauteils 47 % (7,62 vs. 5,19 kgCO₂) und für die Aluminiumvariante 58 % (4,88 vs. 3,09 kgCO₂). Im Szenario "Strommix_2030" beträgt die Abweichung für die Stahlvariante 132 % (7,09 vs. 2,75 kgCO₂e) und 107 % (9,77 vs. 4,72 kgCO₂e) für die Aluminiumvariante. In den Szenarien "km_max" sind die prozentualen Abweichungen identisch, da sich nur die Laufleistung verändert. Bezüglich der THG-Emissionen zeigt sich außerdem, unabhängig von der Laufleistung des Fahrzeugs, dass die THG-Emissionen dieselbetriebener Fahrzeuge am geringsten durch die Emissionen in den Vorketten (indirekte Emissionen/well-to-tank) beeinflusst werden (18 %). Bei benzinbetriebenen Fahrzeugen machen die well-to-tank THG-Emissionen 22 %, bei PHEVs 75 % und bei BEVs 100 % aus. Aufgrund des geringeren Gewichts der Aluminiumvariante sind die THG-Emissionen der Nutzungsphase logischerweise geringer als die der Stahlversion (vgl. Tabelle 7.9). Eine Gesamtbewertung inklusive der Materialherstellung und -verarbeitung erfolgt in Kapitel 8.

Für das Stahlbauteil sind im Basis-Szenario die THG-Emissionen am höchsten, wenn es in einem benzinbetriebenen Fahrzeug verbaut ist (7,62 kgCO₂e). Am geringsten sind die THG-Emissionen bei einer Verwendung im PHEV (5,19 kgCO₂e). Im Gegensatz dazu weist das Aluminiumbauteil die niedrigsten THG-Emissionen in dieselbetriebenen Fahrzeugen auf (3,09 kgCO₂e). Es fällt auf, dass ein Einbau des Bauteils in ein BEV für beide Materialvarianten zu höheren THG-Emissionen als beim Diesel oder PHEV führt. Diese Aussage lässt sich durch den linearen Ansatz und die gewichtsinduzierten Minderverbrauchsfaktoren (vgl. Kapitel 7.3.2 und 7.3.2) letztlich auf alle Komponenten eines Fahrzeugs übertragen, die aus Stahl oder Aluminium bestehen. Erst im Strommix_2030-Szenario weisen BEVs niedrigere THG-Emissionen als die anderen Antriebstechniken auf (3,29 kgCO₂e für das Fallstudienbauteil). Das gilt aber nur für Stahlbauteile. Für die Aluminiumvariante ist es auch mit dem erwarteten Strommix für das Jahr 2030 aus CO2e-Sicht ökologischer, diese in PHEVs und nicht in BEVs zu verbauen. Der hier verwendete geschätzte Strommix für 2030 in Deutschland nach UBA (2015) beläuft sich auf einen Emissionsfaktor von 0,242 kgCO₂e/kWh (vgl. Kapitel 7.2.3). Nach eigenen Berechnungen, auf Grundlage der Ergebnisse zur Nutzungsphase in Tabelle 7.9, sind BEVs für Aluminiumbauteile aus CO_2e -Perspektive erst dann PHEVs vorzuziehen, wenn der Emissionsfaktor des deutschen Strommix auf 0,229 kg CO_2e /kWh reduziert werden kann. Das bedeutet eine notwendige Verbesserung um ca. 39 % zum Gegenwartswert.¹⁶

Auch unter Einbeziehung der EoL-Phase bleiben die Ergebnisse zur CO₂-Vorteilhaftigkeit von Antriebstechniken unverändert, da die EoL THG-Emissionen im Modell nur vom Material und vom gewählten Strommix abhängen. Im Basis-Szenario führen die THG-Emissionen der EoL-Phase für das Stahlbauteil der Fallstudie zu einer Gutschrift von 0.487 kgCO₂e/Bauteil. Für das Aluminiumbauteil werden sogar 2,218 kgCO₂e/Bauteil gutgeschrieben. Die THG-Gutschriften des Recyclings der EoL-Phase übersteigen also für beide Materialien die THG-Emissionen der Materialaufbereitung und Sekundärherstellung (vgl. Kapitel 7.4), sodass sich insgesamt die oben genannten Gutschriften für die EoL-Phase ergeben. Die Gutschrift für Aluminium fällt deutlich höher aus als die für Stahl, da die Primärherstellung von Aluminium viel treibhausgasintensiver als die von Stahl ist, und über die Recyclingquote entsprechend der Anteil gutgeschrieben wird, der weitergenutzt werden kann. Der "Rucksack" der THG-Emissionen aus der Primärherstellung wird also im Verhältnis der Recyclingquote an den nächsten Lebenszyklus weitergegeben (vgl. DIN CEN ISO/TS 14067:2013). Für das Jahr 2030 fällt die THG-Gutschrift des Aluminium entsprechend geringer aus, da die THG-Emissionen der Primäraluminiumherstellung ebenfalls im Zuge der Verwendung des Strommixes aus dem Jahr 2030 stark reduziert werden können und die RC-Gutschrift somit ebenfalls abnimmt. Zur Abschätzung der THG-Emissionen der Herstellung von Stahl und Aluminium unter Berücksichtigung eines Strommixes des Jahres 2030 wurden die entsprechenden Teilmodule des Systemmodul A

¹⁶ Für das Jahr 2020 liegt der Schätzwert nach UBA (2015) bei 0,376 kgCO₂e/kWh.

verwendet. Die Ergebnisse für das Jahr 2030 können dem Anhang entnommen werden (vgl. Tabelle A.7 und Tabelle A.8). Für die EoL-Phase ergeben sich für das Jahr 2030 THG-Gutschriften für die Stahlvariante in Höhe von 0,54 kgCO₂e und für die Aluminiumvariante von 1,33 kgCO₂e.

Zusammenfassend kann auf Grundlage der Berechnungen für Deutschland die Aussage getroffen werden, dass Diesel- und Hybridfahrzeuge noch für mindestens 10 Jahre zu geringeren THG-Emissionen in der Nutzungsphase beitragen als rein elektrische Fahrzeuge. Dieses Resultat bestätigt damit auch andere aktuelle Studien, die PHEVs als benötigte "Brückentechnologie" zu einer treibhausgasarmen Mobilität bezeichnen (z.B.: Merkle 2018; Göhler et al. 2019). Weiter kann für Fahrzeugmodelle ab 2016 gezeigt werden, dass bereits produzierte Dieselfahrzeuge aus "CO₂e-Sicht" Benzinern und BEVs vorzuziehen sind. Es soll erwähnt werden, dass hier bewusst von bereits produzierten Fahrzeugen gesprochen wird, da nur deren Nutzungs- und EOL-Phase bewertet wird. Es wird also keine generelle Aussage über die ökologische Vorteilhaftigkeit von Antriebstechniken oder Fahrzeugmodellen getroffen. Dies wäre nur möglich, wenn sämtliche Komponenten eines Fahrzeugs (z.B. Batterie) inklusive Vorketten und Herstellung bewertet würden.

Der Vergleich der Verbrauchsabweichungen der unterschiedlichen Antriebstechniken je nach Szenario (s.o.) hat bereits gezeigt, dass der Zusammenhang zwischen Verbrauch und Laufleistung proportional ist. Eine steigende Laufleistung verstärkt somit die absolute bzw. kumulierte Einsparwirkung am Lebensende und erhöht damit die Notwendigkeit einer Verbrauchsreduktion. Gleichzeitig steigt mit der Laufleistung die Wahrscheinlichkeit, dass sich in der Herstellung energieintensivere Leichtbaumaterialien gegenüber konventionellen Stahlbauteilen amortisieren können. Allerdings kann dem entgegengestellt werden, dass dieser Effekt aufgrund der kontinuierliche Effizienzsteigerungen in der Antriebstechnik an Wirkung verliert, da die Bedeutung gewichtsbedingter Kraftstoffeinsparpotenziale entsprechend abnimmt. Zudem könnte es außerdem sein, dass ein bestimmtes Material ökologisch vorteilhaft für Fahrzeuge mit Verbrennungsmotoren ist, aber für elektrische Fahrzeuge ein anderes Material zu bevorzugen ist (vgl. Kapitel 8).

7.6 Kritische Würdigung und Ausblick

Systemmodul C bietet die Möglichkeit, THG-Emissionen in den Lebenszyklusabschnitten Nutzung und EoL von Bauteilen im Fahrzeug aus verschiedenen Materialien zu quantifizieren und zu vergleichen. Dazu wurden aktuelle Referenzfahrzeuge für den deutschen Fahrzeugmarkt entwickelt, die durchschnittliche reale Verbräuche und Fahrzeuggewichte je nach Fahrzeugsegment widerspiegeln.

In Systemmodul C wurde berücksichtigt, dass ein Materialwechsel eines Bauteils in der Regel nur zu gewichtsabhängigen Verbrauchseinsparungen führt, und beispielsweise der Luftwiderstand vernachlässigt werden kann. Dazu wurden Minderverbrauchsfaktoren berechnet, die die Änderung des Kraftstoffverbrauchs aufgrund einer Gewichtsänderung beschreiben. Gewichtsveränderungen durch Material- oder Konstruktionsänderungen eines Bauteils führen jedoch auch häufig zu Sekundäreffekten, die signifikante Auswirkungen auf den Fahrzeugverbrauch haben. Um dem Rechnung zu tragen wurden die Minderverbrauchsfaktoren um Sekundärfaktoren erweitert. Während solche Sekundäreffekte und entsprechende Sekundärfaktoren für Verbrennungsmotoren bereits gut erforscht und leicht in das Modell integriert werden konnten, wurden Sekundäreffekte für BEVs und PHEVs in der Wissenschaft bisher nicht untersucht (vgl. Kapitel 7.3.2). Daher wurden die Sekundärfaktoren von Fahrzeugen mit Verbrennungsmotor (durchschnittlicher Sekundärfaktor von 2,37) auf BEVs und PHEV übertragen. Hinsichtlich der Sekundäreffekte für elektrische Fahrzeuge besteht also ein großer Forschungsbedarf. Sobald plausible Sekundärfaktoren für elektrische Fahrzeuge existieren, können diese in Systemmodul C implementiert werden, um noch präzisere Ergebnisse berechnen zu können.

Der Kraftstoff- und Stromverbrauch wurde auf Basis des NEFZ kalkuliert, um zum Zeitpunkt der Modellentwicklung auf eine breite Literatur- und Datenbasis zugreifen zu können. Allerdings wird der NEFZ seit 2020 nicht mehr benutzt. Um die Berechnungen auf das Niveau des aktuellen und der Realität stärker angemessenen WLTP Zyklus zu übertragen, wurde ein etablierter Zuschlagsfaktor von 7,7 % verwendet (vgl. Kapitel 7.2.4). Zukünftig wäre es denkbar, dass Systemmodul um neue Fahrzeugmodelle zu erweitern, d.h. um neue Durchschnittsdaten zum Fahrzeugverbrauch und -gewicht (aktueller Datenstand: 4. Quartal 2016). In diesem Zuge könnten direkt WLTP-Daten in das Systemmodul eingepflegt werden, und der aktuelle Zuschlagsfaktor müsste nicht mehr berücksichtigt werden. Im Rahmen der Betrachtung neuer Fahrzeugmodelle könnte das Modell auch um Nutzfahrzeuge erweitert werden.

Zur Bewertung der End-of-Life Phase von Fahrzeugbauteilen wurden aktuelle Recyclingquoten der verschiedenen Materialien recherchiert. Die in dieser Arbeit implementierten, materialspezifischen Recyclingquoten sind aufgrund der nicht vorhandenen Datenbasis allerdings Mittelwerte für Gesamtfahrzeuge und nicht bauteilspezifisch. Um auch in der EoL-Phase den generischen und bauteilspezifischen Ansatz zu gewährleisten, könnten Bauteile in weiteren Forschungsarbeiten in verschiedene Kategorien oder Cluster eingeteilt werden. Auf diese Weise könnten Materialien je nach Bauteil individuellere Recyclingquoten zugeordnet werden. Außerdem konnten die angesprochenen Post-Shredder-Technologien in Systemmodul C nicht berücksichtigt werden, da keine Kennwerte und Bilanzen gefunden werden konnten, die auf Fahrzeugbauteile anwendbar waren.

In zukünftigen Arbeiten könnten zudem Szenarien berechnet werden, in denen die Erfassungsquote in der Recyclingquote berücksichtigt wird (vgl. Jochem et al. 2004). Da ein großer Anteil der Altfahrzeuge im Ausland weiterverwendet wird, gelangen große Mengen des verbauten Materials gegebenenfalls nicht in den Kreislauf zurück, sondern werden für andere Dinge verwendet und unterliegen dabei in der Regel einem Downcycling. Durch die Integration der Erfassungsquote würde die Recyclingquote deutlich sinken. Dies hätte zur Folge, dass die Recycling-Gutschrift in der EoL-Phase signifikant abnähme. Dadurch würde die gesamte EoL-Phase deutlich höhere THG-Emissionen, vor allem für Aluminiumbauteile, aufweisen. Demgegenüber kann angeführt werden, dass einige dieser Materialien trotzdem irgendwann einem Recycling zugeführt werden können und bis dahin als "aktives Rohstofflager" verstanden werden können.

Auch der Aspekt der Recycling-Gutschrift könnte in zukünftigen Studien bspw. anhand von Szenarien näher erforscht werden. Bei der Recycling-Gutschrift wird in dieser und vielen anderen Studien bisher unterstellt, dass ein Material gemäß der angegebenen Recyclingquote gleichwertig wiederverwendet werden kann, zum Beispiel um ein identisches Bauteil erneut zu erzeugen. Gegebenenfalls eignet sich ein recyceltes Material aber nicht, um die im Lastenheft formulierten Anforderungen an ein Bauteil zu erfüllen. In weiteren Studien könnte dazu ein sogenannter Allokationsfaktor eingeführt werden, der beschreibt, in welchem Maß das recycelte Material tatsächlich mit gleicher Qualität wieder eingesetzt wird. Als mögliche Referenz bzw. Anleitung zur Handhabung sei die Leitlinie DIN CEN ISO/TS 14067:2013¹⁷ genannt, in der ein solcher prozentualer Allokationsfaktor (A) beschrieben wird. Überdies könnten auch Szenarien untersucht werden, in denen die zeitliche Diskrepanz zwischen Produktherstellung und EoL-Phase berücksichtigt wird. Bislang beziehen sich die THG-Berechnungen sowohl für die Nutzungsphase als auch die EoL-Phase auf die gleiche Datenbasis, obwohl beispielsweise die durchschnittliche Lebensdauer eines Pkw in Deutschland ca. 18 Jahre beträgt (Statista 2014). Bei so langen Produktlebensdauern ist davon auszugehen, dass sich einige der verwendeten Daten wie z.B. die Zusammensetzung des Strommix oder die Recyclingquoten von Materialien im

¹⁷ Bei diesem Dokument handelt es sich um eine Leitlinie, die aufgrund von Vorbehalten noch nicht vom DIN als Norm herausgegeben wurde. A=0 entspräche einem vollständigen Downsizing und A=1 eine 100 % Übereinstimmung der physikalischen Eigenschaften mit dem Primärprodukt. (DIN CEN ISO/TS 14067:2013)

Zeitverlauf ändern. Für solche Daten könnten in weiteren Untersuchungen/Szenarien Schätzwerte verwendet werden, um zukünftige EoL-THG-Emissionen präziser abzuschätzen.

In Systemmodul C wurden bislang noch keine Pkw mit Brennstoffzellenantrieb betrachtet, da deren Marktanteil, selbst unter Fahrzeugen mit alternativen Antrieben (BEVs, Hybride und Gas-Pkw), im Jahr 2019 nur bei 0,065 % lag. Von 317.634 neu zugelassenen Fahrzeugen mit alternativem Antrieb haben nur maximal 224¹⁸ Fahrzeuge eine Brennstoffzelle. (Kraftfahrtbundesamt 2019) Zudem wird von Experten aus Wissenschaft und Industrie angenommen, dass für brennstoffzellenbetriebene Pkw vor 2030 kein nennenswerter Volumenmarkt entsteht (CATI und AMZ 2019). Langfristig wäre eine Erweiterung von Systemmodul C um Brennstoffzellenfahrzeuge jedoch anzustreben. Speziell die gegenwärtige, europäische Investitionsoffensive im Bereich Wasserstoff und Brennstoffzellentechnik (z.B. European Commission 2020a, 2020b) könnte dazu führen, dass die Entwicklung und Etablierung im Fahrzeugmarkt schneller vorangeht, als aktuell von den Experten angenommen.

¹⁸ In der Studie des Kraftfahrbundesamtes (Kraftfahrtbundesamt 2019) wurden 224 Fahrzeuge als "Andere" ausgewiesen. Es wird angenommen, dass darunter insbesondere Wasserstofffahrzeuge fallen, da diese nicht als eigene Klasse aufgeführt sind.

8 Systemmodul D: Entscheidungsunterstützung zur Konfiguration einer Wertschöpfungskette

8.1 Modellkonzept

Systemmodul D enthält verschiedene Ansätze zur Entscheidungsfindung und -unterstützung, vergleicht diese miteinander und ermöglicht auch kombinierte Entscheidungen, um fundiert Entscheidungsunterstützung leisten zu können (vgl. Kapitel 4.2). Abbildung 8.1 zeigt die Vorgehens- und Funktionsweise des Systemmoduls D.

Voraussetzung der Entscheidungsunterstützung ist zunächst die notwendige Definition des **Entscheidungsproblems** durch den Entscheidungsträger. Zielstellung dieser Arbeit ist die Konfiguration klimafreundlicher und gleichzeitig ökonomischer Wertschöpfungsketten (vgl. Kapitel 1). Daraus ergeben sich für einen Entscheidungsträger die folgenden Entscheidungsprobleme (vgl. Kapitel 1.1 und Kapitel 4.2):

- Welches Material soll für ein Produkt verwendet werden?
- Von welchem Lieferant bzw. Werk soll das Material bezogen werden?
- Welche Fertigungsverfahren sollen zur Verarbeitung des Materials, bis hin zum finalen Produkt eingesetzt werden (Fertigungs-/Technologiekette)?

• Wie sollte das Produkt in der Nutzungsphase eingesetzt werden?

Daraufhin erfolgt je nach Fragestellung und Entscheidungsproblem die **Identifikation sämtlicher Entscheidungsalternativen.** Diese umfassen:

- die Bestimmung zulässiger Materialien, die für das Produkt gemäß der Produktanforderungen im Lastenheft eingesetzt werden können;
- die Recherche zur Verfügung stehender Materiallieferanten;
- und die Identifikation möglicher Nutzungsarten des Produkts.

Im nachfolgenden Schritt werden **Entscheidungskriterien** festgelegt, auf deren Grundlage eine Entscheidung getroffen werden soll. Wie in Kapitel 2 festgelegt und begründet, bezieht sich diese Arbeit auf die beiden Kriterien GWP (in CO₂e) und Herstellkosten eines Produkts. Anschließend werden mögliche **Szenarien definiert und Systemgrenzen festgelegt**. Relevante Szenarien für die Nutzungsphase eines Produkts, das in Fahrzeugen verbaut wird, sind z.B. die Fahrzeuglaufleistung oder die Antriebsart (vgl. Kapitel 7.5.2). Hinsichtlich festzulegender Systemgrenzen wird vor allem unterschieden, ob das Produkt mit oder ohne Nutzungs- und EoL-Phase bewertet werden soll.



Abbildung 8.1: Konzept und Logik des Systemmoduls D zur Entscheidungsunterstützung bei der Konfiguration von klimafreundlicheren und ökonomischen Produkt-Wertschöpfungsketten

Nachdem die Ausgangslage des Entscheidungsproblems durch die bisherigen Schritte definiert ist, müssen die für die Entscheidungsfindung benötigten **Daten beschafft** werden. Sämtliche Daten zum GWP und den Kosten von Produktionsprozessen und Produkten werden je nach Lebenszyklusphase des Produktes aus den Systemmodulen A, B und C bezogen.

Basierend auf den identifizierten Entscheidungsalternativen und den Daten der Systemmodule A, B und C wird eine **vollständige Enumeration** aller

möglichen Kombinationen aus Materialart, Materialhersteller, Fertigungsketten und Nutzungsart erstellt. Unter allen enumerierten Wertschöpfungskettenkombinationen ermittelt Systemmodul D im nächsten Schritt jene Wertschöpfungsketten die pareto-optimal sind (sog. Pareto-Front), d.h. hinsichtlich beider Entscheidungskriterien GWP und Kosten am besten abschneiden. **Die Pareto-Front** wird entsprechend Kapitel 3.3.4 erstellt und dem Modellanwender sowohl tabellarisch als auch bildlich dargestellt. Durch die Identifikation der pareto-optimalen Wertschöpfungsketten können alle nicht-pareto-optimalen Wertschöpfungsketten vernachlässigt werden, da sie den pareto-optimalen Lösungen unterlegen sind (vgl. Kapitel 3.3.4).

Zur Entscheidungsunterstützung stehen dem Modellanwender in Systemmodul D drei verschiedene Ansätze zur Verfügung. Zum Einsatz kommen einerseits der THG-Vermeidungskostenansatz (vgl. Kapitel 3.4) sowie andererseits die multiattributiven Entscheidungsmodelle Weighted Sum Method (WSM) (vgl. Kapitel 3.3.5) und **PROMETHEE** (vgl. Kapitel 3.3.6). Durch die Anwendung aller drei Methoden können die Resultate der einzelnen Methoden verglichen werden, um auf diese Weise eine möglichst fundierte Entscheidung treffen zu können. Sowohl zur WSM als auch zu PROMETHEE führt Systemmodul D automatisiert eine Stabilitätsanalyse der Ergebnisse durch. Dazu werden für jedes zu betrachtende Szenario sämtliche Kriteriengewichtungsmöglichkeiten von 0 % bis 100 % berücksichtigt. Darüber hinaus wird in Systemmodul D eine detaillierte PCF-Analyse durchgeführt, um eine Beziehung zu den THG-Emissionen entlang des Produktlebenszyklus herzustellen. Kern der PCF-Analyse ist die Bewertung des Einflusses der Materialund Lieferantenwahl auf den PCF. Dabei wird für jedes mögliche Material und jeden möglichen Lieferanten berechnet, wie groß dessen Anteil am PCF wäre und wie stark der PCF durch die Material- und Lieferantenwahl reduziert werden könnte. Alle Berechnungslogiken und Ergebnisdarstellungen des Systemmoduls D sind in VBA programmiert und laufen nach Eingabe der

Informationen aus den oben genannten Arbeitsschritten automatisiert ab (vgl. Abbildung 8.1).

8.2 Anwendung von Systemmodul D am Beispiel eines Pkw-Bauteils

8.2.1 Ausgangslage und Datenbasis

Sämtliche für die Entscheidungsfindung benötigten Daten werden spezifisch und systematisch für jedes zu betrachtende Szenario (vgl. Kapitel 8.2.2) und jede festgelegte Systemgrenze mittels der Systemmodule A, B und C berechnet und zur Auswertung an Systemmodul D übertragen.

Die folgende Fallstudie bezieht sich auf das Fallstudienbauteil des Automobilzulieferers aus Systemmodul B. Dieser fertigt ein Bauteil (eine Fahrzeugkomponente) für Pkw, das sowohl in einer Stahl- als auch in einer Aluminiumversion erhältlich ist. Die Stahlversion basiert auf der Legierung DD13 und die Aluminiumversion auf der Legierung AlMg3 (vgl. Kapitel 6.4). Ziel der Fallstudie ist die Erläuterung und Demonstration des Systemmoduls D zur Identifizierung einer für das Unternehmen kosten- und klimaoptimalen Konfiguration der Wertschöpfungskette.

Die Entscheidungsalternativen des Fallstudienunternehmens ergeben sich aus 22 Primärstahl- (vgl. Kapitel 5.1.5), 15 Sekundärstahl- (vgl. Kapitel 5.1.6) und 4 Primäraluminiumlieferanten (vgl. Kapitel 5.1.7), welche die jeweils benötigte Legierung herstellen können. Als Fertigungsketten stehen dem Fallstudienunternehmen die Fertigungskette a (für die Stahlversion) und die Fertigungskette b (für die Aluminiumversion) zur Verfügung (vgl. Kapitel 6.4.2). Hinsichtlich der Nutzungsphase und EoL-Phase des Bauteils wird gemäß Kapitel 7 eine Nutzung in benzin- und dieselbetriebenen Fahrzeugen, in PHEVs und in BEVS untersucht. Bezüglich der PCF-Analyse des Bauteils bezieht sich die Bewertung zunächst ausschließlich auf die vom Fallstudienunternehmen derzeit nominierten Lieferanten. Entsprechend könnten sich die Ergebnisse zur Empfehlung des Materials (Kapitel 8.2.3.2) oder des Anteils der Materialherstellung am PCF (Kapitel 8.2.3.3) ändern, falls das Fallstudienunternehmen zukünftig andere Stahl- oder Aluminiumlieferanten nominieren würde. Um dies zu berücksichtigen, widmen sich die Kapitel 8.2.3.4 und 8.2.3.5 der Analyse des Einflusses der Lieferantenauswahl und der Kombination aus Lieferanten- und Materialauswahl auf den Carbon Footprint. Die THG-Emissionen des Transports vom Lieferanten zum Unternehmen werden im Rahmen der Modellberechnung den THG-Emissionen des Materialherstellers zugewiesen. Für die gesamte PCF-Analyse in diesem Kapitel werden als Fahrzeugsegment Mittelklassewagen zugrunde gelegt. Die verwendeten Mittelklassewagen entsprechen den Referenzfahrzeugen aus Kapitel 7.3.3.3, die segmentspezifisch für den deutschen Fahrzeugmarkt entwickelt wurden. In Kapitel 8.2.3.6 wird auf Basis der detaillierten Lebenszyklusanalysen in dieser Arbeit ein allgemeines und fallstudienunabhängiges Fazit bezüglich des Einsatzes von Stahl oder Aluminium in Pkw gezogen.

8.2.2 Szenarien

Die im Folgenden verwendeten Szenarien fußen auf den bereits in Kapitel 7.5.2 definierten vier Szenarien: 1) Basis-Szenario (150.000 km, Strommix_2020), 2) km_max-Szenario (300.000 km, Strommix_2020); 3) Strommix_2030-Szenario (150.000 km, Strommix_2030) und 4) Strommix_2030;km_max-Szenario (300.000 km, Strommix_2030).

Um den Einfluss der Lieferantenwahl auch langfristig bewerten zu können, werden noch zwei zusätzliche Zukunftsszenarien eingeführt: 5) "100 %EE_150.000 km", in dem für Deutschland eine Stromerzeugung in Deutschland aus 100 % erneuerbaren Energien (EE) angenommen wird sowie 6) ein "100 %EE_300.000 km" Szenario, in dem c.p. die Laufleistung des

Fahrzeugs von 150.000 auf 300.000 km verlängert wird. Die zwei zusätzlichen Szenarien bieten außerdem die Möglichkeit, den Einfluss auf die THG-Emissionen der Wertschöpfungskette eines Produktes abzuschätzen, wenn das Material aus Ländern mit einer deutlich geringeren CO₂-Intensität von Strom als in Deutschland importiert werden, zum Beispiel beim Import von Aluminium aus Norwegen, einem Land, das schon heute Strom aus nahezu 100 % erneuerbaren Energien (EE) generiert.¹ Das Szenario wird in seiner Benennung daher bewusst nicht mit einer Jahreszahl in Verbindung gebracht – so kann es auch auf einen gegenwärtigen Fall bezogen werden (siehe dazu z.B. die Berechnung des globalen Einsparpotenzials bei der Pkw-Herstellung durch Lieferantenauswahl in Kapitel 8.2.3.1).

Zur Berechnung des Emissionsfaktors beziehungsweise der CO₂-Intensität des 100 %EE-Strommixes muss zunächst ein realistischer zukünftiger Strommix ermittelt werden. Die hier gewählte Zusammensetzung des zukünftigen Strommixes orientiert sich an einer aktuellen Studie der Lappeenranta University und der Energy Watch Group nach Ram et al. (2019). Darin wird für das Jahr 2050 global ein Photovoltaik-Anteil von 69 %, ein Windkraft-Anteil von 18 %, ein Biomasse-Anteil von 6 %, ein Wasserkraft-Anteil von 3 %, ein Geothermie-Anteil von 2 % sowie ein Anteil von 2 % anderer Energieträger vorausgesagt. Unter Berücksichtigung aktueller Emissionsfaktoren der jeweiligen Energieerzeugungsarten ergibt sich ein durchschnittlicher Emissionsfaktor von 0,0715 kgCO₂e/kWh, der im Folgenden für die 100 %EE-Szenarien verwendet wird (vgl. Tabelle 8.1).

¹ 93,4 % der Stromerzeugung ganz Norwegens basieren auf Wasserkraft (IEA 2020).

	Anteil am		CO2-Intensität (Emissionsfaktor)			
Erneuerbare Energien	Strommix 2050 ^a	кеа [тյ/тј] ^b	[kgCO₂e/TJ]	[kgCO2e/kWh]		
Solar PV	69 %	1,4066	25.885 ^c	0,0932		
Wind	18 %	1,0199	1.416 ^d	0,0051		
Biomasse	6 %	6,0667	11.066 ^e	0,0398		
Wasserkraft	3 %	1,0537	10.556 ^f	0,0380		
Geothermie	2 %	1,3547	18.540 ^g	0,0667		
Andere	2 % ^h					
Summe (gewichtet)	100 %	1,6090	19.864	0,0715		

Tabelle 8.1: Datenbasis zur durchgeführten Berechnung der CO2e-Intensität für 100 % erneuerbare Energien in Deutschland

^a Daten aus Ram et al. (2019).

^b Gleiche Quelle wie für die CO₂-Intensität.

^c Datensatz ProBas: Solar-PV-multi-Rahmen-mit-Rack-DE-2020 (UBA 2015).

^d Datensatz ProBas: Wind-KW-DE-2020_offshore (UBA 2015).

^e Datensatz ProBas: Biogas-Biomüll-BHKW-GM 500-2020/brutto (UBA 2015).

^f Datensatz ProBas:Wasser-KW-gross-DE-2020 (UBA 2015).

^g Datensatz ProBas:Geothermie-KW-ORC-DE-2020 (UBA 2015).

^h Annahme: 2 % Andere werden nicht berücksichtigt. Stattdessen werden die übrigen 98 % auf 100 % hochgerechnet, indem die Summe durch 0,98 dividiert wird.

8.2.3 Carbon Footprint (PCF)-Analyse (cradle-to-grave)

8.2.3.1 Globales THG-Einsparpotenzial (cradle-to-gate) durch Lieferantenwahl im Fahrzeugbau

Bevor in den folgenden Kapiteln auf die cradle-to-grave PCF-Analyse eines spezifischen Bauteils eingegangen wird (vgl. Kapitel 8.2.3), zielt dieses Kapitel zunächst einleitend auf den cradle-to-gate Carbon Footprint eines gesamten Pkws ab. Aufbauend auf Systemmodul A wird das nationale und globale THG-Einsparpotenzial beim Bau eines durchschnittlichen Neuwagens berechnet, welches heute allein durch Lieferantenwahl realisiert werden könnte.

Nach Ducker (2015) bestand ein durchschnittlicher Neuwagen im Jahr 2015 in Gewichtsprozent zu 64 % aus Stahl, zu 11 % aus Aluminium, zu 9 % aus Polymeren und zu 16 % aus anderen Materialien (vgl. Kapitel 2.3). Laut Expertengesprächen wird beim Stahl zu 80 % Primärstahl und zu 20 % Sekundärstahl verwendet. Der Primärstahlanteil an einem Pkw beträgt somit durchschnittlich 51,2 % und der Sekundärstahlanteil 12,8 %. Für Aluminium gilt ein marktüblicher Aluminiumproduktionsmix, der hier zu 2/3 auf Primäraluminium und zu 1/3 auf Sekundäraluminium (Remelting) basiert (vgl. Kapitel 6.4.1). Der Anteil von Sekundäraluminium aus dem Refiner liegt bei 0 %, da derzeit laut Expertengesprächen noch kein Aluminium aus dem Refiner in der Automobilindustrie eingesetzt wird. Somit beläuft sich der Primäraluminiumanteil im Pkw auf 7,3 % und der Anteil von Sekundäraluminium aus dem Remelter auf 3,7 %. Den größten Anteil an den Polymeren im Fahrzeugbau machen Polypropylen (PP) mit 32 % und Polyurethan mit 17 % aus (Patil et al. 2017). Gewichtet mit den 9 % ergibt sich ein gewichtsbezogener Anteil von 2,9 % PP und 1,5 % PUR an einem durchschnittlichen Pkw.

Durch die in Systemmodul A betrachteten Materialien und entwickelten Bilanzierungsmodelle können somit die THG-Emissionen der Herstellung von ca. 80 % (79,4 %) der Materialien aktueller Fahrzeugmodelle bewertet werden.

Um auch das THG-Minderungspotenzial beziffern zu können, wenn zukünftig mehr Sekundärmaterial eingesetzt würde, wird für die Gewichtsanteile von Materialien im Pkw ein Recycling-Szenario (RC-Szenario) eingeführt (vgl. Tabelle 8.2). Zur Bestimmung des Anteils von Recyclingmaterial wird der für das Jahr 2050 zu erwartende Anteil der Sekundärherstellung an der Gesamtherstellung eines Materials zugrunde gelegt. Nach einer Analyse von Material Economics (2018) könnten in der EU im Jahr 2050 75 % der Stahl- und 50 % der Aluminiumnachfrage durch die Sekundärmaterialherstellung abdeckt werden. Wohlfarth et al. (2016) schätzen den Anteil der Sekundärstahlherstellung in optimistischen Szenarien für 2050 auf 45 % und den Anteil der Sekundäraluminiumherstellung auf 73 % bis 77 %. Aufgrund der sich stark unterscheidenden Schätzungen in der Literatur wird in dieser Arbeit für beide Materialen ein Recyclinganteil von 50 % angenommen. Da für Polypropylen und Polyurethan in der Literatur keine entsprechenden Studien gefunden werden konnten, bleiben beide Werte im RC-Szenario unverändert. Der Anteil von Sekundärstahl steigt im RC-Szenario folglich von 20 % (Status quo) auf 50 %. Für Aluminium wird neben dem Aluminiumproduktionsmix (Mischung Primäraluminium mit Sekundäraluminium aus dem Remelter, s.o.) zukünftig auch zu 50 % Sekundäraluminium aus dem Refiner verwendet (vgl. Tabelle 8.2).

		St	atus quo	RC	RC-Szenario		
Materialanteil ei- nes durchschnitt- lichen Pkw (nach Ducker (2015))	Davon:	Anteil	Anteil am Pkw (gewichtet)	Anteil	Anteil am Pkw (gewichtet)		
	Primär	80 %	51,2 %	50 %	32 %		
Staffi (64 %)	Sekundär	20 %	12,8 %	50 %	32 %		
	Primär	67 %	7,3 %	33,5 %	3,7 %		
Aluminium (11 %)	Sekundär (Remelting)	33 %	3,7 %	16,5 %	1,8 %		
	Sekundär (Refining)	0 %	0 %	50 %	5,5 %		
Polymere (9 %)	Polypropylen	32 %	2,9 %	32 %	2,9 %		
	Polyurethan	17 %	1,5 %	17 %	1,5 %		
Gesamt			79,4 %		79,4 %		

 Tabelle 8.2:
 Gewichtsanteil der in Systemmodul A betrachteten Materialien an einem durchschnittlichen Pkw

Das durchschnittliche Gewicht eines Pkw wird anhand der in Kapitel 7.3.3.3 hergeleiteten Referenzfahrzeuge für Neuzulassungen je Antriebstechnik (Fahrzeug mit Benzin/Ottomotor: 1.335 kg, Dieselmotor: 1.446 kg, PHEV: 1.435 kg, BEV: 1.600 kg) und des Anteils dieser Referenzfahrzeuge an den jährlichen Neuzulassungen bestimmt. Als Indikator für die Häufigkeit eines Fahrzeugs dient die Zulassungsstatistik des Kraftfahrtbundesamtes für Deutschland. Nach dieser wurden im Jahr 2019 59,2 % Benziner, 32,0 % Dieselfahrzeuge, 1,3 % PHEVs und 1,8 % BEVs zugelassen (Kraftfahrtbundesamt 2019). Das gewichtete Durchschnittsgewicht eines Pkw ergibt sich für das Jahr 2019 zu 1.379 kg.

Zur Berechnung des Einsparpotenzials in der Pkw-Herstellung wurden die THG-Emissionen eines durchschnittlichen Materialherstellers mit dem jeweiligen Best-in-Class-Hersteller, dem klimafreundlichsten Lieferanten, verglichen. Das Einsparpotenzial beziffert die Einsparung, die durch einen Wechsel vom Durchschnittslieferanten zum BiC-Lieferanten erzielt werden kann (vgl. Abbildung 8.2). Die in dieser Analyse verwendeten Daten und Quellen der Durchschnitts- und BiC-Lieferanten sind in Tabelle 8.3 aufgelistet.

Materialbezug aus:	Deutschland bezug aus: [kgCO ₂ e/kg]			Global [kgCO2e/kg]				
Material	Ø (System- modul A)	BiC (System- modul A)	Ø	Quelle	BiC	Quelle		
Primärstahl	2,174	1,879	2,352	Teilmodul A1 ^a	1,879	Teilmodul A1 ^e		
Sekundärstahl	0,801	0,638	0,801	Teilmodul A2 ^a	0,367	Teilmodul A2 ^f		
Primäraluminium	14,110	13,689	18,999	Ecoinvent	5,730	Teilmodul A3 ^f		
Sek.alu (Remelter)	0,441	0,441	0,420	Ecoinvent ^b	0,379	Teilmodul A4 ^f		
Sek.alu (Refiner)	0,992	0,992	1,380	Ecoinvent ^b	0,900	Teilmodul A4 ^f		
Propylen	1,200	0,950	1,720	Berechnung ^c	0,950	Teilmodul A5		
TDI	3,410	3,170	2,710	PlasticsEurope ^d	2,710	PlasticsEurope ^g		

 Tabelle 8.3:
 Gegenüberstellung der THG-Emissionen durchschnittlicher und BiC

 Materialhersteller für die Materialherstellung in Deutschland und global

^a In Ecoinvent ist kein globaler und kein Wert für China verfügbar, daher wird der EU-Wert aus eigenen Modellen verwendet.

^b Nur Wert für Europa, da kein globaler und kein Wert für China verfügbar ist.

^c Eigene Berechnung, da in Ecoinvent kein globaler und kein Wert für China verfügbar ist. Der Wert für Europa wurde gemäß PlasticsEurope (2012a) (Gewichtung 50 %) und der Wert für China wurde nach Zhao et al. (2017) (50 %) verwendet. Zudem wurde PlasticsEurope statt Ecoinvent verwendet, da die Datenlage aktueller.

- ^d Wert gemäß PlasticsEurope (2012b) für Europa, da kein globaler und kein Wert für China verfügbar ist. Zudem wurde PlasticsEurope statt Ecoinvent verwendet, da die Datenlage aktueller ist.
- ^e Bester Wert für Europa aus Teilmodul A1. Für Länder außerhalb Europas wurden keine Berechnungen durchgeführt.
- ^f Annahme eines Strommixes aus 100 % erneuerbaren Energien, um THG-Emissionen anhand einer niedrigen CO₂-Intensität des Strommixes zu simulieren (beispielsweise Standort in Norwegen).

^g Keine Werke mit niedrigeren THG-Emissionen bekannt.

Im deutschen Fahrzeugbau könnten bereits heute mindestens 9,1 % der THG-Emissionen eingespart werden, wenn alle Materialhersteller so klimafreundlich wie der jeweilige BiC-Hersteller produzieren würden. Dabei bezieht sich dieses Einsparpotenzial nur auf die vier in dieser Arbeit betrachteten Materialien Stahl, Aluminium, PP und PUR. Bei einer Betrachtung aller

im Pkw verwendeten Materialien (weitere 20,6 Gew.-%) könnte das Einsparpotenzial noch weitaus größer sein. Allein die Herstellung dieser vier Materialien trägt durchschnittlich 3.244 kgCO₂e zum Product Carbon Fooprint (cradle-to-gate) eines durchschnittlichen Pkw bei. Würden die Materialien nur von den BiC-Lieferanten in Deutschland bezogen, würde der Beitrag zum Carbon Footprint 2.949 kgCO₂e betragen (vgl. Abbildung 8.2). Im Jahr 2019 wurden in Deutschland 4,66 Mio. Pkw gebaut (VDA 2020), sodass die möglichen Einsparungen in der Pkw-Herstellung auf insgesamt 1,38 Mio. Tonnen CO₂e beziffert werden können. Das sind 0,7 % der gesamten industriebedingten THG-Emissionen Deutschlands (196 Mio. Tonnen, Stand: 2018, siehe (BMU 2019a)). Würde anstelle von Primärmaterial zudem vermehrt Sekundärmaterial verwendet werden (siehe RC-Szenario²), könnten bei der Pkw-Herstellung in Deutschland 38,6 % der aktuellen THG-Emissionen pro Pkw eingespart werden. Das sind insgesamt pro Jahr 5,83 Mio. Tonnen CO₂e und entspricht 3 % der gesamten industriebedingten jährlichen THG-Emissionen Deutschlands.

² Bzw. in Abbildung 8.2 BiC-RC-Szenario genannt, da in den Berechnungen alle Hersteller so klimafreundlich wie der jeweilige BiC-Hersteller bewertet werden.



Abbildung 8.2: THG-Einsparpotenzial im Fahrzeugbau durch den Wechsel von durchschnittlichen auf klimafreundliche (BiC) Materialhersteller

Global könnten sogar 46,1 % der THG-Emissionen pro gebauten Pkw eingespart werden, wären alle Lieferanten so klimafreundlich wie der jeweilige BiC-Hersteller. Der Beitrag zum Carbon Footprint eines Pkw durch die vier betrachteten Materialien könnte von aktuell 3.869 kgCO₂e auf 2.084 kgCO₂e reduziert werden. Weltweit wurden 67,1 Mio. Pkw im Jahr 2019 produziert (OICA 2019). Daraus ergeben sich mögliche globale Einsparungen von 119,8 Mio. Tonnen CO₂e. Im RC-Szenario verringern sich die THG-Emissionen auf 1.462 kgCO₂e pro Pkw, wodurch weltweit sogar 161,5 Mio. Tonnen CO₂e jährlich eingespart werden könnten (das entspricht fast den gesamten jährlichen industriebedingten THG-Emissionen Deutschlands, s.o.).

Im Jahr 2018 wurden weltweit insgesamt 36.573 Mio. Tonnen CO_2e emittiert (Global Carbon Project 2019). Setzt man die möglichen Einsparungen dazu in Beziehung, kann aufgezeigt werden, dass die weltweiten jährlichen THG-Emissionen um mindestens 0,33 % (im RC-Szenario 0,44 %) verringert
werden könnten, würden alle Pkw-Hersteller nur von BiC-Lieferanten beliefert werden. Das RC-Szenario zeigt, dass die in den Lastenheften festgelegten Qualitätsanforderungen an die Materialien eines Bauteils, insbesondere für nicht-sicherheitsrelevante Produkte, wenn möglich reduziert werden sollten. Dies könnte eine mögliche Lösung sein, um vor allem den Anteil von Sekundärstahl und -aluminium in industriellen Produkten erheblich zu steigern.

Im Folgenden werden die Auswirkungen der Lieferanten- und auch Materialwahl auf den Carbon Footprint des gesamten Lebenszyklus eines Produktes (cradle-to-grave) bewertet.

8.2.3.2 Materialempfehlung hinsichtlich PCF für das Fallstudienbauteil

Die Ergebnisse dieses Kapitels sind insbesondere für Kraftfahrzeughersteller, also Nutzer des Fallstudienbauteils oder anderer Fahrzeugkomponenten auf Stahl- und Aluminiumbasis, interessant. Wegen der Berücksichtigung des gesamten Lebenszyklus' können gegenüber Pkw-Herstellern Empfehlungen ausgesprochen werden, ob sie im Sinne einer treibhausgasarmen Mobilität die Stahl- oder Aluminiumvariante des Bauteils beziehen sollten. Diesbezüglich werden mithilfe von Systemmodul C verschiedene Antriebstechniken der Fahrzeuge abgebildet und mit den THG-Emissionen der Materialherstellung und -verarbeitung der Systemmodule A und B kombiniert. Im Rahmen einer Szenarioanalyse werden Berechnungen für erwartete Laufleistungen von 150.000 km und von 300.000 km durchgeführt. Diese Berechnungen werden jeweils für den geschätzten deutschen Strommix des Jahres 2020, den des Jahres 2030 sowie den für 100 %EE durchgeführt. Die Empfehlungen beziehen sich also in erster Linie auf den deutschen Fahrzeugmarkt und den Fahrzeugeinsatz in Deutschland. Generelle Materialempfehlungen für Fahrzeuge auf Basis der Fallstudie erfolgen in Kapitel 8.2.3.6.



Abbildung 8.3: Cradle-to-grave THG-Emissionen des Fallstudienbauteils in der Stahl- (S) und Aluminiumvariante (A) je nach Antriebstechnik des Fahrzeugs im Strommix 2020 Szenario

Abbildung 8.3 zeigt die cradle-to-gate THG-Emissionen des Fallstudienbauteils in der Stahl- (S) und in der Aluminiumvariante (A) für Benziner, Diesel, PHEVs und BEVs bei Verwendung des geschätzten Strommixes für das Jahr 2020. Die Abbildung veranschaulicht, dass das Aluminiumbauteil in benzinbetriebenen Fahrzeugen ab ca. 72.500 km die bessere THG-Bilanz gegenüber der Stahlvariante aufweist. In Dieselfahrzeugen hat das Aluminiumbauteil ab ca. 80.000 km die bessere THG-Bilanz, in PHEVs ab ca. 115.000 km und in BEVs ab ca. 130.000 km.



Abbildung 8.4: Cradle-to-grave THG-Emissionen des Fallstudienbauteils in der Stahl- (S) und Aluminiumvariante (A) je nach Antriebstechnik des Fahrzeugs im Strommix 2030 Szenario

Wird der geschätzte Strommix des Jahres 2030 verwendet, verschiebt sich die Vorteilhaftigkeit von Aluminium gegenüber Stahl insbesondere für stromabhängige Fahrzeuge deutlich nach hinten: für PHEVs auf ca. 160.000 km und für BEVs sogar auf ca. 250.000 km (vgl. Abbildung 8.4).

Infolge kann Fahrzeugherstellern, also Kunden des Fallstudienunternehmens empfohlen werden, dass **Benziner und Diesel** in den kommenden Jahren aus Klima-Gesichtspunkten mit der **Aluminiumvariante** ausgestattet werden sollten. Für PHEVs und BEVs muss abgewogen werden, ob eine Laufleistung größer oder kleiner 160.000 km (PHEVs) beziehungsweise 250.000 km (BEVs) zu erwarten ist. Legt man die durchschnittliche Laufleistung von 230.000 km eines Mittelklassewagens nach Weymar und Finkbeiner (2016) zugrunde, sollte im **PHEV** die **Aluminiumvariante** (160.000<230.000 km), und im **BEV** die **Stahlvariante** gewählt werden (250.000>230.000 km).



Abbildung 8.5: Cradle-to-grave THG-Emissionen des Fallstudienbauteils in der Stahl- (S) und Aluminiumvariante (A) je nach Antriebstechnik des Fahrzeugs im 100 %EE Szenario

Für das langfristige Zukunftszenario-100 %EE ergibt sich nach derzeitiger Datenlage, dass in **BEVs** nur noch das **Stahlbauteil** eingesetzt werden sollte. Wird die Laufleistung auf 230.000 km gesetzt, sollten **PHEVs** mit der **Aluminiumvariante** ausgestattet werden. Reine Verbrennungsmotoren dürften im Zukunftsszenario endgültig vom Markt verdrängt bzw. verboten worden sein (vgl. dazu z.B. Deutscher Bundestag 2019). Sollte dies nicht der Fall sein, sollte sowohl in benzin- als auch in dieselbetriebenen Fahrzeugen die Aluminiumvariante verbaut werden. Die den Abbildungen zugrunde liegenden Modellergebnisse können Tabelle A.9 im Anhang entnommen werden.

8.2.3.3 Anteil der Materialherstellung am PCF

In Tabelle 8.4 wird der Anteil der THG-Emissionen der Materialherstellung an den gesamten cradle-to-grave THG-Emissionen (PCF) je Bauteilvariante und Antriebstechnik aufgezeigt. Je dunkler die Zelle eingefärbt ist, desto größer ist der Anteil der Materialherstellung im jeweiligen Szenario. Es kann szenarienübergreifend herausgestellt werden, dass die Aluminiumherstellung den PCF der Aluminiumversion des Bauteils deutlich stärker beeinflusst als die Stahlerzeugung den PCF der Stahlvariante.

Fallstudienbau- Stahlvariante teil: (Sekundärstahl)			Vergleich Primärstahl			Aluminiumvariante							
Szenario		Ben- ziner	Diesel	PHEV	BEV	Benzi- ner	Diesel	PHEV	BEV	Ben- ziner	Diesel	PHEV	BEV
km	Strom- mix_2020*	5 %	8 %	8 %	6%	8 %	11 %	11 %	10 %	54 %	74 %	68 %	54 %
0.000	Strom- mix_2030	4 %	6 %	8 %	9%	8 %	11 %	16 %	18 %	40 %	55 %	66 %	64 %
15	100 %EE	3 %	5 %	10 %	33 %	8 %	11 %	24 %	57 %	33 %	50 %	77 %	113 %
kn K	Strom- mix_2020	3 %	4 %	4 %	3 %	4 %	6 %	6 %	5 %	31 %	45 %	40 %	31 %
0.000	Strom- mix_2030	2 %	3 %	4 %	5 %	4 %	6 %	8 %	9 %	22 %	33 %	40 %	39 %
30	100 %EE	2 %	2 %	5 %	16 %	4 %	6 %	13 %	33 %	18 %	27 %	49 %	83 %

 Tabelle 8.4:
 Anteil der Materialherstellung am Carbon Footprint (cradle-to-grave) des Fallstudienbauteils

*: Basisszenario

Legende: Je dunkler eine Zelle eingefärbt ist, umso größer ist der Anteil der Materialherstellung am PCF.

Im Basis-Szenario (Strommix_2020; 150.000 km) macht die Stahlerzeugung durchschnittlich über alle Antriebstechniken hinweg ca. 7 % des Carbon Footprints aus, während die Aluminiumherstellung durchschnittlich ca. 62 % des Carbon Footprints des Aluminiumbauteils ausmacht. Bei 300.000 km Laufleistung verringern sich die Anteile durchschnittlich auf ca. 3,5 % (Stahlerzeugung) beziehungsweise 37 % (Aluminiumherstellung).

Die großen Unterschiede zwischen Stahl und Aluminium lassen sich durch die viel höheren THG-Emissionen bei der Aluminiumherstellung erklären, die gleichzeitig zur Konsequenz haben, dass eine höhere Recycling-Gut-schrift in der EoL-Phase erzielt wird (vgl. Kapitel 7.5.3). Durch die hohe RC-

Gutschrift werden die THG-Emissionen der Nutzungs- und EoL-Phase insgesamt reduziert, womit der Anteil der Herstellung relativ zunimmt. Außerdem führt Aluminium durch das geringere Gewicht zu Kraftstoff-/Stromeinsparungen, wodurch die THG-Emissionen der Nutzungs- und EoL-Phase zusätzlich reduziert werden. Ferner ist zu konstatieren, dass das Fallstudienunternehmen kein Primär- sondern zu 100 % Sekundärstahl verwendet (vgl. Kapitel 6.4), sodass sich Stahl und Aluminium hier nur eingeschränkt vergleichen lassen. Aus Vergleichszwecken wurden sämtliche Modellberechnungen ebenso für eine Bauteilvariante aus 100 % Primärstahl durchgeführt. Für die THG-Emissionen aus der Primärstahlherstellung wurde der Durchschnitt der deutschen Werke der in Teilmodul A1 modellierten Primärstahlhersteller zugrunde gelegt (2,174 kgCO₂e/t Rohstahl, vgl. Tabelle 5.14 in Kapitel 5.3.1). Der durchschnittliche Anteil der Primärstahlherstellung am Carbon Footprint des Stahlbauteils ergibt sich im Basis-Szenario zu 10 %.

In dieser Arbeit wurde einleitend geschildert, dass die Herstellungsphase in Zukunft zunehmend in den Fokus rücken wird, um den PCF von Fahrzeugen zu reduzieren. Dies liegt zum einen an der rasant zunehmenden Elektrifizierung der Antriebe und zum anderen an der sukzessiven Steigerung des Anteils von erneuerbaren Energien am Strommix (vgl. Kapitel 2.3). Im Rahmen der Szenarioanalyse kann die stetig zunehmende Bedeutung der Materialherstellung bestätigt werden. Anhand der Farbverläufe in Tabelle 8.4 ist zu erkennen, dass der Anteil der Materialherstellung am PCF signifikant mit dem Anteil an EE am Strommix und dem Grad der Elektrifizierung zunimmt. Im Maximum, also bei einem Strommix aus 100 % EE und einer Verwendung des Bauteils in BEVs, hat die Sekundärstahlherstellung einen Anteil von 33 %, die Primärstahlherstellung einen Anteil von 57 % und die Aluminiumherstellung sogar einen Anteil von 113 % am PCF. Natürlich ist es praktisch nicht möglich, einen Anteil größer 100 % zu haben; die Zahl ergibt sich aufgrund der Implementierung des Gutschriftverfahrens des Recyclings, dass im Falle eines Recyclings also ein Großteil der THG-Emissionen der Primärherstellung an den nächsten Lebenszyklus weitergegeben wird (vgl. Kapitel 7.4). Im betreffenden Szenario sind die THG-Emissionen der Nutzungsphase letztlich so gering, dass die RC-Gutschrift zu bilanziell negativen THG-Emissionen der Nutzungs- und EoL-Phase führt (vgl. Tabelle A.9 im Anhang). Dies hat zur Folge, dass der Anteil der THG-Emissionen der Materialherstellung somit über 100 % beträgt. Für eine Fahrzeuglaufleistung von 300.000 km sind die Anteile der Materialherstellung entsprechend geringer. Sie belaufen sich allerdings im langfristigen 100 %EE-Szenario trotzdem noch auf 16 % für Bauteile aus Sekundärstahl, 33 % für Bauteile aus Primärstahl und 83 % für Bauteile aus Aluminum.

Zusammenfassend stellt die Materialherstellung sowohl von Aluminium als auch von Stahl ein immenses PCF-Minderungspotenzial dar. Systemmodul A hat diesbezüglich offenbart, dass bereits durch die Wahl des Materialherstellers/Lieferanten signifikant Einfluss auf den PCF des Materials genommen werden kann. Kapitel 8.2.3.4 zeigt dazu eine eingehende Analyse.

8.2.3.4 Einfluss auf den PCF durch Lieferantenwahl

Im Folgenden soll der Einfluss der Lieferantenwahl auf den resultierenden PCF des Fallstudienbauteils analysiert werden. Dazu werden die PCFs auf Basis der BiC- und WiC-Lieferanten in Deutschland (vgl. Kapitel 5) berechnet und ins Verhältnis gesetzt.³ Es wird deutlich, dass der Carbon Footprint des Stahlbauteils allein durch die Wahl des Materiallieferanten je nach Antriebstechnik des Fahrzeugs derzeit zwischen 6,6 % und 9,4 % beeinflusst werden kann (Basisszenario: Strommix_2020; 150.000 km Laufleistung). Im gleichen Szenario macht die Wahl des Lieferanten für das Aluminiumbauteil zwischen 3,7 % und 5,1 % aus (vgl. Tabelle 8.5).

³ Die berechneten PCFs der BiC- und WiC-Lieferanten können Tabelle A.10 im Anhang entnommen werden.

Es kann auch herausgestellt werden, dass der Einfluss durch die Lieferantenwahl mit dem Anteil an EE am Strommix deutlich zunimmt. So steigt der Einfluss im Strommix_2030-Szenario bereits auf 7,9 % bis 16,5 % für das Stahlbauteil an (Stahlbauteil) und auf 3,9 % bis 6,3 % für das Aluminiumbauteil. Im 100 %EE-Szenario können sogar 8,5 % bis 50,3 % (Stahlbauteil) beziehungsweise 4,1 % bis 13,4 % (Aluminiumbauteil) des PCFs allein durch die Lieferantenauswahl beeinflusst werden.

Fallstudienbauteil:			Stahlva	ariante		Aluminiumvariante			
Szenario		Benzi- ner	Diesel	PHEV	BEV	Benzi- ner	Diesel	PHEV	BEV
km	Strommix_2020*	6,6 %	9,0 %	9,4 %	7,8 %	3,7 %	5,1 %	4,7 %	3,8 %
000.0	Strommix_2030	7,9 %	10,8 %	15,1 %	16,5 %	3,9 %	5,3 %	6,3 %	6,1 %
150	100 %EE	8,5 %	11,7 %	23,3 %	50,3 %	4,1 %	5,7 %	9,3 %	13,4 %
_				-		ſ	1		
km	Strommix_2020	3,5 %	4,8 %	5,0 %	4,1 %	2,1 %	3,1 %	2,8 %	2,2 %
000.	Strommix_2030	4,1 %	5,7 %	8,2 %	9,0 %	2,2 %	3,2 %	4,0 %	3,8 %
300	100 %EE	4,4 %	6,1 %	12,8 %	31,6 %	2,2 %	3,3 %	6,0 %	10,0 %
	Maximal mögliche Einsparung durch Lieferantenwahl in [kgCO ₂ e/Fallstudienbauteil					uteil]			
	Strommix_2020 0,55747				0,24723				
	Strommix_2030	0,65106			0,24704				
	100 %EE	0,69901				0,24703			

 Tabelle 8.5:
 Einfluss der Lieferantenwahl auf den PCF (cradle-to-grave) des Fallstudienbauteils (maximales Reduktionspotenzial)

*: Basisszenario

Legende: Je dunkler eine Zelle eingefärbt ist, umso größer ist der Einfluss der Lieferantenwahl auf den PCF.

Die Ergebnisse führen außerdem zu der Erkenntnis, dass der Auswahl des Stahllieferanten szenarienübergreifend eine größere Bedeutung zukommt als der des Aluminiumlieferanten, wenn Fahrzeugkomponenten mit niedrigen PCFs erzeugt werden sollen. Um dies zu verifizieren, sind auch die absoluten Einsparungen zwischen dem WiC- und BiC-Lieferanten eines Materials in Tabelle 8.5 aufgeführt. Im Basis-Szenario können durch die Wahl des BiC-Lieferanten für die Stahlversion des Fallstudienbauteils bis zu 0,55747 kgCO₂e eingespart werden, während es bei der Aluminiumversion maximal 0,24723 kgCO₂e sind. Dies kann damit begründet werden, dass die Unterschiede der werksspezifischen THG-Emissionen zwischen den Stahllieferanten (Primär- und Sekundärstahlhersteller) deutlich größer sind als die der Aluminiumlieferanten (Primäraluminiumhersteller) (vgl. Kapitel 5.3.1). Im 100 %EE-Szenario sind es beim Stahlbauteil sogar 0,69901 kgCO₂e. Unterdessen bleibt die Einsparung für das Aluminiumbauteil nahezu gleich.

Mit sinkendem Emissionsfaktor der Stromerzeugung gewinnt die Auswahl CO₂-effizienter Materialhersteller also nicht nur relativ, sondern auch absolut an Bedeutung. Dies macht sich vor allem beim Stahl bemerkbar, da die Primärstahlherstellung in viel geringerem Maß von der sinkenden CO₂-Intensität des Strommixes profitiert als die Sekundärstahl- oder Aluminiumherstellung. Die THG-Emissionen der Sekundärstahl- und Aluminiumherstellung haben größtenteils einen indirekten Ursprung, da sie vom Emissionsfaktor der Stromerzeugung abhängen. Der Hochofenprozess der Primärstahlherstellung verursacht jedoch überwiegend direkte THG-Emissionen und ist vergleichsweise unabhängig vom Strommix (vgl. Kapitel 5). Während die THG-Emissionen der Primärstahlhersteller in den Strommix-Szenarien also nahezu unverändert sind, können die THG-Emissionen der Sekundärstahl- und Aluminiumhersteller durch die zukünftigen Strommixe deutlich reduziert werden. Auf diese Weise ergibt sich insbesondere in den zukünftigen Strommix-Szenarien ein entsprechend großer Einfluss durch die Wahl des Stahllieferanten auf den gesamten PCF eines Stahlbauteils im Fahrzeug.

Insgesamt kann geschlussfolgert werden, dass die Lieferantenauswahl bereits gegenwärtig, aber insbesondere zukünftig, eine entscheidende Funktion einnimmt, um den Carbon Footprint von Produkten signifikant zu reduzieren. Dabei gilt: je höher der Grad der Elektrifizierung einer Fahrzeugflotte ist und je geringer die CO₂-Intensität der Stromerzeugung, desto größer ist das Potenzial, den PCF einer Fahrzeugkomponente durch Lieferantenauswahl weiter reduzieren zu können.

Im Folgenden wird die Lieferantenauswahl mit der Materialauswahl kombiniert, um das maximale PCF-Einsparpotenzial durch Material- und Lieferantenauswahl für Stahl- und Aluminiumbauteile eines Fahrzeugs zu berechnen.

8.2.3.5 Kombinierter Einfluss durch Material- und Lieferantenwahl

Je nach Laufleistung und Antriebstechnik eines Fahrzeugs können durch Material- und Lieferantenwahl im Strommix_2020-Szenario zwischen 11,6 % (BEV, 150.000 km) und 33,8 % (Benziner, 300.000 km) an THG-Emissionen eingespart werden (vgl. Tabelle 8.6). Für das Strommix_2030-Szenario steigt das Potenzial auf 15,4 % (PHEV, 150.000 km) bis 34,9 % (Diesel, 300.000 km). Im 100 %EE-Szenario können sogar 23,3 % (PHEV, 150.000 km) bis 62,4 % (BEV, 150.000 km) eingespart werden. In Übereinstimmung mit Kapitel 8.2.3.3 zur Materialherstellung und Kapitel 8.2.3.4 zur Lieferantenauswahl ist das Einsparpotenzial umso größer, je höher der Anteil an EE im Strommix ist.

	Szenario	Benziner	Diesel	PHEV	BEV		
0	Strommix_2020*	24,1 %	25,9 %	16,1 %	11,6 %		
60.00 km	Strommix_2030	25,4 %	27,8 %	15,4 %	18,3 %		
11	100 %EE	28,6 %	32,1 %	23,3 %	62,4 %		
0	Strommix_2020*	29,7 %	33,8 %	23,7 %	17,6 %		
0.00 km	Strommix_2030	30,5 %	34,9 %	24,7 %	13,4 %		
30	100 %EE	32,1 %	37,2 %	29,2 %	38,5 %		
	Absolute Einsparung in kgCO ₂ e/Fallstudienbauteil						
0	Strommix_2020	2,02	1,60	0,96	0,83		
60.00 km	Strommix_2030	2,11	1,68	0,66	0,73		
15	100 %EE	2,34	1,92	0,70	1,15		
0	Strommix_2020	4,76	3,92	2,64	2,38		
0.00 km	Strommix_2030	4,85	4,00	1,97	0,97		
30	100 %EE	5,08	4,23	1,59	0,95		
			_				
	Legende: Empfohlenes Material	Stahl		Aluminium			

 Tabelle 8.6:
 Einfluss durch Material- und Lieferantenwahl (Stahl und Aluminium) auf den Carbon Footprint (cradle-to-grave) des Fallstudienbauteils

*: Basisszenario

Bei den absoluten Einsparungen des Fallstudienbauteils (vgl. Tabelle 8.6) kann für Verbrenner (Benziner und Diesel) festgestellt werden, dass auch die absoluten Einsparungen mit dem Anteil an EE im Strommix zunehmen. So steigt die absolute Einsparung für Benziner in Abhängigkeit vom Strommix von 2,02 auf 2,34 kgCO₂e/Fallstudienbauteil (150.000 km) beziehungsweise von 4,76 auf 5,08 kgCO₂e/Fallstudienbauteil (300.000 km). Für PHEVs und BEVs unterscheiden sich die Aussagen je nach Fahrzeuglaufleistung. Bei einer Laufleistung von 300.000 km nimmt die absolute Einsparung mit steigendem Anteil an EE im Strommix ab: von 2,64 auf 1,59 kgCO₂e/Fallstudienbauteil für PHEVs bzw. 2,38 auf 0,95 kgCO₂e/Fallstudienbauteil für BEVs. Bei einer Laufleistung von 150.000 km führt das Strommix_2030-Szenario bei PHEVs und BEVs zunächst ebenfalls zu einer geringer werdenden Einsparung: 0,96 auf 0,66 kgCO₂e/Fallstudienbauteil für PHEVs und 0,83 auf 0,73 kgCO₂e/Fallstudienbauteil für BEVs. Im 100 %EE-Szenario steigt die Einsparung jedoch wieder auf 0,70 kgCO₂e/Fallstudienbauteil für PHEVs und auf 1,15 kgCO₂e/Fallstudienbauteil für BEVs an. Dieser Effekt ist damit zu begründen, dass die Materialherstellung nicht so stark vom 100 %EE-Strommix profitiert wie die Nutzungs- und EoL-Phase (vgl. Kapitel 8.2.2.3) und daher einen größeren Anteil am Carbon Footprint der Bauteile ausmacht.

8.2.3.6 Fazit zu Stahl- oder Aluminium im Pkw

Dieses Unterkapitel zielt darauf ab, Empfehlungen an Fahrzeugbauer und Zulieferer zur Wahl des klimafreundlicheren Materials zu geben. Diese Empfehlungen können durch die Verwendung von Systemmodul A (werksspezifischer Ansatz) sogar erstmals auf Werksebene erfolgen (vgl. Literaturanalyse in Kapitel 3.5). Kapitel 8.2.3.4 hat diesbezüglich gezeigt, dass der Einfluss durch die Wahl des Materialherstellers/Lieferanten auf den Carbon Footprint eines Pkw je nach Szenario zwischen 2,1 % und 50,3 % beträgt.

Für das Jahr 2020 legen die Berechnungen für Deutschland offen, dass Kraftfahrzeugkomponenten, die üblicherweise aus Stahl oder Aluminium bestehen, aus PCF-Sicht aus Aluminium bestehen sollten (vgl. Tabelle 8.6). Durch den in den kommenden Jahren und Jahrzehnten sukzessive steigenden Anteil an EE im Strommix ist Stahl dem Aluminium in einigen Szenarien zukünftig jedoch wieder vorzuziehen. Dies betrifft insbesondere BEVs und je nach Strommix auch PHEVs (vgl. Tabelle 8.6). Es kann also auch unter Berücksichtigung der werksspezifischen THG-Emissionen von Materialherstellern keine generelle Aussage dazu getroffen werden, ob Stahl oder Aluminium zu einem niedrigen PCF einer Fahrzeugkomponente führt. Vielmehr bedarf es für die verschiedenen Absatzregionen der Fahrzeughersteller individueller Lösungen, die sich insbesondere nach der CO₂-Intensität des Strommixes der Regionen/Länder richten. Dazu wird im Folgenden eine Regressionsanalyse durchgeführt, um in Abhängigkeit vom Strommix Materialempfehlungen für Zielmärkte ableiten zu können. Abbildung 8.6 zeigt die resultierenden Regressionsgeraden einer linearen Regression zwischen dem Emissionsfaktor (CO₂-Intensität) der Stromerzeugung und dem PCF des Fallstudienbauteils je nach Material (Stahl (S) vs. Aluminium (A)) und Antriebstechnik für eine Fahrzeuglaufleistung von 150.000 km.



Abbildung 8.6: Regressionsanalyse zum PCF (cradle-to-grave) des Fallstudienbauteils in Abhängigkeit von der CO₂-Intensität des Strommixes für eine Fahrzeuglaufleistung von 150.000 km



Abbildung 8.7: Regressionsanalyse zum PCF (cradle-to-grave) des Fallstudienbauteils in Abhängigkeit von der CO₂-Intensität des Strommixes für eine Fahrzeuglaufleistung von 300.000 km

Abbildung 8.7 veranschaulicht die resultierenden Regressionsgeraden, wenn eine Fahrzeuglaufleistung von 300.000 km angenommen wird. Als Datengrundlage dienen die PCFs des Fallstudienbauteils bei Verwendung der BiC-Lieferanten (vgl. Tabelle A.10 im Anhang).⁴ Die Bestimmtheitsmaße der ermittelten Regressionsgeraden liegen zwischen 95,8 und 99,7 %. Somit kann eine hohe Anpassungsgüte der Regression konstatiert werden. Die Geradengleichungen der Regressionsgeraden und Bestimmtheitsmaße sind in Tabelle A.11 im Anhang zu finden. Anhand der Geradengleichungen der Regressionsgeraden berechnet und die Emissionsfaktoren der Stromerzeugung identifiziert werden, welche zu einer Änderung der Materialempfehlung führen (vgl. Tabelle 8.7). Für Benziner und Diesel ist eine derartige Berechnung eigentlich nicht notwendig, da

⁴ BiC-Lieferanten für diese Untersuchung ausgewählt, da der PCF durch die Materialentscheidung minimiert werden soll.

sich die Geraden sowohl im 150.000 km-Szenario als auch im 300.000 km-Szenario nicht schneiden (vgl. Abbildung 8.6 und Abbildung 8.7). Der Vollständigkeit halber wurde die Berechnung dennoch ausgeführt um darzustellen, ab welcher CO2-Intensität eines Strommixes die THG-Emissionen der Aluminiumherstellung derart hoch sind, dass diese durch das leichtere Gewicht in der Nutzungsphase nicht mehr amortisiert werden können. Für Benziner ergibt sich dabei eine CO₂-Intensität des Strommixes zu 2,734 kgCO₂e/kWh im 150.000 km-Szenario und zu 7,256 kgCO₂e/kWh im 300.000 km-Szenario. Für Diesel liegen die Werte bei 2,036 kgCO₂e/kWh (150.000 km) und 5,526 kgCO₂e/kWh (300.000 km). Diese CO₂-Intensitäten liegen alle weit über den aktuellen landesspezifischen Werten; ein länderspezifischer Vergleich in EEA (2018) für das Jahr 2016 zeigt, dass Estland mit 0,819 kgCO₂e/kWh den höchsten Wert in Europa hatte. Der europäische Durchschnitt lag bei 0,296 kgCO₂e/kWh. Sogar China, mit einem bekanntermaßen sehr CO₂-intensiven Strommix, lag nach neuesten Informationen im Jahr 2015 mit 1,01 kgCO₂e/kWh weiter darunter (Ecoinvent V3 2017). In Fahrzeugen mit Verbrennungsmotor ist Aluminium, im Vergleich zu Stahl, daher unabhängig vom Strommix und damit auch unabhängig vom angestrebten Absatzmarkt stets die klimafreundlichere Wahl.

Für PHEVs liegt der Schnittpunkt im 150.000 km-Szenario bei 0,166 kgCO₂e/kWh. Eine lineare Interpolation zwischen der geschätzten CO₂-Intensität des deutschen Strommixes von 2030⁵ und der geschätzten CO₂-Intensität für 100 %EE in 2050⁶ ergibt, dass eine solche CO₂-Intensität des Strommixes in Deutschland etwa im Jahr 2039 erreicht wird. Also führt das die Verwendung von Stahl in Bauteilen erst ab 2039 in Deutschland zu einem niedrigeren PCF als Aluminium. In Europa träfe dies gegebenenfalls ein paar Jahre eher ein, da die durchschnittliche CO₂-Intensität des Strommixes niedriger als in Deutschland ist. Allerdings demonstriert das

⁵ 0,242 kgCO₂e/kWh (UBA 2015).

⁶ 0,0715 kgCO₂e/kWh (vgl. Kapitel 8.2.2).

300.000 km-Szenario, dass lange Fahrzeuglaufleistungen generell für Aluminium in PHEVs sprechen. Für den europäischen Absatzmarkt wird daher bis ca. 2030 eine Empfehlung für Aluminium in PHEVs ausgesprochen. Unter der Berücksichtigung, dass die Planungsphase von Fahrzeugen bis zur Serienproduktion ca. fünf Jahre dauert (Weidemann 2017), sollten im Jahr 2030 auf Basis aktueller CO₂-Intenstitäten neue Berechnungen durchgeführt werden, um Aussagen für klimafreundlichere Baumaterialien in PHEVs ab 2035 treffen zu können. Auf Absatzmärkten mit einer deutlich höheren CO₂-Intensität des Strommixes als in Europa, wie zum Beispiel in China, sollte vorerst möglichst wenig Stahl in PHEVs verwendet werden, bis sich abzeichnet, wie sich der Strommix in diesen Ländern in den nächsten Jahrzehnten entwickelt.

	Benziner	Diesel	PHEV	BEV
150.000km	Aluminium	Aluminium	EF* > 0,166 kgCO ₂ e/kWh →Aluminium EF* \leq 0,166 kgCO ₂ e/kWh → Stahl	EF* > 0,328 kgCO ₂ e/kWh →Aluminium EF* \leq 0,328 kgCO ₂ e/kWh → Stahl
300.000km	Aluminium	Aluminium	Aluminium	EF* > 0,177 kgCO ₂ e/kWh →Aluminium EF* \leq 0,177 kgCO ₂ e/kWh → Stahl

Tabelle 8.7: Materialempfehlungen auf Basis der Szenarioberechnungen und der Regressionsanalyse

*CO2-Intensität des Strommixes eines Landes / Emissionsfaktor = EF

Für BEVs liegt der Schnittpunkt im 150.000 km-Szenario bei einem Emissionsfaktor von 0,328 kgCO₂e/kWh. Über diesem Wert sollte Aluminium in BEVs verwendet werden und unter diesem Wert Stahl. Die EU liegt durchschnittlich bereits heute schon unter diesem Wert (EEA 2018). Nach linearer Interpolation zwischen den Schätzwerten der CO₂-Intensitäten des deutschen Strommixes von 2020 und 2030 wird dieser Emissionsfaktor in

Deutschland etwa im Jahr 2023 erreicht. Bei einer Laufleistung von 300.000 km ist Aluminium bis 711 einem Emissionsfaktor von 0,177 kgCO₂e/kWh klimafreundlicher. Dieser Wert wird in Deutschland gemäß linearer Interpolation voraussichtlich im Jahr 2037 erreicht. Am Beispiel des europäischen Fahrzeugmarktes sollten BEVs bei niedrigen zu erwartenden Laufleistungen schon heute Stahl anstelle von Aluminium bevorzugen. Bei hohen zu erwartenden Laufleistungen von BEVs sollten Fahrzeughersteller bis 2035 auf Aluminium zurückgreifen und Stahl ab 2030 bei der Planung neuer BEV-Modelle bevorzugen, damit die neuen Modelle ab 2035 vermehrt auf Stahl basieren. Für Absatzmärkte, die durch Länder mit hohen Emissionsfaktoren charakterisiert sind (z.B. China), ist den Fahrzeugbauern zu empfehlen, die Entwicklung des Strommix zu beobachten und zunächst möglichst Aluminium zu verwenden. Im Jahr 2030 sollte dann eine erneute Berechnung durchgeführt, und die Situation neu beurteilt werden.

Insgesamt kann in diesem Unterkapitel die Aussage abgeleitet werden, dass Aluminium als Material gegenwärtig⁷ für Pkw, mit Ausnahme von BEVs, in der Systemgrenze cradle-to-grave klimafreundlicher (niedrigeres Treibhauspotenzial) als Stahl ist. Im Kontext des signifikanten Einflusses der CO₂-Effizienz eines Materialherstellers (vgl. Kapitel 8.2.3.4) auf den PCF spielt es dabei eine Rolle, ob das zu bevorzugende Material tatsächlich vom BiC-Lieferanten bezogen werden kann. Sollten dessen Kapazitäten ausgeschöpft sein, wäre ein Materialwechsel möglicherweise klimafreundlicher, als das ursprüngliche Material von einem CO₂-ineffizienten Lieferanten zu beziehen. Sind die Kapazitäten eines Lieferanten also überschritten, wird unabhängig vom Material die Wertschöpfungskette mit den zweitgeringsten THG-Emissionen relevant. Da Material- und Lieferantenentscheidungen ins-

⁷ Die Berechnungen beziehen sich auf die aktuellen Produktionstechniken der Materialhersteller/Werke und die Ergebnisse könnten sich durch neue Produktionstechniken (z.B. Stahlherstellung mit Wasserstoff als Energieträger) entscheidend verändern (vgl. Kapitel 5.3.3).

besondere auch von Herstellkosten abhängen, wird auf das folgende Kapitel 8.2.4 verwiesen, in dem je nach Szenario die pareto-optimalen Wertschöpfungsketten (minimale Herstellkosten und THG-Emissionen) vorgestellt werden.

8.2.4 Pareto-optimale Konfigurationen der Wertschöpfungskette

Für die Fallstudie ergeben sich durch die Berücksichtigung aller modellierten Stahl- und Aluminiumlieferanten (vgl. Systemmodul A), Fertigungsketten (vgl. Systemmodul B) und Pkw-Antriebstechniken (vgl. Systemmodul C) insgesamt 164 mögliche Konfigurationen der Wertschöpfungskette (cradle-tograve) für das Kraftfahrzeugbauteil. Alle 164 Wertschöpfungskettenkonfigurationen sind in Abbildung 8.8 szenarienabhängig dargestellt. Darin werden die pareto-optimalen Wertschöpfungskettenkonfigurationen zur Visualisierung der Pareto-Front von den dominierten weiteren Ketten farblich unterschieden. Die dominierten Wertschöpfungskettenkonfigurationen sind überdies je nach Ausgangsmaterial des Bauteils nach Primär-, Sekundärstahl und Primäraluminium geclustert.



Abbildung 8.8: Pareto-optimale und sonstige Wertschöpfungskettenkonfigurationen des Fallstudienbauteils (cradle-to-grave) in Abhängigkeit der Szenarien

Für das Basis-Szenario (150.000 km, Strommix_2020) ergibt sich die Pareto-Front aus den Ketten 3, 91 und 150. Alle anderen Ketten werden somit von diesen drei Ketten dominiert. Die nähere Beschreibung der Charakterisierung der drei pareto-optimalen Ketten ist in Tabelle 8.8 aufgeführt. Im km_max-Szenario (300.000 km, Strommix_2020) sind die Ketten 3, 91 und 150 weiterhin pareto-optimal. Erst durch eine Änderung des Strommix im Strommix_2030-Szenario (150.000 km, Strommix_2030) verändert sich das Ergebnis. Dann sind die Ketten 4 und 92 pareto-optimal; die Ketten mit Primäraluminium sind nicht pareto-optimal. Wird die Laufleistung auf 300.000 km erweitert, ist zusätzlich auch die Kette 151 pareto-optimal (300.000 km, Strommix_2030). Im 100 %EE-Szenario sind sowohl bei einer Laufleistung von 150.000 km als auch bei 300.000 km die Ketten 4 und 92 pareto-optimal. Eine Kette mit Primäraluminium ist nicht dabei.

Tabelle 8.8:	Pareto-optimale Wertschöpfungskettenkonfigurationen zur Minimierung der
	THG-Emissionen (cradle-to-grave) und Herstellkosten des Fallstudienbauteils

Szenario		Pareto- Ketten	Material	Lieferant ^a	Fertigungs- kette ^b	Empfohlener Antrieb
	Strommix	3	Primärstahl	Werk 7	а	PHEV
Ę	2020	91	Sekundärstahl	Werk 15	а	PHEV
) kr		150	Primäraluminium	Werk 4	а	Diesel
00	Strommix	4	Primärstahl	Werk 7	а	BEV
50.	2030	92	Sekundärstahl	Werk 15	а	BEV
-	Strommix	4	Primärstahl	Werk 7	а	BEV
	100 %EE	92	Sekundärstahl	Werk 15	а	BEV
	Strommix	3	Primärstahl	Werk 7	а	PHEV
	2020	91	Sekundärstahl	Werk 15	а	PHEV
Ê		150	Primäraluminium	Werk 4	b	Diesel
lo	Strommix	4	Primärstahl	Werk 7	а	BEV
0.0	2030	92	Sekundärstahl	Werk 15	а	BEV
30(151	Primäraluminium	Werk 4	b	PHEV
	Strommix	4	Primärstahl	Werk 7	а	BEV
	100 %EE	92	Sekundärstahl	Werk 15	а	BEV

^a Siehe bzgl. der Werke die Fallstudien in Systemmodul A1 (Primärstahl, siehe Kapitel 5.1.5.4),
 A2 (Sekundärstahl, siehe Kapitel 0) und A3 (Primäraluminium, siehe Kapitel 5.1.7.4).

^b Siehe bzgl. der Fertigungsketten a und b die Fallstudie in Systemmodul B (vgl. Kapitel 6.4).

Der Hauptunterschied der Wertschöpfungskettenkonfigurationen, welche die Pareto-Front bilden, ist die Antriebsart des Pkw-Typs, in den das Bauteil

verbaut wird. Bei Verwendung des Strommix_2020 führen PHEVs und Dieselmotoren zu den pareto-optimalen Ketten. Wird jedoch der Strommix_2030 oder der Strommix mit 100 %EE zugrunde gelegt, beinhalten die pareto-optimalen Ketten, bis auf Kette 151, nur BEVs (vgl. Tabelle 8.8). Dass sich die pareto-optimalen Ketten je untersuchtem Szenario auf nur zwei oder drei Ketten beschränken, liegt der Annahme identischer Einkaufspreise je Material zugrunde. Diese Annahme musste getroffen werden, da die herstellerspezifischen Verkaufspreise der in Systemmodul A modellierten Materialhersteller nicht ermittelt werden konnten (vgl. Kapitel 6.4). Wären herstellerspezifische Materialverkaufspreise verfügbar, gäbe es deutlich mehr pareto-optimale Ketten, und die sich herausbildende Pareto-Front würde eher Abbildung 3.9 in Kapitel 3.3.4 gleichen. Doch trotz der eingeschränkten Datenlage im Bereich der Kosten eignet sich diese Fallstudie zur Demonstration der Auswertungs- und Entscheidungsunterstützungshilfen des Systemmodul D in den folgenden Kapiteln.

8.2.5 THG-Vermeidungskosten

8.2.5.1 Berechnungsansatz

Als erstes Werkzeug zur Entscheidungshilfe dienen die THG-Vermeidungskosten nach Kapitel 3.4. Systemmodul D weist die Vermeidungskosten zur nächstgelegenen treibhausgasärmeren (klimafreundlicheren), pareto-optimalen Kette in €/tCO₂e aus (vgl. Tabelle 8.9 und Tabelle 8.10). Das ermöglicht dem Modellanwender/Entscheider zu beurteilen, ob sich ein Unternehmen erstens den Wechsel zu einer klimafreundlicheren Wertschöpfungskette leisten kann, und zweitens, ob solch ein Wechsel sogar kostensenkend wäre (vgl. Kapitel 3.4). Das wäre zum Beispiel der Fall, wenn sich ein Unternehmen verpflichtet hätte, für verursachte THG-Emissionen Kompensationszahlungen⁸ zu leisten, und wenn der den Kompensationszahlungen zugrunde liegende CO₂-Kostensatz über den kalkulierten Vermeidungskosten läge. Als Richtwert des CO₂-Kostensatzes für Kompensationszahlungen wird hier angenommen, dass sich dieser an den durch das Umweltbundesamt geschätzten Schadenskosten orientiert (vgl. Kapitel 3.4).

Zur Berechnung der THG-Vermeidungskosten ($K^{\text{THG}_{vermeidung}}$) sei x_i (i = 1, ..., n) eine mögliche Wertschöpfungskettenkonfiguration der Menge pareto-optimaler Wertschöpfungsketten X ($x \in X$) und x_{i+1} eine weitere Wertschöpfungskettenkonfiguration der Menge X. Die Wertschöpfungsketten X werden im Modell nach Höhe der Herstellkosten [\pounds /Bauteil] sortiert, sodass aufgrund der Pareto-Optimalität gilt, dass die Herstellkosten (HK) einer Kette x_i geringer sind als die Kosten der Kette x_{i+1} ($HK_{x_i} < HK_{x_{i+1}}$). Gleichzeitig sind die THG-Emissionen der Kette x_i [kgCO₂e/Bauteil] aber höher als die der Kette x_{i+1} ($THG_{x_i} > THG_{x_{i+1}}$). Die THG-Vermeidungskosten in [\pounds /tCO₂e] für die Auswahl der Alternative x_{i+1} , anstelle von x_i ($K_{x_{i+1},x_i}^{\text{THG}_{vermeidung}}$) berechnen sich demnach gemäß Formel (8.1):

$$K_{x_{i+1},x_{i}}^{\text{THG}_{vermeidung}} = \frac{HK_{x_{i}} - HK_{x_{i+1}}}{THG_{x_{i+1}} - THG_{x_{i}}} \cdot 1000$$
(8.1)

Außerdem werden auch die Vermeidungskosten berechnet, die getragen werden müssten, wenn statt der Wertschöpfungskette mit den geringsten Herstellkosten (x_{HK_min}), die Kette mit den geringsten THG-Emissionen (x_{THG_min}) verwendet würde ($K_{x_{THG_min},x_{HK_min}}^{\text{THG_Vermeidung}}$) (vgl. Formel (8.2)). Für die

⁸ Exemplarisch sei die Firma Volkswagen aufgeführt, die sämtliche THG-Emissionen, die in Verbindung mit der Produktion des Fahrzeugmodells ID.3 stehen, durch Finanzierung von Klimaschutzprojekten kompensiert (Volkswagen 2019).

Kette mit den geringsten Herstellkosten gilt $HK_{x_{HK_min}} = min\{HK_{x_i}, ..., HK_{x_n}\}$ und für die Kette mit den geringsten THG-Emissionen gilt entsprechend $THG_{x_{THG}\ min} = min\{THG_{x_i}, ..., THG_{x_n}\}.$

$$K_{x_{THG_min},x_{HK_min}}^{THG_Vermeidung} = \frac{HK_{x_{HK_min}} - HK_{x_{THG_min}}}{THG_{x_{THG_min}} - THG_{x_{HK_min}}} \cdot 1000$$
(8.2)

Der Anwender kann für jedes zu bewertende Bauteil wählen, ob die Vermeidungskosten nur für die Phase der Produktherstellung (cradle-to-gate) oder den gesamten Lebenszyklus, also inklusive der Nutzung- und EoL-Phase (cradle-to-grave), berechnet werden sollen. Die Wahl richtet sich in der Regel danach, wie ausgeprägt das klimaorientierte Verantwortungsbewusstsein des Produktherstellers ist. Die Berechnung der cradle-to-grave Vermeidungskosten ist an Unternehmen gerichtet, die auch die THG-Emissionen der Nutzung ihrer Produkte, welche sie auf den Markt bringen, in ihren Kompensationszahlungen berücksichtigen oder zukünftig berücksichtigen möchten.

8.2.5.2 THG-Vermeidungskosten bei der Herstellung des Fallstudienbauteils

Für die Fallstudie liegen die cradle-to-gate Vermeidungskosten im Maximum, je nach Strommix-Szenario, zwischen 21,84 €/tCO₂e (Strommix_2020) und 16,71 €/tCO₂e (100 %EE). Diese maximalen Vermeidungskosten entsprechen einem Wechsel von der pareto-optimalen Kette mit den geringsten Herstellkosten (Ketten 1, 2, 3 und 4)⁹ zu den pareto-optimalen Ketten mit den niedrigsten THG-Emissionen (Ketten 89, 90, 91 und 92) (vgl. Tabelle 8.9 "Max zu Min"). Das Unternehmen weiß folglich, dass es für die Realisie-

⁹ Die Wertschöpfungsketten 1, 2, 3 und 4 sind identisch, da die Nutzungsphase nicht berücksichtigt wird (vgl. Tabelle A.12 im Anhang). Selbiges gilt für die Ketten 89, 90, 91 und 92.

rung der klimafreundlichsten Herstellung ihres Produkts zusätzliche Herstellkosten von maximal 21,84 € pro emittierte Tonne CO₂e in Kauf nehmen müsste. Dadurch würden sich die Herstellkosten in diesem Fall um 2,13 % von ca. 0,92 €/Bauteil auf ca. 0,94 €/Bauteil erhöhen.

Sollte sich das Fallstudienunternehmen zum Ziel gesetzt haben, die cradleto-gate THG-Emissionen des Bauteils zu kompensieren, wird dem Unternehmen empfohlen, die klimafreundlichste Wertschöpfungskette dann zu wählen, wenn ein zugrunde gelegter CO₂-Kompensationskostensatz den Betrag von 21,84€ übersteigt. Die zusätzlich zu zahlenden Herstellkosten wären dann geringer als die Kosten der Kompensationszahlungen.

Entspricht der CO₂-Kompensationskostensatz also beispielsweise den Schadenskosten des Umweltbundesamtes (vgl. Kapitel 3.4), so sollte das Fallstudienunternehmen immer die klimafreundlichste Wertschöpfungskette verwenden, da die Schadenskosten die Vermeidungskosten bei Weitem übersteigen (vgl. Tabelle 8.9).

	Darata	Pro	Bauteil	THG-Verme	idungskosten	Schadonskoston	
Szenario	optimale Ketten	kgCO2e	Herstell- kosten [€]	Kette zu Kette [€/tCO₂e]	Max zu Min [€/tCO₂e]	(UBA 2019b) [€/tCO₂e]	
Strom-	1-4	1,39	0,92			Lab. 2020 4073	
mix_2020	89-92	0,74	0,94	21,84	21,84	Jahr 2020: 187ª	
Strom-	1-4	1,32	0,92			John 2020, 205	
mix_2030	89-92	0,54	0,94	18,15	18,15	Jani 2030: 205	
Strommix	1-4	1,32	0,92			Jahr 2050, 240	
100 %EE	89-92	0,54	0,94	16,71	16,71	Jani 2050: 240	

 Tabelle 8.9:
 THG-Vermeidungskosten zwischen pareto-optimalen Wertschöpfungsketten der Herstellung des Fallstudienbauteils (cradle-to-gate)

^a Wert ist linear interpoliert zwischen den Schadenskosten der Jahre 2016 (180 €/tCO₂e) und 2030.

Bei der Betrachtung des gesamten Produktlebenszyklus erhöhen sich die Vermeidungskosten deutlich. Im Basis-Szenario (150.000 km, Strommix 2020) liegen diese im Maximum bei 165,10 €/tCO₂e. Dies entspricht einem Wechsel von der pareto-optimalen Kette mit den geringsten Herstellkosten (Kette Nr. 3) zu der pareto-optimalen Ketten mit den niedrigsten THG-Emissionen (Nr. 150) (vgl. Tabelle 8.10 "Max zu Min"). Da im Basis-Szenario drei verschiedene Konfigurationen pareto-optimal sind, wäre alternativ auch ein Wechsel zur zweit-klimafreundlichsten Kette 91 möglich (vgl. Tabelle 8.10 "Kette zu Kette"). Interessant für den Modellanwender ist diesbezüglich, dass ein Wertschöpfungskettenwechsel von Kette 3 zu Kette 91 nur Vermeidungskosten von 21,84 €/tCO₂e aufweist. Auf diese Weise können schon große Mengen an THG-Emissionen zu niedrigen Kosten eingespart werden. Von einem anschließenden Wechsel von Kette 91 zu Kette 150 ist aus finanzieller Sicht abzuraten, da die Vermeidungskosten (275,27 €/tCO₂e) diesbezüglich deutlich über den geschätzten Schadenskosten (187 €/tCO₂e) liegen. Für das Unternehmen ist es in diesem Szenario also ökonomisch sinnvoller, nicht die klimafreundlichste Wertschöpfungskette (Nr. 150), sondern die zweitklimafreundlichste Wertschöpfungskette (Nr. 91) zu verwenden. Sollte die Fahrzeuglaufleistung bei 300.000 km liegen (weiterhin Strommix 2020), würde jedoch anders entschieden werden. Dann lägen die Vermeidungskosten bei einem Wechsel von Kette 91 auf Kette 150 nur noch bei 78,85 €/tCO₂e und fielen somit geringer als die Schadenskosten aus (vgl. Tabelle 8.10).

Tabelle 8.10:	THG-Vermeidungskosten zwischen pareto-optimalen Wertschöpfungsketten
	für den gesamten Produktlebenszyklus des Fallstudienbauteils (cradle-to-
	grave)

		Pareto-	Bau	ıteil	THG-Vermeidungskosten		
:	Szenario	optimale	kgCO₂e	Herstell-	Kette zu Kette	Max zu Min	
		Ketten	-	kosten [€]	[€/tCO2e]	[€/tCO2e]	
	Strom	3	6,10	0,92	-		
۶	mix 2020	91	5,45	0,94	21,84		
) kr	1111X_2020	150	4,61	1,17	275,27	165,10	
00	Strom-	4	4,07	0,92	-		
50.	mix_2030	92	3,29	0,94	18,15	18,15	
1	Strommix	4	1,47	0,92			
	100 %EE	92	0,62	0,94	16,71	16,71	
	Ctrom	3	11,29	0,92	-		
	Strom-	91	10,64	0,94	21,84		
Ê	mix_2020	150	7,70	1,17	78,85	68,56	
8	Strom	4	7,36	0,92	-		
0.0	Stron-	92	6,58	0,94	18,15		
30(mix_2030	151	6,01	1,17	408,05	182,51	
	Strommix	4	2,30	0,92			
	100 %EE	92	1,45	0,94	16,71	16,71	

In den Szenarien Strommix_2030_150.000 km und 100 %EE_150.000 km ist die pareto-optimale Kette mit den geringsten Herstellkosten nun Kette 4, und die mit den niedrigsten THG-Emissionen ist Kette 92. In beiden Szenarien sind also nur zwei Konfigurationen pareto-optimal und in beiden Szenarien liegen die Vermeidungskosten weit unter den Schadenskosten (Schadenskosten siehe Tabelle 8.9). Im Szenario Strommix_2030_300.000 km kommt mit Kette 151 eine dritte pareto-optimale Wertschöpfungskette dazu. Wie im Basis-Szenario (Strommix_2020; 150.000 km) ist auch in diesem Szenario die Verwendung der zweit-klimafreundlichsten Kette (Nr. 92) ökonomischer; die Vermeidungskosten liegen mit 408,05 € weit über den prognostizierten Schadenskosten für 2030 (205 €) (siehe Tabelle 8.9).

8.2.5.3 Einordnung der Ergebnisse in den klimapolitischen Kontext

Die im vorherigen Kapitel 8.2.5.2 berechneten THG-Vermeidungskosten gelten spezifisch für die Wertschöpfungsketten des Fallstudienunternehmens (vgl. Kapitel 8.2.1). Allerdings ermöglicht der generische Aufbau der Systemmodule, dass die Vermeidungskosten für Wertschöpfungsketten verschiedenster Produkte und Branchen berechnet werden können. Dies eröffnet nicht nur für Unternehmen, sondern auch für gesetzgebende und andere behördliche Institutionen vielversprechende Einsatzmöglichkeiten. Produktund branchenspezifische THG-Vermeidungskosten könnten als Richt- oder Kontrollgröße für Klimainstrumente (z.B.: CO₂-Steuer) verwendet werden, da diese präzise bewerten, ab welchem CO₂-Kostensatz (z.B. Schadenskosten) eine ökonomische Motivation existiert, Wertschöpfungsketten klimafreundlicher auszurichten. Für die Fallstudie hätte szenarienübergreifend schon ein CO₂-Kostensatz ab 21,84 €/tCO₂e zur Folge, dass das Fallstudienunternehmen immer eine klimafreundlichere Wertschöpfungskette wählen würde (vgl. Tabelle 8.9 und Tabelle 8.10). Die Vermeidungskosten von 21,84 €/tCO₂e markieren also die Kosten, bei denen es aus rein ökonomischer Sicht immer zu einer Änderung zugunsten einer klimafreundlicheren Wertschöpfungskette käme.

Es fällt auf, dass diese Vermeidungskosten von 21,84 €/tCO₂e in etwa dem aktuellen Preis für CO₂-Zertifikate des europäischen Emissionshandelssystems (EU ETS) entsprechen. Dieser lag im Oktober 2020 bei ca. 24,70 €/tCO₂e und schwankte in den letzten sechs Monaten zwischen 18,45 €/tCO₂e und 30,44 €/tCO₂e (EMBER 2020). Hinzu kommt, dass diese Vermeidungskosten nicht nur dem CO₂-Zertifikatspreis, sondern auch annähernd der in Deutschland ab Januar 2021 für alle geltenden CO₂-Steuer in Höhe von 25 €/tCO₂e entsprechen (vgl. Kapitel 1.1) (Bundesregierung 2020; BMWi 2019).

Durch den in etwa gleichen CO₂-Kostensatz zwischen den hier berechneten Vermeidungskosten und den politischen gesteuerten CO₂-Preisen lassen sich Erkenntnisse in beide Richtungen gewinnen: Zum einen lassen sich dadurch die oben berechneten THG-Vermeidungskosten und damit zusammenhängend auch die entwickelten Berechnungslogiken der Systemmodule A bis D plausibilisieren. Zum anderen bestätigen, begründen und rechtfertigen die berechneten Vermeidungskosten den derzeitigen ökonomischen Wert von CO2-Zertifikaten und die Bemessung der CO2-Steuer. So zeigen die obigen Berechnungen auf, dass auch schon verhältnismäßig geringe CO₂-Kostensätze (z.B. Zertifikatspreis vs. Schadenskosten) einen signifikanten Einfluss auf die Reduzierung von THG-Emissionen haben. Die größtmögliche Einsparung von THG-Emissionen wird bei CO₂-Kosten in Höhe von 408.05 €/tCO₂e erreicht, da dies szenarienübergreifend den maximalen Vermeidungskosten entspricht, die der Wechsel zur klimafreundlichsten Wertschöpfungskette (Nr. 92 auf Nr. 151) zusätzlich kosten würde (vgl. Tabelle 8.10). Allerdings liegt dies etwa bei den zweifachen Schadenskosten.

8.2.6 WSM und PROMETHEE

Wenn die Entscheidung für eine Wertschöpfungskette nicht oder nicht nur auf Grundlage der Monetarisierung von THG-Emissionen getroffen werden soll, bietet das folgende Kapitel die Möglichkeit, die Entscheidungsfindung zusätzlich durch die MADM-Methoden "Weighted Sum Method" (WSM) und PROMETHEE (vgl. Kapitel 3.3) zu unterstützen.

8.2.6.1 Entscheidungen und Ergebnisse mittels WSM

Die Anwendung der WSM folgt der Erklärung in Kapitel 3.3.5. Wie in Kapitel 3.3.5 hergeleitet, wird zur Normierung der Kriterien das Linear-Sum-Verfahren eingesetzt. Bei der Normierung werden beide zu bewertenden Kriterien als Kostenkriterien (non-beneficial-criteria) betrachtet (vgl. Kapitel 3.3.5), da sowohl die Herstellkosten als auch das GWP (die THG- Emissionen) minimiert werden sollen. Die WSM-Scores¹⁰ der pareto-optimalen Wertschöpfungsketten des Fallstudienbauteils sind in Abbildung 8.9 und Abbildung 8.10 aufgetragen. Für die WSM-Scores zur Bewertung der Wertschöpfungskettenalternativen erfolgt hier, wie auch für PROMETHEE im folgenden Kapitel, eine Sensitivitätsanalyse verschiedenster Gewichtungen von 0 % bis 100 %, um damit auch die Stabilität der Überlegenheit einer Wertschöpfungskette zu überprüfen (vgl. Geldermann et al. 2003). Die Abbildungen (Abbildung 8.9 und Abbildung 8.10) zeigen die WSM-Scores entsprechend in Abhängigkeit der gewählten Kriteriengewichtungen und des jeweiligen betrachteten Szenarios. Abbildung 8.9 beschreibt die betrachteten 150.000 km-Szenarien mit wechselndem Strommix (2020, 2030 und 100%EE) und Abbildung 8.10 die betrachteten 300.000 km-Szenarien mit wechselndem Strommix (2020, 2030 und 100%EE).

¹⁰ Zur Berechnung des WSM-Scores einer Alternative werden die normierten Kriterienwerte mit Kriteriengewichten multipliziert und die Produkte anschließend aufsummiert. Die Alternative mit dem höchsten WSM-Score wird bevorzugt (vgl. Kapitel 3.3.5).



Abbildung 8.9: WSM-Score der pareto-optimalen Wertschöpfungsketten des Fallstudienbauteils in Abhängigkeit der GWP-Gewichtung (CO₂e cradle-tograve) und der unterschiedlichen Szenarien (hier: alle 150.000 km Szenarien)



Abbildung 8.10: WSM-Score der pareto-optimalen Wertschöpfungsketten des Fallstudienbauteils in Abhängigkeit der GWP-Gewichtung (CO₂e cradle-tograve) und der unterschiedlichen Szenarien (hier: alle 300.000 km Szenarien)

Eine Analyse der WSM zur Materialwahl bei dem vorliegenden bikriteriellen Entscheidungsproblem führt zu dem Ergebnis, dass Aluminium als Werkstoff für das Bauteil frühestens ab einer CO₂e-Gewichtung¹¹ von mindestens 30,9 % empfohlen wird (vgl. Szenario 300.000 km_Strommix_2020 in Tabelle 8.11). Denn ab einer CO₂e-Gewichtung von 30,9 % ist der WSM-Score von Wertschöpfungskette Nr. 150 größer als der von Kette Nr. 91 (vgl. Abbildung 8.10). Dem Entscheider wird dann nicht mehr der Werkstoff Sekundärstahl von Sekundärstahlwerk 15, Verarbeitungskette a und das Verbauen des Bauteils in ein PHEV empfohlen, sondern Kette Nr. 150 mit Primäraluminium aus Hüttenwerk 4, die Verwendung von Fertigungskette b und das Verbauen des Bauteils in dieselbetriebenen Fahrzeugen (vgl. Tabelle 8.11).

In den Szenarien mit 150.000 km Fahrzeuglaufleistung hat eine auf Aluminium basierende pareto-optimale Wertschöpfungskette sogar erst ab 47,2 % (Nr. 150) den höchsten WSM Score und diesen auch nur im Strommix_2020 Szenario (vgl. Tabelle 8.11). In Kapitel 8.2.4 konnte diesbezüglich bereits gezeigt werden, dass bei steigendem Anteil an EE im Strommix (Strommix_2030- und 100 %EE-Szenario) nur stahlbasierte Wertschöpfungsketten für kurze Fahrzeuglaufleistungen (150.000 km) pareto-optimal sind.

¹¹ Hier und im Folgenden ist mit der Gewichtung von CO₂ die Gewichtung des GWPs gemeint.

Szenario		Gewichtung GWP (g_{co2})	Ketten Nr.	Konfiguration [Material; Materialhersteller; Ferti- gungskette; Fahrzeugantrieb]
	Strom-	$g_{CO2} \le 10,6 \%$	3	Primärstahl; Werk 7; a; PHEV
٦	miv 2020	$10,6 \% < g_{CO2} \le 47,2 \%$	91	Sekundärstahl; Werk 15; a; PHEV
کلا م	1111X_2020	47,2 % < g_{CO2}	150	Primäraluminium; Werk 4; b; Diesel
00	Strom-	$g_{CO2} \leq 5,0\%$	4	Primärstahl; Werk 7; a; BEV
50.	mix_2030	5,0 % < g _{CO2}	92	Sekundärstahl; Werk 15; a; BEV
Ĥ	100 %EE	$g_{CO2} \leq 0,6\%$	4	Primärstahl; Werk 7; a; BEV
		$0,6 \% < g_{CO2}$	92	Sekundärstahl; Werk 15; a; BEV
	Strom- mix_2020	$g_{CO2} \le 18,7 \%$	3	Primärstahl; Werk 7; a; PHEV
		18,7 % < $g_{CO2} \leq 30,9$ %	91	Sekundärstahl; Werk 15; a; PHEV
Ê		$30,9 \% < g_{CO2}$	150	Primäraluminium; Werk 4; b; Diesel
00	Strom	$g_{CO2} \leq 9,3\%$	4	Primärstahl; Werk 7; a; BEV
0.0	30000- mix 2020	$9,3 \% < g_{CO2} \le 59,8 \%$	92	Sekundärstahl; Werk 15; a; BEV
300	1111x_2030	59,8 % $< g_{CO2}$	151	Primäraluminium; Werk 4; b; PHEV
	100 % 55	$g_{CO2} \leq 1,2\%$	4	Primärstahl; Werk 7; a; BEV
	100 %EE	$1,2 \% < g_{CO2}$	92	Sekundärstahl; Werk 15; a; BEV

 Tabelle 8.11:
 Stabilität der Überlegenheit von Wertschöpfungsketten (cradle-to-grave)

 gemäß der WSM in Abhängigkeit der Gewichtung des GWPs (CO2e)

Die Ergebnisse zur Stabilitätsanalyse der Wertschöpfungsketten sind in Tabelle 8.11 aufgelistet. Exemplarisch wird hier die Stabilität der Ketten Nr. 4 und Nr. 92 erläutert: Im Szenario 150.000 km_Strommix_2030 wird Kette Nr. 4 so lange empfohlen, bis die CO₂e-Gewichtung mehr als 5 % erreicht. Ab dann ist Kette 92 zu wählen. Dies entspricht der Aussage, dass Kette Nr. 4 zu favorisieren ist, solange die Herstellkosten mit mindestens 95 % gewichtet werden. Ändert sich der Strommix auf 100 %EE, wird die Kette 92 bereits ab 0,6 % CO₂e-Gewichtung (99,4 % Herstellkosten) der Kette 4 vorgezogen. Im Szenario 300.000 km_Strommix_2030 wird Kette 4 bis zu einer CO₂e-Gewichtung von 9,3 % empfohlen. Ab 9,3 % bis 59,8 % ist Kette 92 die Kette mit dem höchsten WSM-Score. Wird ein Strommix mit 100 % EE angenommen, sollte Kette 92 ab einer CO₂e-Gewichtung von 1,2 % verwendet werden. Insgesamt ist Kette Nr. 92 im Vergleich zu Kette 4 über alle Szenarien hinweg die deutlich stabilere Lösung; diese stellt zu 95 % im 150.000 km_Strommix_2030-Szenario, zu 99,4 % im 150.000 km_100 %EE- Szenario, zu 50,5 % im 300.000 km_Strommix_2030-Szenario und zu 98,8 % im 300.000 km_100 %EE-Szenario die überlegene Lösung dar.

Dass die WSM-Scores der betrachteten Ketten zwischen den Szenarien so stark schwanken (siehe z.B. Ketten Nr. 4 und Nr. 92 in den verschiedenen Szenarien), hängt mit dem Strommix zusammen. Der WSM-Score nimmt mit steigendem Anteil an EE tendenziell zu (siehe Szenarien mit Strommix_2020 vs. 100 %EE), da die relativen Unterschiede zwischen den THG-Emissionen der pareto-optimalen Ketten dadurch ebenso zunehmen. Dies ist in der abnehmenden CO₂-Intensität des Strommixes begründet, von der ein Sekundärstahlhersteller stärker profitiert als ein Primärstahlhersteller (vgl. Kapitel 8.2.3.4). Durch die größeren absoluten Abweichungen der THG-Emissionen der zu bewertenden Ketten weichen folglich auch die normierten Werte stärker voneinander ab und damit auch der WSM-Score.

8.2.6.2 Entscheidungen und Ergebnisse mittels PROMETHEE

Die Anwendung der PROMETHEE-Methodik folgt Kapitel 3.3.6. Dort wurde hergeleitet, dass die Präferenzfunktion mit Gauß'schem Kriterium für das Kriterium GWP herangezogen wird und die lineare Präferenzfunktion für das Kriterium Herstellkosten(vgl. Kapitel 3.3.6.2). Für die Berechnung des Wendepunkts σ in der Präferenzfunktion mit Gauß'schem Kriterium gilt nach Oberschmidt et al. (2010) und Geldermann und Lerche (2014): $\sigma = ((A_{GWP}^{max} - A_{GWP}^{min})/2)$. Das heißt, als Wendepunkt wird die Hälfte der Differenz der maximalen und minimalen Ausprägung (A) des Kriteriums GWP (CO2e-Emissionen) genommen. Für die lineare Präferenzfunktion wird der Präferenzschwellwert p aus der Differenz der maximalen und minimalen Ausprägung der Herstellkosten gebildet ($p = A_{HK}^{max} - A_{HK}^{min}$) (Geldermann und Lerche 2014). Die folgende Visualisierung der Ergebnisse dieses Kapitels erfolgt mithilfe der Software Visual Promethee Academic. In Abbildung 8.11 und Abbildung 8.12 sind die Nettoflüsse¹² Φ^{Netto} der pareto-optimalen Wertschöpfungsketten des Fallstudienbauteils in Abhängigkeit von der Gewichtung des GWPs aufgetragen. Durch diese Sensitivitätsanalyse der Gewichtungen kann analog zur Analyse der WSM-Ergebnisse (vgl. Kapitel 8.2.6.1) bewertet werden, ab welcher Gewichtung ein Wechsel der Wertschöpfungskettenkonfiguration vorgenommen werden sollte, und wie stabil eine Kette bzw. dieser Wechsel ist. Abbildung 8.11 richtet sich an alle 150.000 km Szenarien mit wechselndem Strommix, und Abbildung 8.12 zeigt die Nettoflüsse für alle Szenarien mit 300.000 km Laufleistung und wechselndem Strommix.

¹² Um eine vollständige Ordnung aller Alternativen zu ermöglichen, wird in PROMETHEE der Nettofluss der Ausgangs- und Eingangsflüsse berechnet. Auf Basis der Nettoflüsse kann so eine vollständige Rangfolge aller Alternativen erzeugt werden. Die Alternative mit dem höchsten positiven Nettofluss wird bevorzugt. (vgl. Kapitel 3.3.6.3)



Abbildung 8.11: PROMETHEE-Nettoflüsse der pareto-optimalen Wertschöpfungsketten des Fallstudienbauteils in Abhängigkeit der GWP-Gewichtung (CO₂e cradle-tograve) und unterschiedlicher Szenarien (hier: alle 150.000 km Szenarien)


Abbildung 8.12: PROMETHEE-Nettoflüsse der pareto-optimalen Wertschöpfungsketten des Fallstudienbauteils in Abhängigkeit der GWP-Gewichtung (CO₂e cradle-tograve) und unterschiedlicher Szenarien (hier: alle 300.000 km Szenarien)

Bezüglich der Materialwahl ergibt sich gemäß PROMETHEE, dass Aluminium erst ab einer CO₂e-Gewichtung (GWP) von mindestens 55,4 % als Werkstoff des Bauteils eingesetzt werden sollte (siehe Szenario 300.000 km_Strommix_2020 in Tabelle 8.12). Erst ab einer CO₂e-Gewichtung von 55,4 % weist die auf Aluminium basierende Wertschöpfungskette Nr. 150 einen höheren Nettofluss als die Wertschöpfungskette Nr. 91 auf (vgl. Abbildung 8.12). In den Szenarien mit 150.000 km Fahrzeuglaufleistung, hat eine auf Aluminium basierende pareto-optimale Wertschöpfungskette sogar erst ab 65,4 % (Nr. 150) den höchsten Nettofluss und das auch nur im Strommix_2020 Szenario (vgl. Tabelle 8.12).

Die Ergebnisse der Stabilitätsanalyse der Wertschöpfungsketten (vgl. Wahrscheinlichkeitsintervalle - WSI in Abbildung 8.11 und Abbildung 8.12) sind in Tabelle 8.12 zusammengefasst. Zum Verständnis der Tabelle wird hier beispielhaft die Stabilität der Ketten Nr. 4 und Nr. 92 erläutert: In den Szenarien 150.000 km_Strommix_2030, 150.000 km_100 %EE und 300.000 km_ 100 %EE wird Kette Nr. 4 empfohlen, solange die CO₂e-Gewichtung niedriger als 53,6 % ist. Bei einer CO₂e-Gewichtung größer 53,6 % ist Kette 92 zu wählen. Entsprechend gilt: Kette Nr. 4 ist zu favorisieren, solange die Herstellkosten mit mindestens 47,3 % gewichtet werden.¹³ Im Szenario 300.000 km_Strommix_2030 wird Kette 4 bis zu einer CO₂e-Gewichtung von 10,1 % empfohlen. Ab 10,1 % bis 74,4 % ist Kette 92 die Kette mit dem

¹³ Dass die Gewichtung die zum Kettenwechsel führt, in all diesen Szenarien 53,6 % beträgt, liegt in der mathematischen Berechnungslogik des PROMETHEE-Verfahrens begründet. Im Detail hängt es damit zusammen, dass in den betroffenen Szenarien nur zwei Ketten betrachtet werden. Wegen der linearen Präferenzfunktion für die Herstellkosten, hat eine Kette dann immer den Präferenzwert 1 und eine Kette entsprechend den Wert 0. Gleichzeitig ergibt sich für den Präferenzwert des GWPs, dass eine Kette stets einen Wert von ca. 0,8645 annimmt und die andere Kette den Wert 0 (siehe dazu Kapitel 3.3.6.1 und die Herleitung in Abbildung A.7 in A.5 Systemmodul D). Durch die somit gleichen Präferenzwerte trotz verschiedener Szenarien ergibt sich nach Durchführung der weiteren Schritte des PROMETHEE-Verfahrens folglich stets die gleichen Gewichtung von 53,6 %, bei der es zum Kettenwechsel kommt.

höchsten Nettofluss und sollte in diesem Intervall ausgewählt werden. Der szenarienübergreifende Vergleich zwischen beiden Ketten zeigt, dass diese bis auf das 300.000 km_Strommix_2030-Szenario ähnlich stabil sind, da beide zu ca. 50 % (53,6 % vs. 47,4 %) die beste Lösung eines Szenarios darstellen. Nur in letzterem Szenario weist Kette 92 eine deutlich höhere Stabilität auf (vgl. Abbildung 8.12 und Tabelle 8.12).

Szenario		Gewichtung GWP ($g_{\it co2}$)	Ketten Nr.	Konfiguration [Material; Materialhersteller; Ferti- gungskette; Fahrzeugantrieb]
	Strom	$g_{C02} \le 14,4\%$	3	Primärstahl; Werk 7; a; PHEV
٦	miy 2020	14,4 % < $g_{CO2} \le 65,4$ %	91	Sekundärstahl; Werk 15; a; PHEV
) kr	1111X_2020	65,4 % < <i>g</i> _{CO2}	150	Primäraluminium; Werk 4; b; Diesel
00	Strom-	$g_{C02} \le 53,6\%$	4	Primärstahl; Werk 7; a; BEV
50.	mix_2030	53,6 % < <i>g</i> _{CO2}	92	Sekundärstahl; Werk 15; a; BEV
1	100 %EE	$g_{C02} \le 53,6\%$	4	Primärstahl; Werk 7; a; BEV
		53,6 % < g_{co2}	92	Sekundärstahl; Werk 15; a; BEV
	Strom- mix_2020	$g_{CO2} \le 40,7 \%$	3	Primärstahl; Werk 7; a; PHEV
		$40,7 \% < g_{CO2} \le 55,4 \%$	91	Sekundärstahl; Werk 15; a; PHEV
ки К		55,4 % < g_{CO2}	150	Primäraluminium; Werk 4; b; Diesel
00	Strom	$g_{C02} \le 10,1\%$	4	Primärstahl; Werk 7; a; BEV
0.0	Stron-	$10,1~\% < g_{CO2} \le 74,4~\%$	92	Sekundärstahl; Werk 15; a; BEV
30(mix_2050	74,4 % < g_{CO2}	151	Primäraluminium; Werk 4; b; PHEV
	100 % 55	$g_{C02} \le 53,6\%$	4	Primärstahl; Werk 7; a; BEV
	100 %EE	$53,6\% < g_{CO2}$	92	Sekundärstahl; Werk 15; a; BEV

 Tabelle 8.12:
 Stabilität der Überlegenheit von Wertschöpfungsketten (cradle-to-grave) nach

 PROMETHEE in Abhängigkeit der Gewichtung des GWPs (CO2e)
 (CO2e)

In Abgrenzung zur szenarienspezifischen Analyse wird im Folgenden eine szenarienübergreifende Analyse durchgeführt. Diese ist dann zielführend, wenn sich der Entscheider auf eine Wertschöpfungskette festlegen müsste, und eine spätere Anpassung nicht mehr möglich wäre (z.B. langfristige Lieferverträge mit einem Materialzulieferer). Für eine derartige Zielstellung wird ein Szenario nicht nur mit den pareto-optimalen Ketten des jeweiligen Szenarios bewertet, sondern es werden auch die pareto-optimalen Ketten der anderen Szenarien in jedes zu bewertende Szenario miteinbezogen. So werden beispielhaft für das Szenario 150.000 km_Strommix_2020, abgesehen von den Ketten 3, 91 und 150, auch die Ketten 4, 92 und 151 mitbewertet. Durch die größere Anzahl zu betrachtender Wertschöpfungsketten in jedem Szenario, wird für die Präferenzfunktion mit Gauß'schem Kriterium ein neuer Wendepunkt σ und für die lineare Präferenzfunktion ein neuer Präferenzschwellwert p bestimmt. Zur Bestimmung der "besten" Wertschöpfungskette, also der Kette mit dem höchsten Nettofluss, muss der Entscheider eine Gewichtung der Szenarien sowie eine Gewichtung der Kriterien vornehmen. Beispielhaft wird hier angenommen, dass alle Szenarien gleichwahrscheinlich sind, und die Kriterien GWP und Herstellkosten gleichgewichtet werden. Dadurch ergeben sich folgende PROMETHEE-Nettoflüsse (vgl. Abbildung 8.13). Die dazugehörigen berechneten Nettoflüsse sind zudem in Tabelle 8.13 aufgeführt.



Abbildung 8.13: Szenarienübergreifender Vergleich der PROMETHEE-Nettoflüsse der paretooptimalen Wertschöpfungsketten des Fallstudienbauteils

Auf Basis der getroffen Annahmen müsste sich der Entscheider nach PRO-METHEE für Kette 4 entscheiden. Kette 4 weist szenarienübergreifend den höchsten durchschnittlichen Nettofluss auf (0,2477) (vgl. Tabelle 8.13). Gemäß der Charakteristik von Kette 4 sollte das Bauteil aus Primärstahl bestehen, der von Primärstahlwerk 7 bezogen wird und durch Fertigungskette a zu Fallstudienbauteil weiterverarbeitet wird. Die Verwendung des Bauteils sollte in BEVs erfolgen (vgl. Tabelle 8.12).

		Nettoflüsse (Φ^{Netto}) der Wertschöpfungsketten					
	Szenario	3	4	91	92	150	151
o	Strommix_2020	0,1660	-0,0548	0,2581	0,0290	-0,1643	-0,2339
0.00 km	Strommix_2030	0,1728	0,3265	0,1168	0,2661	-0,6040	-0,2781
15	100 %EE	0,3294	0,5207	0,0270	0,2284	-0,6603	-0,4452
0	Strommix_2020	0,1645	-0,0212	0,1853	-0,0097	-0,1280	-0,1909
00.00 km	Strommix_2030	-0,0040	0,1537	0,1253	0,3054	-0,4650	0,1155
30	100 %EE	0,3082	0,5610	-0,0289	0,2260	-0,6642	-0,4022
	Ø Φ^{Netto} (alle Szenarien)	0,1895	0,2477	0,1139	0,1742	-0,4476	-0,2391
	Rangfolge	2.	1.	4.	3.	6.	5.

 Tabelle 8.13:
 Durchschnittliche Nettoflüsse der Wertschöpfungsketten und Bildung einer szenarienübergreifenden Rangfolge

8.2.7 Ergebnisvergleich und Fazit THG-Vermeidungskosten, WSM und PROMETHEE

Ein Vergleich der Ergebnisse der Stabilitätsanalyse beider Methoden (vgl. Tabelle 8.14) führt im Rahmen der Fallstudie zu der Erkenntnis, dass die WSM grundsätzlich früher, also schon bei geringen CO₂e-Gewichtungen, den Wechsel zu einer klimafreundlicheren Wertschöpfungskette empfiehlt als PROMETHEE. Als Ursache dafür liegt nahe, dass dies mit den in PROME-THEE verwendeten Präferenzfunktionen zusammenhängen könnte. Um diesen Verdacht zu untersuchen wurden zwei Szenarien exemplarisch mit variierenden Präferenzfunktionen neu berechnet. In einer ersten Berechnung wurden beide Kriterien mit linearer Präferenzfunktion untersucht. In einer zweiten Rechnung wurden die Präferenzfunktionen im Vergleich zur Ausgangssituation vertauscht, sodass das GWP nun linear, und die Herstellkosten mit Gauß'scher Präferenzfunktion abgebildet wurden. Insgesamt stellte sich heraus, dass sich die Ergebnisse zur Stabilität trotz der Verwendung unterschiedlicher Präferenzfunktionen nur leicht verändern (vgl. Tabelle A.13 im Anhang). Bisher wird die klimafreundlichste Kette Nr. 150 im 150.000 km_Strommix_2020-Szenario, nach PROMETHEE, ab einer CO_2e -Gewichtung von 65,4 % empfohlen. Dieser Wert reduziert sich bei Variation der Präferenzfunktionen am stärksten, wenn die Präferenzfunktionen vertauscht werden (vgl. Tabelle A.13 im Anhang). Dann wird ein Wert von 59,8 % erreicht. Die WSM liegt mit 47,2 % aber nach wie vor noch deutlich darunter (vgl. Tabelle 8.14).

Tabelle 8.14: Vergleich der Stabilität der Überlegenheit von Wertschöpfungsketten (cradleto-grave) zwischen WSM und PROMETHEE in Abhängigkeit der Gewichtung des GWPs (CO₂e)

Szenario		WSM Gewichtung GWP (g_{co2})	PROMETHEE Gewichtung GWP (g _{CO2})		Konfiguration [Material; Materialher- steller; Fertigungs- kette; Fahrzeugantrieb]
	Strom-	$g_{CO2} \le 10,6\%$	$g_{CO2} \le 14,4\%$	3	Stahl1er; W 7; a; PHEV
E	mix_ 2020	$10,6 \% < g_{CO2} \le 47,2 \%$ $47.2 \% < g_{CO2}$	$14,4 \% < g_{CO2} \le 65,4 \%$ $65.4 \% < g_{CO2}$	91 150	Alu1er: W 15; a; PHEV
150.000 k	Strom- mix_ 2030	$g_{CO2} \le 5,0\%$ $5,0\% < g_{CO2}$	$\frac{g_{CO2}}{g_{CO2}} \le 53,6\%$ $53,6\% < g_{CO2}$	4 92	Stahl1er; W 7; a; BEV Stahl2er; W 15; a; BEV
	100 %EE	$g_{CO2} \leq 0.6 \%$ $0.6 \% < g_{CO2}$	$g_{CO2} \leq 53,6\%$ 53,6 % < g_{CO2}	4 92	Stahl1er; W 7; a; BEV Stahl2er; W 15; a; BEV
E E	Strom- mix_ 2020	$g_{CO2} \le 18,7 \%$ $18,7 \% < g_{CO2} \le 30,9 \%$ $30,9 \% < g_{CO2}$	$g_{CO2} \le 40,7 \%$ $40,7 \% < g_{CO2} \le 55,4 \%$ $55,4 \% < g_{CO2}$	3 91 150	Stahl1er; W 7; a; PHEV Stahl2er; W 15; a; PHEV Alu1er; W 4; b; Diesel
300.000 k	Strom- mix_ 2030	$g_{CO2} \le 9,3 \%$ 9,3 % < $g_{CO2} \le 59,8 \%$ 59,8 % < g_{CO2}	$g_{CO2} \le 10,1\%$ $10,1\% < g_{CO2} \le 74,4\%$ $74,4\% < g_{CO2}$	4 92 151	Stahl1er; W 7; a; BEV Stahl2er; W 15; a; BEV Alu1er; W 4; b; PHEV
	100 %EE	$g_{CO2} \le 1,2\%$ 1,2% < g_{CO2}	$g_{CO2} \le 53,6\%$ 53,6% < g_{CO2}	4 92	Stahl1er; W 7; a; BEV Stahl2er; W 15; a; BEV

Stahl1er-Primärstahl; Stahl2er-Sekundärstahl; Alu1er-Primäraluminium; W-Werk

Die Resultate der Variation der Präferenzfunktionen verleiht den in Kapitel 8.2.6.2 durch PROMETHEE generierten Ergebnissen zusätzliche Robustheit. Gleichzeitig wird die oben gewonnene Erkenntnis bestätigt, dass die WSM im Rahmen der Fallstudie bei einer deutlich niedrigeren CO₂e-Gewichtung die klimafreundlichere Kette empfiehlt.

Für das Fallstudienunternehmen macht es also einen Unterschied, welches Verfahren zur Entscheidungsfindung eingesetzt wird, da die Empfehlungen je nach Kriteriengewichtungen zwischen den Methoden stark schwanken können (vgl. Tabelle 8.14). Wie in Kapitel 8.1 beschrieben, kann somit bestätigt werden, dass es zur Validierung der Ergebnisse empfehlenswert ist, mehrere Methoden zur Entscheidungsunterstützung anzuwenden, um eine fundierte Entscheidung treffen zu können. Zur Ermittlung einer methodenübergreifenden Entscheidung müssen die unterschiedlichen Ergebnisse der verschiedenen Methoden schließlich gemeinsam bzw. vergleichend betrachtet werden.

Im Folgenden soll beispielhaft skizziert werden, wie für die in dieser Arbeit implementierten Entscheidungsunterstützungsansätze, trotz verschiedener Ergebnisse, eine kombinierte Entscheidung herbeigeführt werden kann. Zunächst muss dazu ein fiktives Profil des Entscheiders oder der internen Firmenpolitik des Unternehmens erstellt werden, für das die Entscheidung getroffen werden soll. Hinsichtlich des THG-Vermeidungskostenansatzes wird unterstellt, dass der Entscheider eine Wertschöpfungskette favorisiert, wenn die THG-Vermeidungskosten dieser Kette unter 25€/tCO₂e liegen, da dies dem gegenwärtigen CO₂-Preis entspricht (vgl. Kapitel 8.2.5.3). Die dann auszuwählenden Ketten bestimmen sich nach Kapitel 8.2.5.2. Bezüglich der MADM-Verfahren wird festgelegt, dass der Entscheider die Kriterien GWP (CO₂e) und Herstellkosten seines Produktes jeweils mit 50 % gewichtet, da er zu gleichen Teilen klimafreundlich und ökonomisch produzieren möchte. Die dementsprechend zu verwendenden Wertschöpfungsketten können je nach MADM-Verfahren den Kapiteln 8.2.6.1 (WSM) und 8.2.6.2 (PROME-THEE) entnommen werden. Die resultierenden Ergebnisse werden gesammelt in Tabelle 8.15 dargestellt.

Tabelle 8.15:Zu verwendende Wertschöpfungskette je nach Entscheidungsunterstützungs-
ansatz am Beispiel für eine Gewichtung des GWPs und der Herstellkosten (HK)
zu jeweils 50 %

Szenario		THG-Ver- meidungs- kosten <25€/tCO₂e	WSM (GWP 50 % HK 50 %)	PROMETHEE (GWP 50 % HK 50 %)		Entschei- dung	Konfiguration [Material; Materialher- steller; Fertigungskette; Fahrzeugantrieb]
km	Strom- mix_2020	91	150	91		91	Stahl2er; W 15; a; PHEV
0.000	Strom- mix_2030	92	92	4		92	Stahl2er; W 15; a; BEV
H	100 %EE	92	92	4		92	Stahl2er; W 15; a; BEV
km	Strom- mix_2020	91	150	91		91	Stahl2er; W 15; a; PHEV
300.000	Strom- mix_2030	92	92	92		92	Stahl2er; W 15; a; BEV
	100 %EE	92	92	4	Ī	92	Stahl2er; W 15; a; BEV

Stahl1er-Primärstahl; Stahl2er-Sekundärstahl; Alu1er-Primäraluminium; W-Werk

Der Entscheider sollte die Wertschöpfungskette je nach Szenario also gemäß der Ketten 91 und 92 konfigurieren. Nach Möglichkeit sollte nur noch Sekundärstahl verwendet werden, der von Sekundärstahlwerk 15 eingekauft wird. Zur Fertigung des Fallstudienbauteils sollte Fertigungskette a eingesetzt werden. Zusätzlich kann je nach Szenario ein hoher Beitrag zum Klimaschutz geleistet werden, wenn das Bauteil entsprechend nur noch in PHEVs oder BEVs verbaut wird. Aluminium, das aus der Perspektive eines minimalen Carbon Footprints des Bauteils in den meisten Fällen die klimafreundlichste Variante darstellte (vgl. Kapitel 8.2.3), scheint derzeit noch zu teuer zu sein, um in den verwendeten Entscheidungsunterstützungsansätzen bevorzugt zu werden. Bisher konnte sich in der Beispielrechnung diesbezüglich nur Wertschöpfungskette 150, und nur in der WSM-Methode, durchsetzen.

8.3 Kritische Würdigung und Ausblick

In Systemmodul D werden verschiedene Ansätze zur Entscheidungsunterstützung zur Verfügung gestellt, die sämtliche Daten der vorherigen Systemmodule A, B und C verarbeiten. Darauf basierend werden fundierte Lösuneiner klimafreundlichen gen zur Konfiguration und gleichzeitig ökonomischen Wertschöpfungskette generiert. In Kapitel 4.1 wurden auf Basis existierender Literatur und eigener Überlegungen zahlreiche Anforderungen an ein solches Entscheidungssystem festgelegt. Diese Anforderungen (vgl. Kapitel 4.1) konnten, wie in den Kapiteln zu den Systemmodulen aufgezeigt, vollständig umgesetzt werden. Trotz dieser zahlreichen erfüllten Anforderungen konnte für die Systemmodule A, B und C bereits kritisch gewürdigt werden, dass jedes dieser Module noch vielfältige Forschungs- und Entwicklungsmöglichkeiten bietet. In Übereinstimmung dazu hat auch die Entwicklung von Systemmodul D aufgezeigt, dass noch immenses Verbesserungs- und Forschungspotenzial besteht, auf das im Folgenden näher eingegangen wird.

Es wäre denkbar, zukünftig weitere Entscheidungskriterien in Systemmodul D zu berücksichtigen, sofern diese auch in den vorherigen Systemmodulen bereits umgesetzt/implementiert worden sind. Bisher wird die Entscheidung auf Basis des GWPs und der Herstellkosten eines Produkts getroffen. Sobald die Systemmodule A, B und C weitere Kriterien werk- und anlagenspezifisch bewerten können, kann auch Systemmodul D dahingehend weiterentwickelt werden. Mögliche in Zukunft aufzunehmende Kriterien sind zum Beispiel weitere Wirkungskategorien des LCA, wie das Potenzial der Bildung von Photooxidantien, um die Problematik der Stickstoffoxid-Emissionen mitaufzunehmen (vgl. UBA 2020b oder UBA 2020c). Neben weiteren ökologischen Kriterien, könnten auch soziale Kriterien wie Korruption, politische Stabilität oder Kinderarbeit in Systemmodul D integriert werden. dungsunterstützungssystem auf Produkte aus Lithium oder Kobalt übertragen werden würde, da beide Rohstoffe unter ethisch fragwürdigen Bedingungen abgebaut werden (vgl. UBA 2019c).

Als weiteres Entscheidungskriterium wäre auch die Berücksichtigung der Bauteilqualität denkbar. Allerdings wurde diese bisher bewusst nicht in das Entscheidungsunterstützungssystem integriert, da die Bauteilqualität in Systemmodul B bereits indirekt abgebildet wird. Genügt ein Produkt beispielsweise nicht den Anforderungen aus dem Lastenheft, wird es als Ausschuss gewertet. Dies führt dazu, dass mehr Material eingekauft und verarbeitet werden muss, wodurch sowohl das GWP als auch die Herstellkosten pro Produkt steigen. Da die Entscheidung für eine Wertschöpfungskette in dieser Arbeit auf Basis dieser beiden Kriterien getroffen wird, wird die Qualität eines Ausgangsmaterials oder die zu erreichende Qualität durch Verarbeitungsverfahren somit bereits indirekt berücksichtigt. Neben weiteren Entscheidungskriterien könnten auch weitere Entscheidungsunterstützungsmethoden wie Topsis oder ELECTRE in Systemmodul D implementiert werden, um die Ergebnisse der einzelnen Methoden noch stärker zu validieren.

Überdies könnten auch Verbesserungen in der Funktionsweise des Systemmoduls D vorgenommen werden. Die Rechenzeit des Systemmoduls D, inklusive automatisierter Erstellung aller Ergebnisdiagramme, beläuft sich für die Fallstudie auf ca. drei Stunden pro Szenario. Verwendet wurde ein Computer mit i5-6200U Prozessor und 8 GB RAM. Es erscheint wahrscheinlich, dass die Rechenzeit durch Anpassungen des Programmcodes oder durch Verwendung anderer Methoden reduziert werden kann. Gegebenenfalls wäre es denkbar, Methoden des MODM zu verwenden (zumindest um pareto-optimale Lösungen schneller zu identifizieren), obwohl die Anzahl der Wertschöpfungskettenkonfigurationen eines Unternehmens diskret ist (endlicher Lösungsraum) und deshalb MADM-Verfahren eingesetzt wurden (vgl. Diskussion in Kapitel 3.3.1). Im Rahmen der Modellanwendung wäre es erstrebenswert, zukünftig eine Fallstudie durchzuführen, in der die Auswahl der Materialalternativen nicht nur Stahl oder Aluminium, sondern auch ein oder mehrere Kunststoffe umfasst. Dadurch wären noch aussagekräftigere Analysen zum Einfluss der Material- und Lieferantenwahl auf den PCF möglich. Bislang konnte noch kein Industriepartner für die Parametrisierung und Validierung einer solchen Studie gefunden werden. Zu der vorliegenden PCF-Analyse des Fallstudienbauteils sei erwähnt, dass der Einfluss der Lieferantenauswahl (vgl. Kapitel 8.2.3.4 und Kapitel 8.2.3.5) auf den Carbon Footprint noch größer als im Fallbeispiel sein könnte, da bisher nur deutsche Lieferanten berücksichtigt wurden. In der kritischen Würdigung zu Systemmodul A in Kapitel 5.3.3 wurde bereits angedeutet, dass eine Erweiterung der Methodik von Systemmodul A auf weitere Länder bzw. Werke in weiteren Ländern noch größere THG-Emissionsunterschiede zwischen den Materialherstellern aufzeigen würde. Dies hätte somit auch einen Einfluss auf den PCF eines Endprodukts sowie die empfohlenen Wertschöpfungsketten.

9 Zusammenfassung

9.1 Forschungslücken

Angesichts der ambitionierten klimapolitischen Ziele Deutschlands und der hohen Wahrscheinlichkeit, dass diese nach derzeitigem Stand nicht erreicht werden können, ist davon auszugehen, dass zukünftig neue klimapolitische Instrumente geschaffen und existierende Instrumente verschärft werden, um ausreichend Anreize zur THG-Minderung zu setzen. Ein Sektor, der davon besonders betroffen sein wird, ist die Industrie. Für Industrieunternehmen wird es darum gehen, sich zu klimafreundlichen Unternehmen zu wandeln und dabei sicherzustellen, dass die internationale Wettbewerbsfähigkeit gesichert bleibt. Für Unternehmen stellt sich dabei zum Beispiel konkret die Frage, welches THG-Minderungspotenzial für ein spezifisches Unternehmen und Produkt entlang der Wertschöpfungskette herrscht, und welche Maßnahmen zur THG-Minderung zu welchen Kosten (THG-Vermeidungskosten) umgesetzt werden könnten.

Die vorliegende Arbeit setzt an dieser Stelle an, um Unternehmen Hilfestellung bei einer klimafreundlicheren und zugleich wirtschaftlichen Konfiguration von Wertschöpfungsketten zu leisten. Dazu werden in Kapitel 2 zunächst die Rahmenbedingungen einer nachhaltigen, vor allem klimafreundlichen Produktion dargelegt. In dieser berücksichtigen nachhaltige Wertschöpfungsketten den gesamten Produktlebenszyklus, sodass neben der Produktion auch die Produktnutzung und das Ende des Lebenszyklus in die Bewertung integriert werden. Anschließend werden die treibhausgasintensiven Industrien in Deutschland und deren derzeit praktizierte Herstellungsprozesse für Stahl, Aluminium und wichtige chemische Grundstoffe hinsichtlich ihrer THG-Emissionen analysiert. Dabei wird abgeleitet, dass eine werks- bzw. anlagenspezifische Betrachtungsweise vonnöten ist, um das THG-Minderungspotenzial unternehmens- und produktspezifisch bewerten zu können. Zudem müssen auch die Emissionen aus der Nutzungsphase und das Ende des Lebenszyklus produktspezifisch berücksichtigt werden, da die Nutzungsphase entscheidenden Einfluss auf die Planung einer Wertschöpfungskette haben kann.

Bei der Einordnung des Forschungsthemas in die bestehende Literatur und bei der Diskussion und Auswahl von Methoden, die für die angestrebte ökologische (klimafreundliche) und ökonomische Bewertung und Entscheidungsunterstützung geeignet sind (Kapitel 3), zeigen sich folgende Forschungslücken:

- Aktuell ist kein Entscheidungsunterstützungssystem zur ökonomischen und ökologischen Bewertung von Wertschöpfungsketten veröffentlicht, das die THG-Emissionen der Materialherstellung und -verarbeitung werks- bzw. lieferantenspezifisch berücksichtigt.
- Es sind derzeit keine Modelle vorhanden, mit denen die THG-Emissionen der Materialhersteller bzw. ihrer produzierten Materialien je Werk mit öffentlichen Daten abgeschätzt werden können, ohne auf geheime Herstellerdaten angewiesen zu sein, sodass der Ansatz von jedem Unternehmen, der Öffentlichkeit und politischen Entscheidungsträgern verwendet werden kann.
- Auch besteht Forschungsbedarf zur Entwicklung eines generischen Ansatzes, mit dem nicht nur der gesamte Lebenszyklus, sondern auch verschiedene Produkte aus unterschiedlichen Materialien modelliert und miteinander verglichen werden können. Insbesondere könnten bspw. für die Materialien Stahl, Aluminium und einige Massenkunststoffe wie Polypropylen die THG-Emissionen und Herstellkosten für über 80 % der Produkte bzw. Bauteile für einen Pkw simuliert werden (Martens und Goldmann 2016).

- Zudem ist keines der vorhandenen ökologischen und ökonomischen Entscheidungsunterstützungssysteme so umfassend, dass es zur Materialwahl, zur Lieferantenwahl und zur Wahl der Fertigungstechnik bzw.
 Fertigungskette eingesetzt werden kann sowie Entscheidungen auf Basis des gesamten Lebenszyklus und unter Anwendung verschiedener multiattributiver Entscheidungsmodelle herleitet und durch Stabilitätsanalysen validiert.
- Kein Ansatz bietet derzeit die Möglichkeit, wertschöpfungskettenspezifische THG-Vermeidungskosten eines Produktes zu berechnen, da THG-Emissionen in vorhandenen Beiträgen bisher nicht lieferantenund fertigungsspezifisch entlang der Wertschöpfungskette ermittelt werden können.

9.2 Forschungsansatz

Zur Lösung des Forschungsproblems wurde ein Entscheidungsunterstützungssystem konzipiert, das sich in vier Systemmodule (A-D) gliedert (Kapitel 4).

Systemmodul A bilanziert die THG-Emissionen der Materialherstellung und deren Vorketten (Kapitel 5). Dazu wurden für verschiedene Materialien generische, werks-/anlagenspezifische Life Cycle Assessment (LCA)-Modelle entwickelt (Teilmodule A1 bis A6). Für Metalle (Teilmodule A1 bis A4) wurde ein kombinierter Life Cycle Assessment (LCA) Ansatz entwickelt, der auf Werksebene sowohl bottom-up als auch top-down öffentliche Daten für ein Prozess-LCA verwendet. Für chemische Grundstoffe (Teilmodule A5 und A6) wurde ebenfalls ein kombinierter LCA-Ansatz entwickelt, der zusätzlich werksspezifische Effizienzen von Produktionsanlagen auf Basis öffentlicher Daten bestimmt und integriert. Alle Teilmodule wurden am Beispiel nationaler und europäischer Metall- bzw. Chemikalienhersteller angewendet und validiert. Insgesamt wurden 83 Produktionsanlagen in 77 verschiedenen Werken bewertet.

Die Bewertung der nächsten Wertschöpfungsstufe, der Materialverarbeitung/Endproduktfertigung, erfolgt mittels der Entwicklung und Anwendung von Systemmodul B (Kapitel 6). Systemmodul B zeichnet sich durch eine simultane Bilanzierung von THG-Emissionen und Herstellkosten entlang der Fertigungskette bis zum Endprodukt aus. Um diese zu ermöglichen, wurden die Methoden LCA, Lebenszykluskostenrechnung (LCC) und Materialflusskostenrechnung (MFKR) im Rahmen der Modellierung ineinander integriert. Systemmodul B wurde anhand eines Pkw-Bauteils angewendet, das weltweit in jedem Kraftfahrzeug benötigt wird.

Die lebenszyklusorientierte Betrachtung in Systemmodul C bilanziert THG-Emissionen, die durch die Nutzungsphase von Produkten sowie durch Aktivitäten am Ende des Lebenszyklus (z.B. Recycling) verursacht werden (Kapitel 7). Die Anwendung des Systemmoduls C erfolgte anhand des Pkw-Fallstudienbauteils aus Systemmodul B. Für eine umfassende Entscheidungsgrundlage können die THG-Emissionen für verschiedene Antriebstechniken (Ottomotor, Dieselmotor, BEV (battery electric vehicle) und PHEV (plug-in hybrid electric vehicle)), Fahrzeuglaufleistungen (150.000 km und 300.000 km) und CO₂-Intensitäten der Stromerzeugung szenarienbasiert berechnet werden. Für möglichst realistische und aktuelle Ergebnisse für die Nutzungsphase, wurde im Rahmen von Systemmodul C eine Studie für den deutschen Fahrzeugmarkt durchgeführt. In dieser wurden typische Referenzfahrzeuge hinsichtlich ihres Gewichts und Treibstoffverbrauchs für jedes Fahrzeugsegment erstellt. Dadurch kann jedes Pkw-Bauteil spezifisch für jedes Fahrzeugsegment und jeden der betrachteten Fahrzeugantriebe bilanziert werden.

Zuletzt erfolgte die szenariobasierte Entscheidungsanalyse mithilfe von Systemmodul D (Kapitel 8). Darin wurde zunächst eine detaillierte PCF-Analyse durchgeführt, um Transparenz über den Einfluss von Materialien und Lieferanten auf den PCF entlang der Wertschöpfungskette zu erlangen. Zur Identifikation einer optimalen Wertschöpfungskettenkonfiguration erzeugt Systemmodul D in einem ersten Schritt alle kombinatorisch möglichen Wertschöpfungskettenkonfigurationen und ermittelt unter diesen die pareto-optimalen Konfigurationen. Mit THG-Vermeidungskostenansatz, Weighted Sum Method (WSM) und PROMETHEE wird dann aus den paretooptimalen Konfigurationen die für ein Unternehmen optimale Konfiguration bestimmt. Um die Stabilität einer optimalen Konfiguration in Abhängigkeit von den Präferenzen des Entscheidungsträgers (z.B. Kriteriengewichtungen) zu untersuchen, werden Stabilitätsanalysen für alle initial eingegebenen Szenarien durchgeführt.

9.3 Forschungsergebnisse

Dieser Abschnitt widmet sich der Beantwortung der in Kapitel 1 aufgeworfenen Forschungsfragen.

Gibt es bei treibhausgasintensiven Materialherstellungsprozessen, wie bei der Metallerzeugung oder bei der Herstellung chemischer Grundstoffe, werksspezifische Unterschiede zwischen Herstellern hinsichtlich der verursachten THG-Emissionen?

In Systemmodul A konnte gezeigt werden, dass die THG-Emissionen der Primärstahlherstellung werksabhängig in Europa zwischen 1,879 und 2,990 tCO₂e/t Rohstahl schwanken. Bei der Sekundärstahlherstellung in Deutschland schwanken die werksspezifischen THG-Emissionen zwischen 0,638 und 0,894 tCO₂e/t Rohstahl. Bei der Primäraluminiumherstellung konnten in Deutschland werksspezifische Unterschiede zwischen 13,689 und 14,964 tCO₂e/t Rohaluminium berechnet werden. Untersuchungen der Propylen-Herstellung und TDI-Herstellung in Deutschland offenbarten werksspezifische Unterschiede zwischen 0,950 und 1,510 tCO₂e/t Propylen bzw. 3,170 und 3,620 tCO₂e/t TDI. (vgl. Kapitel 5.3.1) Würden alle Werke der EU das jeweilige Material so THG-effizient wie der Best-in-Class-(BiC)-Hersteller erzeugen, könnten die jährlichen THG-Emissionen der EU um ca. 64,8 Mio. Tonnen CO₂e reduziert werden. Dies entspräche einer Einsparung von 1,7 % der jährlichen europäischen THG-Emissionen. (vgl. Kapitel 5.3.2)

Kann der Carbon Footprint eines Produkts (cradle-to-grave) durch einen Wechsel des Materiallieferanten signifikant reduziert werden?

In Kapitel 8.2.3.4 konnte demonstriert werden, dass die Lieferantenauswahl bereits gegenwärtig aber insbesondere zukünftig eine entscheidende Rolle einnehmen wird, um den PCF signifikant zu reduzieren. Dabei gilt je höher der Grad der Elektrifizierung einer Fahrzeugflotte ist und je geringer die CO₂-Intensität der Stromerzeugung, desto größer ist das Potenzial, den PCF einer Fahrzeugkomponente durch Lieferantenauswahl reduzieren zu können. Je nach Szenario verringert sich der PCF um 2,1 % (Strommix2020, 300.000 km, Benziner, Aluminium) bis 50,3 % (100 %EE, 150.000 km, BEV, Stahl).

In Deutschland könnten aktuell 1,38 Mio. Tonnen CO_2e pro Jahr eingespart werden, wenn die innerhalb eines Jahres in Deutschland gebauten Pkw nur Materialien vom jeweils klimafreundlichsten deutschen Materialhersteller (BiC) verwenden würden. Das entspricht 0,7 % der jährlichen industriebedingten THG-Emissionen Deutschlands. Würde anstelle von Primärmaterial zudem vermehrt Sekundärmaterial verwendet werden, könnten bei der Pkw-Herstellung in Deutschland 5,83 Mio. Tonnen CO_2e jährlich eingespart werden. Dies entspräche 3 % der jährlichen industriebedingten THG-Emissionen Deutschlands. Global könnten aktuell 119,8 Mio. Tonnen CO_2e bei der Pkw-Herstellung eingespart werden (0,33 % der jährlichen weltweiten THG-Emissionen), wären alle Lieferanten so klimafreundlich wie der jeweilige BiC-Hersteller der untersuchten Materialien. Durch eine zusätzlich verstärkte Verwendung von Sekundärmaterialien könnten weltweit 161,5 Mio. Tonnen CO_2e eingespart werden (0,44 % der jährlichen weltweiten THG- Emissionen). (vgl. Kapitel 8.2.3.1) Die durchgeführten Untersuchungen zeigen auch, dass die in den Lastenheften festgelegten Anforderungen an den Werkstoff eines Bauteils, insbesondere für nicht-sicherheitsrelevante Produkte, reduziert werden könnte, um den Anteil von Sekundärstahl und -aluminium in industriellen Produkten erheblich zu steigern.

Wie groß ist der Anteil eines Materialherstellers/-lieferanten am Carbon Footprint eines Produkts (cradle-to-grave)?

Je nach Antriebstechnik eines Pkw und Szenario liegt der Anteil der Primärstahlherstellung am PCF eines Stahlbauteils zwischen 4 % (Benziner, Strommix2020, 300.000 km) und 57 % (BEV, 100 %EE, 150.000 km). Der Anteil der Sekundärstahlherstellung am PCF eines Stahlbauteils liegt zwischen 2 % (Benziner, 100 %EE, 300.000 km) und 33 % (BEV, 100 %EE, 150.000 km). Der Anteil der Primäraluminiumherstellung am PCF eines Aluminiumbauteils liegt zwischen 18 % (Benziner, 100 %EE, 300.000 km) und 113 %¹ (BEV; 100 %EE, 150.000 km). (vgl. Kapitel 8.2.3.3) Im Rahmen der szenariobasierten PCF-Analyse konnte eine für die Zukunft stetig zunehmende Bedeutung der Materialherstellung von Pkw-Bauteilen am PCF gezeigt werden. So nimmt der Anteil der Materialherstellung am PCF stark mit dem Anteil an erneuerbaren Energien am Strommix und dem Grad der Elektrifizierung von Kraftfahrzeugen zu.

Wie groß ist der kombinierte Einfluss der Material- und Lieferantenwahl am Carbon Footprint eines Produkts (cradle-to-grave)?

Wie in Kapitel 8.2.3.3 zur Materialherstellung und Kapitel 8.2.3.4 zur Lieferantenauswahl beschrieben ist das Einsparpotenzial umso größer, je höher

¹ Natürlich ist es praktisch nicht möglich, einen Anteil größer 100 % zu haben; die Zahl ergibt sich aufgrund des Gutschriftverfahrens für den Umgang mit Recycling (vgl. Kapitel 7.4). Im betreffenden Szenario ist der PCF durch die RC-Gutschrift bilanziell letztlich so gering, dass dieser die THG-Emissionen der Materialherstellung unterschreitet (vgl. Kapitel 8.2.3.3).

der Anteil an erneuerbaren Energien im Strommix ist. Je nach Szenario kann der PCF durch Material- und Lieferantenwahl um mindestens 11,6 % (Strommix2020, 150.000 km, BEV, Aluminium) bis maximal 62,4 % (100 %EE, 150.000 km, BEV, Stahl) verringert werden. (vgl. Kapitel 8.2.3.5) Insgesamt kann im Rahmen der Auswertung gezeigt werden, dass Aluminium gegenwärtig für Kraftfahrzeuge, mit Ausnahme von BEVs, in der Systemgrenze cradle-to-grave klimafreundlicher als Stahl ist (vgl. Kapitel 8.2.3.6).

Wie hoch sind die zusätzlichen Kosten für ein Unternehmen (z.B. in €/tCO₂e), damit die Wertschöpfungskette eines Produkts klimafreundlicher konfiguriert wird?

In dem berechneten Fallbeispiel zur Automobilindustrie liegen die THG-Vermeidungskosten für die Wahl einer anderen pareto-optimalen Wertschöpfungskette zwischen 16,71 und 408,05 €/tCO₂e (klimafreundlichste Konfiguration). Szenarienübergreifend haben die Berechnungen zu THG-Vermeidungskosten gezeigt, dass ab einem THG-Vermeidungskostensatz von 21,84 €/tCO₂e immer eine klimafreundlichere, pareto-optimale Konfiguration gewählt werden kann. Es fällt auf, dass dieser THG-Vermeidungskostensatz von 21,84 €/tCO2e in etwa dem aktuellen Preis für CO2-Zertifieuropäischen Emissionshandelssystems (Oktober 2020: kate des 24,70 €/tCO₂e) und auch ungefähr der in Deutschland ab Januar 2021 geltenden CO₂-Steuer in Höhe von 25 €/tCO₂e entsprechen. So zeigen die in dieser Arbeit durchgeführten Berechnungen, dass auch schon verhältnismäßig geringe CO₂-Kostensätze wie der CO₂-Zertifikatspreis oder die CO₂-Steuer einen starken Einfluss auf die Reduzierung von THG-Emissionen haben, da ab dieser Höhe (ab 21,84 €/tCO₂e) immer aus ökonomischen Gründen auch gleichzeitig eine klimafreundlichere Lösung gewählt wird. (vgl. Kapitel 8.2.5)

Wie kann die für ein spezifisches Unternehmen bzw. deren Produkt optimale Wertschöpfungskette unter Berücksichtigung von Kosten und THG-Emissionen bestimmt werden?

Dazu sollte zuerst das jeweilige werksspezifische Teilmodul A1-A6 (hybride LCA-Modelle, vgl. Kapitel 5) verwendet werden, um die Herstellung des Materials zu bilanzieren aus dem das Produkt gefertigt werden soll. Anschließend können die THG-Emissionen der Fertigungskette bis zum fertigen Produkt sowie die Herstellkosten des Unternehmens mit Systemmodul B (integriertes LCA-, LCC- und MFKR-Modell, vgl. Kapitel 6) bilanziert werden. Je nach Systemgrenze der Bewertung (cradle-to-gate oder cradle-to-grave) kann außerdem Systemmodul C (Fahrzeugstudie und LCA-Modell mit Minderverbrauchsfaktoren und Sekundäreffekten, vgl. Kapitel 7) verwendet werden, um die produktspezifischen THG-Emissionen von der Nutzung und die am Ende des Lebenszyklus zu bilanzieren. Die optimale Wertschöpfungskette lässt sich schließlich mit Systemmodul D bestimmen: Es werden alle pareto-optimalen Wertschöpfungsketten ermittelt (vgl. Kapitel 8.2.4), unter denen auf Basis von Kosten (THG-Vermeidungskosten vs. interne oder extern vorgegebene Kosten, vgl. Kapitel 8.2.5.2), der WSM (vgl. Kapitel 8.2.6.1) und PROMETHEE (vgl. Kapitel 8.2.6.2) eine optimale Lösung berechnet wird. Die Stabilität einer Entscheidung mittels WSM und PROMETHEE wird über Stabilitätsanalysen der Gewichtungen untermauert.

Die optimale Wertschöpfungskette für das Fallbeispiel aus der Automobilindustrie besteht derzeit aus der Verwendung von Sekundärstahl aus Stahlwerk 15, einer Verarbeitung des Stahls zum Endprodukt durch Fertigungskette a (vgl. Kapitel 6.4) und einer Verwendung des Bauteils in PHEVs; ab 2030 sollte das Bauteil in BEVs verbaut werden (vgl. Kapitel 8.2.7). Bis auf die Fertigungskette lassen sich diese Fallstudienergebnisse auch auf andere Bauteile der Automobilindustrie übertragen, da für die nutzungsbedingten THG-Emissionen ein gewichtsbezogener Ansatz über Minderverbrauchsfaktoren und Sekundäreffekte verwendet wurde (vgl. Kapitel 7.3.2). Aluminium, das aus der Perspektive eines minimalen PCFs des Bauteils (cradle-tograve) in den meisten Fällen die klimafreundlichste Variante darstellte (vgl. Kapitel 8.2.3), scheint derzeit noch zu teuer zu sein, um im Rahmen des hier entwickelten Entscheidungsunterstützungssystems empfohlen zu werden (vgl. Kapitel 8.2.7).

Weiterhin zeigte sich, dass Diesel- und Hybridfahrzeuge für noch mindestens 10 Jahre zu geringeren THG-Emissionen in der Nutzungsphase beitragen als rein elektrische Fahrzeuge. Damit decken sich die Berechnungen mit anderen derzeit publizierten Studien, die PHEVs als benötigte "Brückentechnologie" zu einer treibhausgasarmen Mobilität bezeichnen (z.B. Merkle 2018; Göhler et al. 2019). Weiterführend konnte in den oben durchgeführten Berechnungen für Fahrzeugmodelle ab 2016 gezeigt werden, dass seitdem produzierte Dieselfahrzeuge hinsichtlich ihrer THG-Emissionen Benzinern und BEVs vorzuziehen sind.

Wie stark müssten THG-Emissionen im Gegensatz zu Herstellkosten gewichtet werden, damit produkt- bzw. produktionsbezogene Unternehmensentscheidungen klimafreundlicher getroffen werden?

Gemäß der WSM-Methode wird eine klimafreundlichere Wertschöpfungskette szenarienübergreifend immer gewählt, wenn THG-Emissionen mit mehr als 18,7 % gewichtet werden. Im 150.000 km 100 %EE-Szenario genügt bereits eine Gewichtung ab 0,6 %. Ab einer Gewichtung größer 59,8 % wurde unter den pareto-optimalen Wertschöpfungsketten stets die Klimafreundlichste empfohlen. (vgl. Kapitel 8.2.6.1) Bei Anwendung des PROME-THEE-Verfahrens müssen THG-Emissionen mit mehr als 53,6 % gewichtet werden, sodass szenarienübergreifend stets eine klimafreundlichere Wertschöpfungskette ausgewählt Mindestwert wird. Der wird im 300.000 km Strommix 2030-Szenario erreicht und liegt bei einer Gewichtung größer 10,1 %. Nach PROMETHEE wird unter Berücksichtigung aller Szenarien immer dann die klimafreundlichste Wertschöpfungskette empfohlen, wenn THG-Emissionen mit mehr als 74,4 % gewichtet werden. (vgl. Kapitel 8.2.6.2)

9.4 Forschungsausblick

Eine kritische Würdigung sowie ein Ausblick auf potenzielle zukünftige Forschungsarbeiten erfolgte spezifisch zu jedem entwickelten Systemmodul in den Kapiteln 5.3.3 (Systemmodul A), 6.5 (B), 7.6 (C) und 8.3 (D). Darauf aufbauend werden die wichtigsten Weiterentwicklungspotenziale im Folgenden auf einer Meta-Ebene zusammengefasst.

Denkbar ist eine Übertragung und Anwendung der Systemmodule A, B und C auf weitere Werke, Anlagen, Materialien und Produkte. Zum Beispiel könnten weitere Polymere wie Polyamide oder PVC sowie weitere Metalle wie Magnesium, Kupfer, Lithium oder Kobalt betrachtet werden, damit auch die 20 Gew.-% eines Pkw bewertet werden können, die hier nicht berücksichtigt wurden. Auch die bestehenden Systemmodule bieten weiteres Forschungspotenzial. Diese könnten um innovative Produktionsprozesse und Zukunftstechnologien erweitert werden. Dies betrifft bspw. die Verwendung von Wasserstoff bei der Stahlerzeugung oder die Verwendung von Brennstoffzellen in Fahrzeugen. Systemmodul C könnte außerdem um aktuelle Nutzfahrzeugmodelle erweitert werden, damit das Entscheidungsunterstützungssystem auch für Bauteile in Nutzfahrzeugen angewendet werden kann. In einem weiteren Schritt könnte auch eine Übertragung von Systemmodul C auf die Luftfahrt und die Schifffahrt angestrebt werden, um den Anwendungsbereich des Entscheidungsunterstützungssystems und dessen Beitrag zur THG-Minderung weiter zu steigern. Zudem könnten die werksund anlagenspezifischen Bilanzierungs- und Bewertungsansätze zu den THG-Emissionen (bzw. des GWPs) auch auf weitere ökologische Indikatoren wie Stickstoffoxide übertragen werden. Im Rahmen der Entscheidungsunterstützung in Systemmodul D könnten daraufhin neben Herstellkosten und THG-Emissionen weitere Entscheidungskriterien berücksichtigt werden. Diesbezüglich wäre auch eine Erweiterung um soziale Entscheidungskriterien möglich. Für Systemmodul B wäre eine Erweiterung um Umstellungskosten denkbar, um die Kosten der Umgestaltung der Fertigungskette zwischen einem Status quo und einer alternativen Fertigungskette zu quantifizieren. Diese Umstellungskosten könnten ebenso als weiteres Entscheidungskriterium in die Wertschöpfungskettenplanung eingehen oder auf das Produkt umgelegt und den Herstellkosten zugerechnet werden. Zur Entscheidungsanalyse in Systemmodul D könnten weitere multikriterielle Entscheidungsunterstützungsmethoden implementiert werden, um die Ergebnisse der bisherigen Methoden zu untermauern und zu validieren.

Zuletzt bietet sich durch eine umfassende Datenaktualisierung aller Systemmodule kontinuierlich die Möglichkeit, neue Ergebnisse zu erzielen und damit neue Aussagen und Vorhersagen treffen zu können. Das größte Hindernis stellt dabei der enorme Datenbedarf und Datenbeschaffungsaufwand der Systemmodule A, B und C dar. Alle drei Systemmodule basieren auf einer Vielzahl von Parametern für deren Parametrisierung verschiedenste Quellen vonnöten sind. Auch erfordern viele der Parameter werks- oder anlagenspezifische Parametrisierungen, sodass der Aufwand mit jedem zu untersuchenden Werk und jeder Anlage zunimmt. Zukünftig könnten Methoden zur automatisierten Datenaktualisierung implementiert werden, um den Datenbeschaffungsaufwand zu reduzieren und somit kontinuierlich neue Ergebnisse zu generieren und der Öffentlichkeit zur Verfügung stellen zu können.

A. Anhang

A.1 Grundlagen

Tabelle A.1:Produktionsmengen der deutschen und weltweiten Metallerzeugung im Jahr
2014 und Treibhausgaspotenzial (GWP100) der einzelnen Metalle und
Berechnung des produktionsmixspezifischen Treibhausgaspotenzials (Daten-
lage: (GDA 2018; U.S. Geological Survey 2014, 2015a, 2015b, 2016; Stahl-Zent-
rum 2016; World Steel Association 2018; Ecoinvent V2.2 2007-2013)

		Produktionsme [1.000	ngen 2014 t]		GWP100 [kgCO2e/kg]	
		Deutschland	Weltweit	Spezifisch	Produktions mix D	Produktionsmix Welt
Stahl	primär	30.059,00	1.226.838,00	1,6584		
	sekundär	12.882,00	432.555,00	0,4254		
	Summe	42.941,00	1.659.393,00		1,2885	1,3370
Aluminium	primär	531,00	52.502,00	12,0430		
	sekundär	599,00	10.265,00	0,4199		
	Summe	1.130,00	62.767,00		5,8817	10,1421
Kupfer	primär	351,00	14.600,00	1,8535		
	sekundär	173,00	3.300,00	1,7949		
	Summe	524,00	17.900,00		1,8342	1,8427
Blei	primär	160,00	4.460,00	2,1125		
	sekundär	248,00	5.810,00	0,6595		
	Summe	408,00	10.270,00		1,2293	1,2905
Zink	primär	165,00	12.200,00	3,3822		
	sekundär	28,00	383,00	0,8104		
	Summe	193,00	12.583,00		3,0091	3,3039
Zinn		7,00		17,1500		
Cadmium		0,30		0,8011		
Cobalt		0,50		8,3243		
Gallium		0,02		210,0800		
Gold		0,05		18722,0000		
Indium		0,01		154,2400		
Magnesium		15,00		73,7630		
Platin		0,05		14820,0000		
Silizium		28,00		5,0187		
Silber		1,75		100,9200		

	CO ₂ e [1.00	0 t]
	Deutschland	Weltweit
Rohstahl	55.330	2.218.593
Aluminium	6.646	636.592
Kupfer	961	32.984
Blei	502	13.253
Zink	581	41.573
Restl. NE-Metalle	3.345	153.793
Gesamt	67.365	3.096.788

 Tabelle A.2:
 THG-Emissionen der Erzeugung bestimmter Metalle in Deutschland und weltweit (Datenlage von Tabelle A.1)



Abbildung A.1: Kunststoffbedarf 2015 und 2016 in Europa unterteilt nach Polymerarten (PlasticsEurope 2017)

Tabelle A.3:Die meistproduzierten (Top 20) "sonstigen organischen Grundstoffe und
Chemikalien" in Deutschland im Jahr 2017 (Eigene Auswertung zum Ranking
und Anteil eines organischen Grundstoffs an allen organischen Grundstoffen
gemäß der Datenlage aus Statistisches Bundesamt (2018a))

	Sonstige organische Grundstoffe und Chemikalien	Tonnen/Jahr (Deutschland 2017)	Anteil
1	Ethylen	5.200.449	14%
2	Propylen	4.149.683	11%
3	1,2-Dichlorethan (Ethylendichlorid)	2.470.192	7%
4	Benzol	1.799.216	5%
5	Vinylchlorid (Chlorethylen)	1.471.386	4%
6	Buten	1.311.036	4%
7	Naphthalin und andere Mischungen aromatischer	1 007 202	
	Kohlenwasserstoffe	1.097.292	3%
8	Oxiran (Ethylenoxid)	1.096.652	3%
9	Methanol (Methylalkohol)	1.046.777	3%
10	Einwertige Phenole	998.234	3%
11	Buta-1,3-dien	970.750	3%
12	Methyloxiran (Propylenoxid)	859.380	2%
13	Cumol	783.693	2%
14	Methanal (Formaldehyd)	747.934	2%
15	Andere Ester der Essigsäure (z.B. n-Butylacetat, Isobutylacetat, 2-	686 653	
	Ethoxyethylacetat, Vinylacetat)	080.033	2%
16	Isocyanate	678.299	2%
17	Andere acyclische zwei- und mehrwertige Alkohole (z.B.	660 527	
	Hexylenglykol, Trimethylolpropan, Pentaerythritt, Mannit)	000.337	2%
18	Tuluol	597.208	2%
19	Ungesättigte acyclische sowie alicyclische einbasische		
	Carbonsäuren und ihre Anhydride, Halogenide, Peroxide und	E33 E33	
	Peroxsäuren; ihre HSNN-Derivate (z.B.Acrylsäure, Sorbinsäure),	522.525	
	a.n.g.		1%
20	Andere aromatische Kohlenwasserstoffe	521.294	1%

Tabelle A.4:Die meistproduzierten (Top 20) "sonstigen anorganischen Grundstoffe und
Chemikalien" in Deutschland im Jahr 2017 (Eigene Auswertung zum Ranking
und Anteil eines anorganischen Grundstoffs an allen anorganischen Grundstoff
fen gemäß der Datenlage aus Statistisches Bundesamt (2018a))

	Sonstige anorganische Grundstoffe und Chemikalien	Tonnen/Jahr (Deutschland 2017)	Anteil
1	Chlor	4.052.688	17%
2	Natriumhydroxid in wässriger Lösung (Natronlauge)	3.405.578	14%
3	Schwefelsäure	3.090.987	13%
4	Dinatriumcarbonat (Soda)	2.545.508	11%
5	Chlorwasserstoff (Salzsäure)	1.878.902	8%
6	Aluminiumhydroxid	1.470.935	6%
7	Sublimierter oder gefällter Schwefel; kolloider Schwefel	1.244.785	5%
8	Ruß	855.381	4%
9	Silicate (einschl. handelsüblicher Silicate der Alkalimetalle)	834.987	4%
10	Chloride (ohne Ammonoiumchlorid)	729.976	3%
11	Andere Sulfate	589.944	2%
12	Oleum	473.113	2%
13	Andere Carbonate (z.B. Kalium-, Barium-, Lithium-, Strontium-,		
	Ammoniumcarbonate; Blei-, Magnesium-, Kupfer-,	285.724	1%
	Peroxocarbonate (Percarbonate))		
14	Sulfite	235.365	1%
15	Wasserstoffperoxid, auch mit Harnstoff verfestigt	217.787	1%
16	Siliciumdioxid	215.569	1%
17	Hydrazin und Hydroxylamin und ihre anorganischen Salze	198.718	1%
18	Trinatrium-, Triammonium-, Kalium- und Calciumphosphate (ohne		
	Calciumhydrogenorthophosphat), Polyphosphate (ohne	159.450	1%
	Natriumphosphat) u.a. Phosphate		
19	Calciumcarbonat	157.240	1%
20	Aluminiumsulfat, berechnet auf 17-18% AL203 und Bariumsulfat	157.186	1%



Abbildung A.2: Übersicht der Fertigungsverfahren in Hauptgruppe 1 Urformen (in Anlehnung an DIN 8580)



Abbildung A.3: Übersicht der Fertigungsverfahren in Hauptgruppe 3 Trennen (DIN 8580)



Abbildung A.4: Übersicht über die Einteilung der Hauptgruppe 5 Beschichten (DIN 8580)

A.2 Notation Teilmodule A5 und A6 (ECCO₂-HVC und ECCO₂-Basic Chemicals)

 Tabelle A.5:
 In der Modellierung der Teilmodule A5 und A6 verwendete Variablen, Indizes und Parameter (ECCO₂-HVC-Modell und ECCO₂-Basic Chemicals-Modell)

Notation	Bezeichnung	Einheit
$p \in \{1, \dots, P\}$	Menge aller Produkte. P ist das Endprodukt bis zu dem die Emissionen produktspezifisch berechnet werden kön- nen.	-
$s \in \{1, \dots, S\}$	Menge alle modellierten chemischen Werke.	-
$c \in \{1, \dots, C\}$ $C \subseteq \{1, \dots, P\}$	Menge aller Crackerprodukte.	-
$b \in \{1, \dots, B\}$	Menge aller Brennstoffe.	-
$x \in \{1, \dots, X\}$	Menge aller modellierter Cracker.	-
$x \in X_{FCC}$ $X_{FCC} \sqsubseteq \{1, \dots, X\}$	Menge aller modellierten FCC-Cracker.	-
$f \in \{1, \dots, F\}$	Menge aller verschiedenen Rohstoffe im Cracker (Cra- cker Feedstock).	-
$e \in \{1, \dots, E\}$	Menge aller Edukte.	-
$z \in \{1, \dots, Z\}$	Menge aller Zwischenprodukte.	-
$h \in \{1, \dots, H\}$	Menge aller Hauptprodukte.	-
$y \in \{1, \dots, Y\}$	Menge aller Nebenprodukte.	-
$E \subseteq Z, H$ $\subseteq \{1, \dots, P\}$	Alle Edukte sind eine Teilmenge der Zwischen- und Hauptprodukte. Zwischen- und Hauptprodukte sind eine Teilmenge aller Produkte.	-
Edc _e ∈ Edc	Menge aller Edukte, in der alle Edukte namentlich be- schrieben sind.	-
CrPr _c ∈ CrPr	Menge aller Crackerprodukte, in der alle Crackerpro- dukte namentlich beschrieben sind.	-
$ImPr_z \in ImPr$	Menge aller Zwischenprodukte, in der alle Zwischenpro- dukte namentlich beschrieben sind.	-
$MPr_h \in MPr$	Menge aller Hauptprodukte, in der alle Hauptprodukte namentlich beschrieben sind.	-
GWP ^{Ecoinvent}	Menge, die die GWPs von Edukten und Produkten aus der Ecoinvent V.2.2 Datenbank enthält.	kgCO₂e kg

GWP ^{Ecoprofiles}	Menge, die die GWPs von Edukten und Produkten aus den Eco-profiles von PlasticsEurope enthält.	kgCO₂e kg
$GWP_{p,s}^{\Pr}$	GWP des Produkts p bei Herstellung in Werk s .	kgCO ₂ e kg
$GWP_{p,s}^{Energy, Prod}$	GWP der benötigten Produktionsenergie zur Herstellung von Produkt <i>p</i> in Werk <i>s</i> .	kgCO₂e kg
$GWP_{p,s}^{\text{Prechain}}$	GWP der Prozesse in der Vorkette zur Herstellung von Produkt <i>p</i> in Werk <i>s</i> .	kgCO₂e kg
<i>GWP</i> ^{Steam} _{p,s}	GWP des eingesetzten Dampfes zur Herstellung von Pro- dukt <i>p</i> in Werk <i>s</i> .	kgCO₂e kg
GWP ^{Elec} _{p,s}	GWP des eingesetzten Stroms zur Herstellung von Pro- dukt <i>p</i> in Werk <i>s</i> .	kgCO₂e kg
<i>GWP</i> ^{Fuel} _{p,s}	GWP der eingesetzten Treibstoffe zur Herstellung von Produkt p in Werk s .	kgCO₂e kg
SEC ^{Steam}	Spezifischer Energieverbrauch der Dampferzeugung zur Herstellung von Produkt <i>p</i> in Werk <i>s</i> .	GJ t
$g_{b,s}^{\text{Steam}} \in [0; 1]$	Anteil des Brennstoffs <i>b</i> in Werk <i>s</i> zur Erzeugung von Dampf.	-
SEF ^{Steam} _{b,s}	Emissionsfaktor des Brennstoffs <i>b</i> der zur Dampferzeu- gung in Werk <i>s</i> eingesetzt wird.	kgCO₂e kWh
$\eta_s^{\text{Steam}} \in [0; 1]$	Wirkungsgrad der Dampferzeugung für Werk s.	-
$EFF_{p,s}^{\text{Site, Prod}} \in [0; 1]$	Effizienz der Herstellung von Produkt <i>p</i> in Werk <i>s</i> .	-
$SEC_p^{Steam, Ecoinvent}$	Spezifischer Energieverbrauch der Dampferzeugung zur Herstellung von Produkt p aus Ecoinvent. Der Energiever- brauch richtet sich nach dem Brennstoff (in der Regel Erdgas).	MJ kg
SEF ^{NG}	Emissionsfaktor von Erdgas zur Dampferzeugung in Werk <i>s</i> .	kgCO₂e kWh
$SEC_p^{Steam, max}$	Maximaler spezifischer Energieverbrauch der Dampfer- zeugung zur Herstellung von Produkt <i>p</i> .	GJ t
$SEC_p^{\text{Steam, min}}$	Minimaler spezifischer Energieverbrauch der Dampfer- zeugung zur Herstellung von Produkt <i>p</i> .	GJ t
SEC ^{Elec} _{p,s}	Spezifischer Energieverbrauch an elektrischer Energie zur Herstellung von Produkt p in Werk s .	GJ t
W ^{Elec, selfprod}	Anteil des selbsterzeugten Stroms in Werk s.	%
SEF ^{Elec} _{b,s}	Emissionsfaktor des Brennstoffs <i>b</i> zur Erzeugung von Strom in Werk <i>s</i> .	kgCO₂e kWh

$SEC_p^{Elec, Ecoinvent}$	Spezifischer Energieverbrauch an elektrischer Energie zur Herstellung von Produkt p gemäß Ecoinvent	kWh kg
<i>GWP</i> ^{CountryElecMix}	Emissionsfaktor für den Strommix des Landes in dem das Werk <i>s</i> steht.	kgCO₂e kWh
$\eta_s^{ m Elec}$	Wirkungsgrad des Kraftwerks des Werkes s.	%
$SEC_p^{Elec, \max}$	Maximaler spezifischer Energieverbrauch an elektr. Ener- gie zur Herstellung von Produkt <i>p</i> .	GJ t
$SEC_p^{Elec, \min}$	Minimaler spezifischer Energieverbrauch an elektrischer Energie zur Herstellung von Produkt <i>p</i> .	GJ t
SEC ^{Fuel, Ecoinvent}	Spezifischer Energieverbrauch an Treibstoffen zur Her- stellung von Produkt <i>p</i> gemäß Ecoinvent.	MJ kg
$SEC_{p,s}^{Fuel}$	Spezifischer Energieverbrauch an Treibstoffen zur Herstellung von Produkt p in Werk s .	GJ t
SEF ^{Fuel}	Emissionsfaktor der Treibstoffe, die in Werk <i>s</i> eingesetzt werden.	kgCO₂e kWh
SEF ^{Fuel,SuppData}	Emissionsfaktor für Treibstoffe des Werkes s gemäß der Lieferantendatenbank des Modellnutzers.	kgCO₂e kWh
SEF ^{HVC}	Emissionsfaktor der Rohstoffe für den Cracker x des Pro- duktionswerks s zur Herstellung chemischer Wertpro- dukte.	kgCO₂e kWh
A	Anzahl aller Cracker der betrachteten Werke. Entspricht X. Auf diese Weise aber automatische Berechnung, ohne dass die Anzahl der Cracker bekannt sein muss.	-
A _s	Anzahl der Cracker in Werk s	-
β	$\beta = 10^6$; Korrekturwert zur sinngemäßen Berechnung von A_s (falls $SEF_{x,s}^{HVC}$ sehr klein).	-
$SEC_p^{Fuel, max}$	Maximaler spezifischer Energieverbrauch an Treibstoffen zur Herstellung von Produkt <i>p</i> .	GJ t
$SEC_p^{Fuel, \min}$	Minimaler spezifischer Energieverbrauch an Treibstoffen zur Herstellung von Produkt <i>p</i> .	GJ t
W ^{INTL}	Gewichtung des Integrationsgrades zur Berechnung der Produktionseffizienz.	%
W ^{INNL}	Gewichtung des Innovationsgrades zur Berechnung der Produktionseffizienz.	%
W ^{LF,FA,UR,etc}	Gewichtung der Faktoren/Kriterien der Cracker- und Pro- duktionseffizienz.	%
$LF_s \in [0; 10]$	Standortfaktor des Werkes <i>s</i> .	
FAs	Werksfläche des Werkes <i>s</i> .	km²

 $W_{x,f}$

$Output_{p,s}$	Produktionsmenge des Produkts <i>p</i> in Werk <i>s</i> .	t a
PC _{p,s}	Produktionskapazität des Produkts <i>p</i> in Werk <i>s</i> .	t a
FLs	Produktportfolie /Flexibilität des Werkes s [Anzahl Pro- duktionsanlagen im Werk]	-
$PY_{p,s}$	Ausbeute des Produkts <i>p</i> im Werk <i>s</i> .	%
$TE_s \in [0; 10]$	Technische Ausstattung des Werkes s.	-
LL	Lower Limit = Untergrenze – wird für jeden Faktor/jedes Kriterium definiert, mit dem die Cracker-oder Produkti- onseffizienz berechnet wird (z.B. <i>LF_{LL}</i>).	-
UL	Upper Limit = Obergrenze - wird für jeden Faktor/jedes Kriterium definiert, mit dem die Cracker-oder Produkti- onseffizienz berechnet wird (z.B. LF_{UL}).	-
$GWP_{c,x,s}^{CrPr}$	GWP eines Cracker-Wertprodukts c aus dem Cracker x bei Herstellung in Werk s .	$\frac{kgCO_2e}{kg}$
$GWP_{c,x,s}^{Energy, Cr}$	GWP der benötigten Energie des Crackers x zur Herstel- lung von Cracker-Wertprodukt c in Werk s.	$\frac{\text{kgCO}_2\text{e}}{\text{kg}}$
$GWP_{c,x,s}^{\text{Prechain, Cr}}$	GWP der Vorkette des Crackers <i>x</i> zur Herstellung des Cracker-Wertprodukt <i>c</i> in Werk <i>s</i> .	kgCO₂e kg
$SEC_{c,x,s}^{HVC}$	Spezifischer Energieverbrauch zur Herstellung eines Cra- cker-Wertprodukts <i>c</i> im Cracker <i>x</i> in Werk <i>s</i> .	GJ t
$SEC_x^{HVC, max}$	Maximaler spezifischer Energieverbrauch des Crackers <i>x</i> zur Herstellung von Cracker-Wertprodukten.	GJ t
$SEC_x^{HVC, min}$	Minimaler spezifischer Energieverbrauch des Crackers x zur Herstellung von Cracker-Wertprodukten.	GJ t
$EFF_{c,x,s}^{Cr}$	Produktionseffizienz (Effizienz der Herstellung) von Cra- cker-Wertprodukt c in Cracker x in Werk s .	%
$SEC_{f}^{FCC,max}$	Maximaler spezifischer Energieverbrauch eines FCC-Cra- ckers, wenn Rohstoff f der Cracker-Feed ist.	GJ t
SEC_f^{\max}	Maximaler spezifischer Energieverbrauch eines Steamcrackers, wenn Rohstoff f der Cracker-Feed ist.	GJ t
f	Rohstoff/Feedtyp (z.B. Ethan, Propan etc.)	
$SEC_{f}^{FCC,min}$	Minimaler spezifischer Energieverbrauch eines FCC-Cra- ckers, wenn Rohstoff f der Cracker-Feed ist.	GJ t
SEC_f^{\min}	Minimaler spezifischer Energieverbrauch eines Steamcra- ckers, wenn Rohstoff f der Cracker-Feed ist.	GJ t

Anteil des Rohstoffs f am Feedstock des Crackers x.

%
$v_x^{\mathrm{UR,Cr}}$	Berechneter Wert für den Faktor UR (Auslastungsrate) des Crackers x.	-
CrPrC _{c,x}	Produktionskapazität von Cracker-Wertprodukt <i>c</i> im Cra- cker <i>x</i> .	t a
FC _{s,x}	Werkskapazität aller Produkte des Werkes s zu dem der Cracker x gehört.	t a
FA _{s,x}	Werksfläche des Werkes s zu dem der Cracker x gehört.	km²
NI _{s,x}	Nelson Index des Werkes <i>s</i> auf dem der Cracker <i>x</i> steht.	
CrAge _x	Alter des Crackers x.	
$SEF_x^{HVC, \min}$	Minimaler Emissionsfaktor der Rohstoffe für den Cracker x zur Herstellung chemischer Wertprodukte.	kgCO2e kWh
$SEF_x^{HVC, max}$	Maximaler Emissionsfaktor der Rohstoffe für den Cracker x zur Herstellung chemischer Wertprodukte.	kgCO2e kWh
SEF_f^{\min}	Minimaler Emissionsfaktor des Rohstoffs f , der in den Cracker eingespeist wird.	kgCO₂e kWh
SEF_{f}^{\max}	Maximaler Emissionsfaktor des Rohstoffs f , der in den Cracker eingespeist wird.	kgCO2e kWh
CR _x	Rohstoffumsetzungsgrad des Crackers x	%
GWP ^{Prechain,Cr}	GWP der Vorkette des Crackers zur Herstellung des Cra- cker-Wertprodukts <i>c</i> im Cracker <i>x</i> des Werkes <i>s</i> .	$\frac{kgCO_2e}{kg}$
$GWP_{f}^{\text{Ecoprofiles}} \qquad \begin{array}{c} \text{GWP des Rohstoffs } f \text{ aus den Ecoprofiles von PlasticsEurope.} \\ \text{rope.} \end{array}$		kgCO2e kg
$GWP_{f}^{\text{Ecoinvent}}$ GWP des Rohstoffs f aus Ecoinvent.		kgCO₂e kg
GWP GWP der Prozesse in der Vorkette zur Herstellung von Produkt p in Werk s.		kgCO₂e kg
$GWP_{e,s}^{Supp, Data}$	GWP eines Edukts <i>e</i> in Werk <i>s</i> , wenn dem Modellnutzer Primärdaten des Lieferanten vorliegen.	kgCO₂e kg
$GWP_PE_{p,s}^{Pr}$	GWP der benötigten Produktionsenergie (PE) zur Herstel- lung von Produkt <i>p</i> in Werk <i>s</i> .	kgCO₂e kg
RE(p,s)	Reaktionsgleichung zur Herstellung von Produkt <i>p</i> in Werk <i>s</i> .	-
n ^{Edc} _{e,p,s}	Stoffmenge des Edukts e die zur Produktion des Produkts p im Werk s benötigt wird.	mol
$M_e^{\rm Edc}$	Molmasse des Edukts <i>e</i> .	kg mol
$n_{p,s}^{ m Pr}$	Entstehende Stoffmenge des Produkts p bei Herstellung in Werk s	mol

$n_{y,p,s}^{\mathrm{byPr}}$	Stoffmenge des Nebenprodukts y , das bei der Herstellung von Produkt p inWerk s entsteht.	mol
$M_y^{ m by Pr}$	Molmasse des Nebenprodukts y.	kg mol
$m_{e,p,s}^{ m Edc}$	Masse des Edukts <i>e</i> , das zur Produktion des Produkts <i>p</i> im Werk <i>s</i> benötigt wird.	kg
$m_{p,s}^{ m Pr}$	Aus der Reaktion entstehende Masse des Produkts p bei Produktion in Werk s .	kg
$m_{y,p,s}^{\mathrm{byPr}}$	Aus der Reaktion entstehende Masse des Nebenprodukts y bei Produktion in Werk s.	kg
$m_{e,y,p,s}^{ m Edc,\ byPr}$	Teil der Masse eines Edukts e , der bei der Erzeugung von p in Werk s zu Nebenprodukt y reagiert.	kg
$M_p^{ m Pr}$	Molmasse des Produkts <i>p.</i>	kg mol
a _i	Hilfsmatrix, gibt vor für welche Wertschöpfungsstufe <i>i</i> das GWP (des entsprechenden Produkts dieser Wert- schöpfungsstufe <i>i</i>) berechnet wird.	-

A.3 Notation Systemmodul B

Tabelle A.6: In der Modellierung von Systemmodul B verwendete Variablen, Indizes und Parameter

Notation	Beschreibung	Einheit
$e \in \{1,2,3\}$	Energietyp (elektrische, thermische, Energieträger)	-
$f \in F$	$f \in F$ Menge aller Material/Werkstofflieferan- ten	
$i \in \{1,, n\}$	Menge aller Produktionsprozesse	-
j∈J	Menge aller Recyclingprozesse	-
$k \in K$	Menge aller Kühl-und Schmierstoffe (KSS)	-
$l \in \{1, \dots z\}$	Menge der Länder aus denen elektrische Energie oder Energieträger bezogen wer- den	-
$m \in M$	Menge aller Maschinen	-
$p \in P$	Menge der Drücke, für die Druckluft ein- gekauft werden kann	-

$r \in R$	Menge aller Materialien/Werkstoffe	
$r \in R \land k \in K$ $\sqsubseteq s \in S$	Die Materialien r und KSS k sind auch in der Menge der verschiedenen Sekun- däroutputs enthalten	-
$s \in S$	Sekundäroutputs (Rohmaterialien, Werk- stoffe, Kühl- und Schmierstoffe etc.)	-
$t \in T_m$	Jahr der Nutzung einer Maschine m	-
$A_{m,t}$	Zusätzliche Kosten der Maschine m	[€]
B _{compressed} air,i	Vom Druckluftbedarf abhängiger Teil der THG-Bilanz des Primäroutputs von Pro- zess <i>i</i>	[kgCO₂e]
B cooling liquids,i	Vom Bedarf an Kühlschmierstoffen und Reinigungsmitteln abhängiger Teil der THG-Bilanz des Primäroutputs von Pro- zess <i>i</i>	[kgCO2e]
B _{direct emissions,i}	Von den direkten Emissionen abhängiger Teil der THG-Bilanz des Primäroutputs von Prozess <i>i</i>	[kgCO ₂ e]
B _{energy,i}	Vom Energiebedarf abhängiger Teil der THG-Bilanz des Primäroutputs von Pro- zess <i>i</i>	[kgCO2e]
B _i	THG-Emissionen verursacht durch Pro- zess i	[kgCO ₂ e]
B _{material} input,i	Vom Material und zugehörigem Trans- port abhängiger Teil der THG-Bilanz des Primäroutputs von Prozess <i>i</i>	[kgCO2e]
B _{secondary output,i}	Aus Sekundäroutputs resultierender Ef- fekt auf die THG-Bilanz des Primärout- puts von Prozess <i>i</i>	[kgCO ₂ e]
$c_{D_s}^{MS,3}$	Entsorgungsgebühr des Sekundäroutputs (MS)	{€/kg, s in kg €/l, s in l €/Stück, s in Stück
$c_{D_s}^{\mathrm{RJ},3}$	Entsorgungsgebühr des Produktionsaus- schusses (RJ)	{€/kg, s in kg €/l, s in l €/Stück, s in Stück
c _{e,l}	Kosten zur Bereitstellung des Energietyps <i>e</i> aus Land <i>l</i>	[€/kWh]
C _{GHG}	THG-Emissionskostensatz	[€/kgCO ₂ e]
c _{i,r}	Durchschnittliche Kosten des Materials r , das in Prozess i eingesetzt wird	{ €/kg, r in kg { €/l, r in l €/Stück, r in Stück
C _k	Kosten der Bereitstellung des KSS k	[€/]
C _{Manufacturing,i}	Durch Prozess <i>i</i> verursachte Herstellkos- ten	[€]

C _{Manufacturing}	Herstellkosten eines Produkts	[€]
$c_{i,s}^{MS,1}$	Kosten, um den Sekundäroutput <i>s</i> intern zu recyceln und als Input wieder zurück in den Prozess <i>i</i> zu führen (direkte Wei- terverwendung).	$\begin{cases} \notin/kg, & s \text{ in } kg \\ \notin/l, & s \text{ in } l \\ \notin/Stück, & s \text{ in } Stück \end{cases}$
<i>c</i> ^{MS,2} _{<i>i,s</i>}	Kosten, um den Sekundäroutput <i>s</i> wieder als Input zurück in den Prozess <i>i</i> zu führen (direkte Weiterverwendung).	$\begin{cases} \notin/kg, & s \text{ in } kg \\ \notin/l, & s \text{ in } l \\ \notin/St \ ck, & s \text{ in } St \ ck \end{cases}$
CB _i	THG-Emissionskosten von Prozess i	[€]
<i>c</i> _p	Kosten für Druckluft mit dem Druck p	[€/m³]
<i>CP</i> _i	Prozesskosten von Prozess i	[€]
C _{POi}	Kosten des Non-Produkt-Outputs von Prozess <i>i</i>	[€]
C _{NPOi}	Kosten des Produkt-Outputs von Prozess i	[€]
c _{rf}	Kosten des Materials r von Lieferant f	$\begin{cases} {\mathbb{E}/kg}, & r \text{ in } kg \\ {\mathbb{E}/l}, & r \text{ in } l \\ {\mathbb{E}/St \ddot{u}ck}, & r \text{ in } St \ddot{u}ck \end{cases}$
$c_{i,s}^{\mathrm{RJ},1}$	Kosten, um Ausschuss auf Basis von Se- kundäroutput <i>s</i> zu recyceln und als Input wieder zurück in den Prozess <i>i</i> zu führen (direkte Weiterverwendung)	$\begin{cases} {\bf €}/kg, & s \text{ in } kg \\ {\bf €}/l, & s \text{ in } l \\ {\bf €}/Stück, & s \text{ in } Stück \end{cases}$
$c_{i,s}^{\mathrm{RJ},2}$	Kosten, um Ausschuss auf Basis von Se- kundäroutput <i>s</i> wieder als Input zurück in den Prozess <i>i</i> zu führen (direkte Weiter- verwendung)	$\begin{cases} \notin/kg, & s \text{ in } kg \\ \notin/l, & s \text{ in } l \\ \notin/Stück, & s \text{ in } Stück \end{cases}$
CT _m	Kosten für Inbetriebnahme und Training der Maschine <i>m</i>	[€]
$c_{Tp_{i,k}}$	Innerbetriebliche Transportkosten damit KSS k zu Prozess i gelangt	[€/I]
c _{Tp_{i,r}}	Innerbetriebliche Transportkosten damit Material r zu Prozess i gelangt	$\begin{cases} \notin/kg, & r \text{ in } kg \\ \notin/l, & r \text{ in } l \\ \notin/St \ddot{u} ck, & r \text{ in } St \ddot{u} ck \end{cases}$
c _{Tp_{i,s}}	Innerbetriebliche Transportkosten für den Sekundäroutput <i>s</i> aus Prozess <i>i</i>	{€/kg, s in kg €/l, s in l €/Stück, s in Stück
$c_{Tp_{i,s}}^{\mathrm{RJ},3}$	Innerbetriebliche Transportkosten für den Produktionsausschuss <i>s</i> aus Prozess <i>i</i>	{€/kg, s in kg €/l, s in l €/Stück, s in Stück
C _{Wh_{i,k}}	Verursachte Lagerhaltungskosten des KSS k damit es in Prozess i eingesetzt werden kann	[€/I]
C _{Whi,r}	Verursachte Lagerhaltungskosten des Ma- terials <i>r</i> damit es in Prozess <i>i</i> eingesetzt werden kann	$\begin{cases} \notin/kg, & r \text{ in } kg \\ \notin/l, & r \text{ in } l \\ \notin/St \ ck, & r \text{ in } St \ ck \end{cases}$

C _{Whi,s}	Lagerhaltungskosten für den Sekundärou- tput <i>s</i> aus Prozess <i>i</i>	€/kg, s in kg €/l, s in l €/Stück, s in Stück			
$c_{Wh_{i,s}}^{RJ,3}$	Lagerhaltungskosten für den Ausschuss <i>s</i> aus Prozess <i>i</i>	{€/kg, sin kg {€/l, sin l €/Stück, sin Stück			
$C_{WHND_{i,s}}^{MS,3}$	Personal- und/oder Maschinenkosten für das Sammeln und Sortieren des in Prozess <i>i</i> entstandenen Sekundäroutputs <i>s</i>	[€]			
$C^{RJ,3}_{WHND_{i,s}}$	Personal- und/oder Maschinenkosten für das Sammeln und Sortieren des in Prozess <i>i</i> entstandenen Auschusses <i>s</i>	[€]			
d	Anzahl der Arbeitstage pro Jahr	[Tage/Jahr]			
$d_{i,m}$	Arbeitszeit der Maschine m in Prozess i	[h]			
D _{<i>i</i>,<i>m</i>,<i>p</i>}	Bedarf an Druckluft unter Druck p für Maschine m in Prozess i	[m³]			
<i>d</i> _{<i>i</i>,<i>r</i>_{<i>f</i>}}	Transport distanz des Material inputs r_f (bezogen von Lieferant f) zur Verwen- dung in Prozess i	[km]			
ECi	Energiekosten von Prozess i	[€]			
<i>e</i> _{<i>i,k</i>}	Behandlung von verschmutzten KSS vom Typ <i>k</i> aus Prozess <i>i</i>	definiert als: = $\begin{cases} 1 , Aufbereitung \\ 0 , Entsorgung \end{cases}$			
EFk	Emissionsfaktor zur vorschriftsgemäßen Entsorgung des KSS k	[kgCO ₂ e/I]			
EF _{l,e}	Emissionsfaktor der Energiebereitstellung in Abhängigkeit vom Energietyp <i>e</i> und Land <i>l</i>	[kgCO2e/kWh]			
EF _{rf}	Emissionsfaktor des Materialherstel- lers/Lieferanten f zur Herstellung des Rohstoffs/Materials r	[kgCO₂e/Materialeinheit]			
EF _t	Emissionsfaktor des Transportmittels t	[kgCO ₂ e/1000km]			
E _{i,m,e,l}	Energiebedarf des Energietyps <i>e</i> aus Her- kunftsland <i>l</i> in [kWh] für Maschine <i>m</i> in Prozess <i>i</i>	[kWh]			
h	Arbeitsstunden pro Tag	[h/Tag]			
Im	Anschaffungskosten der Maschine m	[€]			
M _{i,k}	Menge des eingesetzten KSS k in Prozess i	[1]			
M _{i,m,k}	Menge des eingesetzten KSS k in Maschine m in Prozess i	[1]			
m _{i,r_f}	Masse des in Prozess <i>i</i> als Stückgut einge- setzten Materials	[kg]			

M _{i,r_f}	Menge des Materials/Rohstoffs (r) von Lieferant (f) für Prozess (i)	kg, rinkg l, rinl Stück rinStück
M _{i,s}	Menge des Sekundäroutputs von Mate- rial s in Prozess i	$\begin{cases} kg, & s \text{ in } kg \\ l, & s \text{ in } l \\ Stück, & s \text{ in } Stück \end{cases}$
MCi	Materialkosten von Prozess i	[€]
MOi	Material- und Fertigungsgemeinkosten eines Produktionsprozesses <i>i</i>	[€]
$MPO_{i,r}^{kg}$	Menge Primäroutput von Prozess <i>i</i> der aus Material <i>r</i> besteht	[kg]
MPO ¹ _{i,r}	Menge Primäroutput von Prozess <i>i</i> der aus Material <i>r</i> besteht	[1]
$MPO_{i,r}^{Stk}$	Menge Primäroutput von Prozess <i>i</i> der aus Material <i>r</i> besteht	[Stück]
$mr_{LCC_{i,m}}$	Lebenszyklusbezogener Maschinenstun- densatz der Maschine <i>m</i> in Prozess <i>i</i>	[€/h]
MS _{i,j,s}	in Prozess <i>i</i> eingesetzte Menge des in Re- cyclingprozess <i>j</i> recycelten Sekundärout- puts <i>s</i>	kg, s in kg l, s in l Stück, s in Stück
$MS_{i,s}^{kg}$	Menge Sekundäroutput von Prozess <i>i</i> der aus Material <i>s</i> besteht	[kg]
$MS_{i,s}^{l}$	Menge Sekundäroutput von Prozess <i>i</i> der aus Material <i>s</i> besteht	[1]
$MS_{i,s}^{\mathrm{Stk}}$	Menge Sekundäroutput von Prozess <i>i</i> der aus Material <i>s</i> besteht	[Stück]
MT _{m,t}	Instandhaltungskosten der Maschine m im Jahr t	[€]
NPO _i	Non-Produkt-Output des Prozess i	[kg]
POi	Produkt-Output des Prozess i	[kg]
0 _{<i>i</i>,<i>m</i>,<i>t</i>}	Laufende Kosten der Maschine m in Prozess i im Jahr t	[€]
ratio _{P0i}	Anteil des Produkt-Outputs am Output des Prozess <i>i</i>	-
ratio _{NPOi}	Anteil des Non-Produkt-Outputs am Output des Prozess <i>i</i>	-
j _{i,k}	Recycling/Aufbereitungsprozess für den in Produktionsprozess <i>i</i> verwendeten KSS <i>k</i>	-
$R_{i,k,j_{i,k}}$	Emissionsfaktor des Recyclings des in Prozess i benutzten KSS k durch den Re- cyclingprozess $j_{i,k}$	[kgCO ₂ e/l]
<i>RJ</i> _{<i>i</i>,<i>s</i>}	Menge an Ausschussteilen auf Basis des Materials <i>s</i> , die als Input zurück in den Prozess <i>i</i> geführt werden	kg, s in kg l, s in l Stück, s in Stück

RJ _{i,j,s}	Menge an Ausschussteilen auf Basis des Materials s die in RC-Prozess j recycelt werden und Prozess <i>i</i> daraufhin wieder zugeführt werden	{ kg, s in kg { l, s in l Stück, s in Stück
$RJ_{i,r}^{\text{Stk}}$	Produktausschuss in Prozess i , der aus Material r besteht	[Stück]
SC _i	Systemkosten von Prozess i	[€]
si _{i,r}	Umrechnungsfaktor von Stückgut in kg für das verwendete Material <i>r</i> in Prozess <i>i</i>	[kg/Stück]
si _{i,s}	Umrechnungsfaktor des Sekundäroutputs in Prozess <i>i</i> von Stückgut in kg für das Material <i>s</i>	[kg/Stück]
<i>u</i> _{<i>i</i>,<i>r</i>}	Einheit des Materialinputs für Material <i>r</i> für den Prozess <i>i</i>	definiert als: $=\begin{cases} 1, & r \text{ in } kg \\ 2, & r \text{ in } l \\ 3, & r \text{ in } Stück \end{cases}$
u _m	Auslastung der Maschine m	[%]
WCi	Abfallmanagementkosten von Prozess i	[€]
Z	Diskontierungszinssatz	[%]
ρ _{i,r}	Dichte des Materials r , das in Prozess i verwendet wird	[kg/l]

A.4 Systemmodul C



Abbildung A.5: Verbrauch in Abhängigkeit des Fahrzeuggewichts für benzinbetriebe Pkw im Jahr 2016 (eigene Berechnung auf Basis von Daten gemäß DAT GmbH et al. 2016)



Abbildung A.6: Verbrauch in Abhängigkeit des Fahrzeuggewichts für dieselbetriebe Pkw im Jahr 2016 (eigene Berechnung auf Basis von Daten gemäß DAT GmbH et al. 2016) Tabelle A.7: Abschätzung werksspezifischer THG-Emissionen der Fallstudienwerke (Sekundärstahlwerke) aus Teilmodul A2 unter Berücksichtigung eines Strommixes für das Jahr 2030

Werk	THG-Emissionen Teilmodul A2 [kgCO₂e/t Rohstahl]	THG-Emissionen Teilmodul A2 Szenario Strommix_2030 [kgCO2e/t Rohstahl]
Werk 1	801	573
Werk 2	736	500
Werk 3	812	554
Werk 4	876	667
Werk 5	700	525
Werk 6	843	595
Werk 7	866	650
Werk 8	807	587
Werk 9	779	517
Werk 10	889	678
Werk 11	749	570
Werk 12	825	554
Werk 13	794	564
Werk 14	894	629
Werk 15	638	459

Tabelle A.8:Abschätzung werksspezifischer THG-Emissionen der Fallstudienwerke
(Primäraluminiumwerke) aus Teilmodul A3 unter Berücksichtigung eines
Strommixes für das Jahr 2030

Werk	THG-Emissionen Teilmodul A3 [kgCO₂e/t Rohaluminium]	THG-Emissionen Teilmodul A3 Szenario Strommix_2030 [kgCO2e/t Rohaluminium]
Werk 1	13.876	8.623
Werk 2	13.915	8.676
Werk 3	14.964	9.710
Werk 4	13.689	8.436

A.5 Systemmodul D

Tabelle A.9:Cradle-to-grave THG-Emissionen des Fallstudienbauteils in der Stahl- und
Aluminiumvariante (hellgrün: geringster PCF in der Systemgrenze Nutzung +
EoL; dunkelgrün: geringster PCF gesamt)

	THG-Emissionen bei der H	erstellung (o	radle-to-ga	te) des Fal	studienbau	teils [kgCO	2e/Bauteil]		
	Fallstudienbauteil:		C 1.1.1						
THG-Emissionen i	n [kgCO2e/Bauteil]		Staniva	ariante		<i>P</i>	luminiui	nvariante	2
	Materialherstellung		0,425 3,466						
and the terms to	Materialtransport		0,0)49		0,028			
cradie-to-gate	Fertigung				0,3	307			
	Gesamt (cradle-to-gate)		0,7	/81			3,8	01	
	Materialherstellung		0,3	305			2,4	76	
cradle-to-gate	Materialtransport		0,0)49			0,0	28	
(Strommix_2030)	Fertigung				0,2	241			
	Gesamt (cradle-to-gate)		0,5	595			2,7	'45	
	Materialherstellung		0,2	243			1,9	145	
cradle-to-gate	Materialtransport		0,0)49			0,0	28	
100% EE	Fertigung				0,2	204			
	Gesamt (cradle-to-gate)		0,4	196			1,9	173	
	PCF des Fallstudie	nbauteils [k	gCO2e/Bau	teil] (cradle	-to-gate +	Nutzung + E	oL)		
THG-Emissionen i	n [kgCO2e/Bauteil]	Benziner	Diesel	PHEV	BEV	Benziner	Diesel	PHEV	BEV
	Nutzung:	7,625 5,409 5,193 6,369			4,883 3,090 3,511 4,818				
Szenario (Basis)	EoL:		-0,4	487		-2,218			
150 000 km	Nutzung + EoL	7,138	4,922	4,706	5,882	2,665	0,872	1,293	2,600
	Gesamt (cradle-to-grave)	7,919	5,703	5,487	6,663	6,466	4,673	5,094	6,401
	Nutzung:	15,250	10,817	10,385	12,739	9,766	6,180	7,022	9,636
Szenario (km_max)	EoL:		-0,4	487		-2,218			
Strommix_2020, 300.000 km	Nutzung + EoL:	14,763	10,330	9,898	12,252	7,548	3,962	4,804	7,418
	Gesamt (cradle-to-grave)	15,544	11,111	10,679	13,033	11,349	7,763	8,605	11,219
	Nutzung:	7,625	5,409	3,663	3,290	4,883	3,090	2,362	2,488
Szenario	EoL:		-0,!	540		-1,334			
(Strommix_2030), 150,000 km	Nutzung + EoL:	7,085	4,869	3,123	2,750	3,549	1,756	1,028	1,154
1901000 1111	Gesamt (cradle-to-grave)	7,680	5,464	3,718	3,345	6,294	4,501	3,773	3,899
	Nutzung:	15,250	10,817	7,326	6,580	9,766	6,180	4,723	4,977
Szenario	EoL:		-0,!	540			-1,3	334	
(Strommix_2030,	Nutzung + EoL:	14,710	10,277	6,786	6,040	8,432	4,846	3,389	3,643
Kin_inax)	Gesamt (cradle-to-grave)	15,305	10,872	7,381	6,635	11,177	7,591	6,134	6,388
	Nutzung:	7,625	5,409	2,439	0,825	4,883	3,090	1,442	0,624
Szenario (100%EE).	EoL:		-0,!	585			-0,8	382	
150.000 km	Nutzung + EoL:	7,040	4,824	1,854	0,240	4,001	2,208	0,560	-0,258
	Gesamt (cradle-to-grave)	7,536	5,3 <u>20</u>	2,351	0,736	5,974	4,181	2,5 <u>33</u>	1,715
	Nutzung:	15,250	10,817	4,878	1,650	9,766	6,180	2,884	1,248
Szenario (100%EE).	EoL:		-0,!	585			-0,8	382	
km_max)	Nutzung + EoL:	14,665	10,232	4,293	1,065	8,884	5,298	2,002	0,366
	Gesamt (cradle-to-grave)	15,1 <u>61</u>	10,7 <u>29</u>	4,7 <u>90</u>	1,562	10,8 <u>57</u>	7,2 <u>71</u>	3,975	2,339

			Stablyariante			Aluminiumvariante				
	Szenario	Materiallieferant	Benziner	Diesel	PHEV	BEV	Benziner	Diesel	PHEV	BEV
					[kg	CO2e/Falls	tudienbaut	eil]		
		BIC	7,8330	5,6167	5,4007	6,5774	6,3710	4,5778	4,9988	6,3059
	Strommix 2020	wic	8,3905	6,1742	5,9581	7,1348	6,6182	4,8250	5,2460	6,5531
		Einsparung	0,5575	0,5575	0,5575	0,5575	0,2472	0,2472	0,2472	0,2472
Ē		200	7 (204	5 4044	2 (507	2 2052	C 4664	4 2722	2.6452	2 7740
8	Strommiy 2020		7,6204	5,4041	3,038/	3,2852	0,1004	4,3732	3,0452	3,7719
0.0	Stronmix 2050	VVIC.	8,2715	0,0552	4,3097	3,9303	0,4134	4,6202	3,8922	4,0189
15		Einsparung	0,0511	0,0511	0,6511	0,0511	0,2470	0,2470	0,2470	0,2470
		BIC	7,4904	5,2742	2,3047	0,6905	5,8506	4,0574	2,4098	1,5917
	100%EE	WIC	8,1895	5,9732	3,0037	1,3896	6,0977	4,3045	2,6568	1,8388
		Einsparung	0,6990	0,6990	0,6990	0,6990	0,2470	0,2470	0,2470	0,2470
		BIC	15,4579	11,0254	10,5933	12,9467	11,2539	7,6675	8,5096	11,1237
	Strommix 2020	WIC	16,0154	11,5828	11,1508	13,5041	11,5012	7,9148	8,7568	11,3709
		Einsparung	0,5575	0,5575	0,5575	0,5575	0,2472	0,2472	0,2472	0,2472
ε										
ő		BIC	15,2453	10,8128	7,3219	6,5750	11,0494	7,4630	6,0069	6,2603
0.0	Strommix 2030	WIC	15,8964	11,4638	7,9729	7,2261	11,2964	7,7100	6,2539	6,5073
30(Einsparung	0,6511	0,6511	0,6511	0,6511	0,2470	0,2470	0,2470	0,2470
		BIC	15,1154	10,6828	4,7438	1,5156	10,7336	7,1472	3,8518	2,2158
	100%EE	WIC	15,8144	11,3818	5,4428	2,2146	10,9806	7,3942	4,0989	2,4628
		Einsparung	0,6990	0,6990	0,6990	0,6990	0,2470	0,2470	0,2470	0,2470

Tabelle A.10: Cradle-to-grave THG-Emissionen des Fallstudienbauteils in der Stahl- und Aluminiumvariante in Abhängigkeit vom Best-in-Class (BIC) und Worst-in-Class (WIC) Materialhersteller Tabelle A.11:Regressionsgeraden und Bestimmtheitsmaß der linearen Regressions zwischen
den cradle-to-grave THG-Emissionen des Fallstudienbauteils in der Stahl- und
Aluminiumvariante in Abhängigkeit vom Best-in-Class (BIC) Materialhersteller
und dem Emissionsfaktor der Stromerzeugung

Szenario	1			150.0	00 km			
Sectorio	[kgCO2e/Fallstudi	/keCO2e/Fallstudienbauteill						
Emissionsfaktor								
[kgCO2e/kWh]	Benziner (S)	Diesel (S)	PHEV (S)	BEV (S)	Benziner (A)	Diesel (A)	PHEV (A)	BEV (A)
0,376 (Strommix_2020)	7,832987288	5,61671925	5,400675925	6,57737137	6,37098017	4,577781775	4,998802835	6,305853923
0,242 (Strommix_2030)	7,620388518	5,40412048	3,658672235	3,285225023	6,16639417	4,373195775	3,645161491	3,771854232
0,0715 (100%EE)	7,490447288	5,27417925	2,304660156	0,69054449	5,85063917	4,057440775	2,409751316	1,591735286
Regressionsgerade	y=1,1088x+7,3931	y=1,1088x+5,1768	y=10,068x+1,4739	y=19,15x-0,8835	y=1,7152x+5,7351	y=1,7152x+3,9419	y=8,4467x+1,7432	y=15,361x+0,3592
Bestimmtheitsmaß	0,9575	0,9575	0,9802	0,9812	0,9971	0,9971	0,9909	0,9874
Szenario	300.000 km							
	[kgCO2e/Fallstudienbauteil]							
Emissionsfaktor								
[kgCO2e/kWh]	Benziner(S)	Diesel(S)	PHEV(S)	BEV(S)	Benziner(A)	Diesel(A)	PHEV(A)	BEV(A)
0,376 (Strommix_2020)	15,45791458	11,0253785	10,59329185	12,94668274	11,25394434	7,66754755	8,50958967	11,12369185
0,242 (Strommix_2030)	15,24531581	10,81277973	7,32188324	6,574988815	11,04935834	7,46296155	6,006892982	6,260278464
0,0715 (100%EE)	15,11537458	10,6828385	4,743800312	1,51556898	10,73360334	7,14720655	3,851827632	2,215795572
Regressionsgerade	y=1,1088x+15,018	y=1,1088x+10,586	y=19,028x+3,1797	y=37,19x-1,5353	y=1,7152x+10,618	y=1,752x+7,0317	y=15,178x+2,6343	y=29,008x-0,1337
Bestimmtheitsmaß	0,9575	0,9575	0,9812	0,9818	0,9971	0,9971	0,9875	0,9852

Tabelle A.12:Auflistung der möglichen Konfigurationen der Wertschöpfungskette des
Fallstudienbauteils

Ketten-Nr.	Materialbezeichnung	Lieferant/Werk	Verarbeitungskette	Antriebstechnik
1	DD13	Werk 7_Stahl_Primär	а	Benziner
2	DD13	Werk 7_Stahl_Primär	а	Diesel
3	DD13	Werk 7_Stahl_Primär	а	PHEV_2030
4	DD13	Werk 7_Stahl_Primär	а	BEV_2030
5	DD13	Werk 12_Stahl_Primär	а	Benziner
6	DD13	Werk 12_Stahl_Primär	а	Diesel
7	DD13	Werk 12_Stahl_Primär	а	PHEV_2030
8	DD13	Werk 12_Stahl_Primär	а	BEV_2030
9	DD13	Werk 19_Stahl_Primär	а	Benziner
10	DD13	Werk 19_Stahl_Primär	а	Diesel
11	DD13	Werk 19_Stahl_Primär	а	PHEV_2030
12	DD13	Werk 19_Stahl_Primär	а	BEV_2030
13	DD13	Werk 20_Stahl_Primär	а	Benziner
14	DD13	Werk 20_Stahl_Primär	а	Diesel
15	DD13	Werk 20_Stahl_Primär	а	PHEV_2030
16	DD13	Werk 20_Stahl_Primär	а	BEV_2030
17	DD13	Werk 9_Stahl_Primär	а	Benziner
18	DD13	Werk 9_Stahl_Primär	а	Diesel
19	DD13	Werk 9_Stahl_Primär	а	PHEV_2030
20	DD13	Werk 9_Stahl_Primär	а	BEV_2030
21	DD13	Werk 8_Stahl_Primär	а	Benziner
22	DD13	Werk 8_Stahl_Primär	а	Diesel
23	DD13	Werk 8_Stahl_Primär	а	PHEV_2030
24	DD13	Werk 8_Stahl_Primär	а	BEV_2030

25 DD13	Werk 10_Stahl_Primär	а	Benziner
26 DD13	Werk 10 Stahl Primär	а	Diesel
27 DD13	Werk 10 Stahl Primär	а	PHEV 2030
28 DD13	Werk 10 Stahl Primär	a	BEV 2030
29 DD13	Werk 11 Stahl Primär	а	Benziner
30 DD13	Werk 11 Stahl Primär	а	Diesel
31 DD13	Werk 11 Stahl Primär	а	PHEV 2030
32 DD13	Werk 11 Stahl Primär	a	BEV 2030
33 DD13	Werk 16 Stahl Primär	a	Benziner
34 DD13	Werk 16 Stahl Primär	a	Diesel
35 DD13	Werk 16 Stahl Primär	a	PHEV 2030
36 DD13	Werk 16 Stahl Primär	a	BEV 2030
37 DD13	Werk 22 Stahl Primär	a	Benziner
38 0013	Werk 22_Stahl Primär	a	Diesel
30 0013	Werk 22_Stahl_Frimär	2	PHEV 2030
40 DD13	Werk 22_Stahl_Frimär	2	BEV 2030
40 DD13 41 DD13	Work 12 Stahl Primär	2	Benziner
41 DD13 42 DD13	Work 13_Stahl_Frinda	a	Diesel
42 DD13 42 DD13	Work 12 Stabl Drimär	a	
43 DD13	Werk 13_Stahl Primär	a	PHEV_2030
44 DD13	Werk 15_Stahl Primär	d	BEV_2030
45 DD13	Werk 1_Stabl Primär	d	Discol
40 DD13	Werk 1_Stant_Primar	d	Diesei
47 DD13	werk 1_Stani_Primar	а	PHEV_2030
48 DD13	werk 1_Stanl_Primar	а	BEV_2030
49 DD13	Werk 6_Stahl_Primar	а	Benziner
50 DD13	Werk 6_Stahl_Primar	а	Diesel
51 DD13	Werk 6_Stahl_Primar	а	PHEV_2030
52 DD13	Werk 6_Stahl_Primar	а	BEV_2030
53 DD13	Werk 2_Stahl_Primär	а	Benziner
54 DD13	Werk 2_Stahl_Primär	а	Diesel
55 DD13	Werk 2_Stahl_Primär	а	PHEV_2030
56 DD13	Werk 2_Stahl_Primär	а	BEV_2030
57 DD13	Werk 3_Stahl_Primär	а	Benziner
58 DD13	Werk 3_Stahl_Primär	а	Diesel
59 DD13	Werk 3_Stahl_Primär	а	PHEV_2030
60 DD13	Werk 3_Stahl_Primär	а	BEV_2030
61 DD13	Werk 4_Stahl_Primär	а	Benziner
62 DD13	Werk 4_Stahl_Primär	а	Diesel
63 DD13	Werk 4_Stahl_Primär	а	PHEV_2030
64 DD13	Werk 4_Stahl_Primär	а	BEV_2030
65 DD13	Werk 14_Stahl_Primär	а	Benziner
66 DD13	Werk 14_Stahl_Primär	а	Diesel
67 DD13	Werk 14_Stahl_Primär	а	PHEV_2030
68 DD13	Werk 14_Stahl_Primär	а	BEV_2030
69 DD13	Werk 21_Stahl_Primär	а	Benziner
70 DD13	Werk 21_Stahl_Primär	а	Diesel
71 DD13	Werk 21_Stahl_Primär	а	PHEV_2030
72 DD13	Werk 21_Stahl_Primär	а	BEV_2030
73 DD13	Werk 18_Stahl_Primär	а	Benziner
74 DD13	Werk 18_Stahl_Primär	а	Diesel
75 DD13	Werk 18_Stahl_Primär	а	PHEV_2030
76 DD13	Werk 18_Stahl_Primär	а	BEV_2030
77 DD13	Werk 15_Stahl_Primär	а	Benziner

78 DD13	Werk 15_Stahl_Primär	а	Diesel
79 DD13	Werk 15 Stahl Primär	а	PHEV 2030
80 DD13	Werk 15 Stahl Primär	а	BEV 2030
81 DD13	Werk 17 Stahl Primär	а	Benziner
82 DD13	Werk 17 Stahl Primär	а	Diesel
83 DD13	Werk 17 Stahl Primär	а	PHEV 2030
84 DD13	Werk 17 Stahl Primär	a	BEV 2030
85 DD13	Werk 5 Stahl Primär	a	Benziner
86 DD13	Werk 5 Stahl Primär	a	Diesel
87 0013	Werk 5 Stahl Primär	a	PHEV 2030
88 0013	Werk 5_Stahl_Primär	2	BEV 2030
89 0013	Werk 15 Stabl Sekundär	2	Benziner
90 0013	Werk 15_Stahl_Sekundar	2	Diesel
01 DD13	Werk 15_Stahl_Sekundar	2	DHEV/ 2020
02 0013	Work 15_Stahl_Sekundar	a 2	PEV 2020
92 DD15	Werk E Stahl Sekunder	a	BEV_2030
93 DD13	Werk 5_Stant_Sekundar	d	Disasl
94 DD13	Werk 5_Stanl_Sekundar	a	Diesei
95 DD13	Werk S_Stanl_Sekundar	a	PHEV_2030
96 DD13	Werk 5_Stanl_Sekundar	а	BEV_2030
97 DD13	Werk 2_Stahl_Sekundar	а	Benziner
98 DD13	Werk 2_Stahl_Sekundar	а	Diesel
99 DD13	Werk 2_Stahl_Sekundär	а	PHEV_2030
100 DD13	Werk 2_Stahl_Sekundär	а	BEV_2030
101 DD13	Werk 11_Stahl_Sekundär	а	Benziner
102 DD13	Werk 11_Stahl_Sekundär	а	Diesel
103 DD13	Werk 11_Stahl_Sekundär	а	PHEV_2030
104 DD13	Werk 11_Stahl_Sekundär	а	BEV_2030
105 DD13	Werk 9_Stahl_Sekundär	а	Benziner
106 DD13	Werk 9_Stahl_Sekundär	а	Diesel
107 DD13	Werk 9_Stahl_Sekundär	а	PHEV_2030
108 DD13	Werk 9_Stahl_Sekundär	а	BEV_2030
109 DD13	Werk 13_Stahl_Sekundär	а	Benziner
110 DD13	Werk 13_Stahl_Sekundär	а	Diesel
111 DD13	Werk 13_Stahl_Sekundär	а	PHEV_2030
112 DD13	Werk 13_Stahl_Sekundär	а	BEV_2030
113 DD13	Werk 1_Stahl_Sekundär	а	Benziner
114 DD13	Werk 1_Stahl_Sekundär	а	Diesel
115 DD13	Werk 1_Stahl_Sekundär	а	PHEV_2030
116 DD13	Werk 1_Stahl_Sekundär	а	BEV_2030
117 DD13	Werk 8 Stahl Sekundär	а	Benziner
118 DD13	Werk 8 Stahl Sekundär	а	Diesel
119 DD13	Werk 8 Stahl Sekundär	а	PHEV 2030
120 DD13	Werk 8 Stahl Sekundär	а	BEV 2030
121 DD13	Werk 3 Stahl Sekundär	а	Benziner
122 DD13	Werk 3 Stahl Sekundär	a	Diesel
123 DD13	Werk 3 Stahl Sekundär	a	PHEV 2030
124 DD13	Werk 3 Stahl Sekundär	a	BEV 2030
125 DD13	Werk 12 Stahl Sekundär	a	Benziner
126 DD13	Werk 12 Stahl Sekundär	a	Diesel
127 DD13	Werk 12 Stabl Sekundär	a	PHEV 2030
128 DD13	Werk 12 Stahl Sekundar	a	BEV 2030
129 0013	Werk 6 Stahl Sekundar	a	Benziner
130 0013	Werk 6 Stahl Sekundar	2	Diesel
100 0010	Werk o_stani_sekundar	u	Diesei

131 D	D13	Werk 6_Stahl_Sekundär	а	PHEV_2030
132 D	D13	Werk 6_Stahl_Sekundär	а	BEV_2030
133 D	D13	Werk 4_Stahl_Sekundär	а	Benziner
134 D	D13	Werk 4_Stahl_Sekundär	а	Diesel
135 D	D13	Werk 4_Stahl_Sekundär	а	PHEV_2030
136 D	D13	Werk 4_Stahl_Sekundär	а	BEV_2030
137 D	D13	Werk 7_Stahl_Sekundär	а	Benziner
138 D	D13	Werk 7_Stahl_Sekundär	а	Diesel
139 D	D13	Werk 7_Stahl_Sekundär	a	PHEV_2030
140 D	D13	Werk 7_Stahl_Sekundär	а	BEV_2030
141 D	D13	Werk 10_Stahl_Sekundär	а	Benziner
142 D	D13	Werk 10_Stahl_Sekundär	а	Diesel
143 D	D13	Werk 10_Stahl_Sekundär	a	PHEV_2030
144 D	D13	Werk 10_Stahl_Sekundär	a	BEV_2030
145 D	D13	Werk 14_Stahl_Sekundär	a	Benziner
146 D	D13	Werk 14_Stahl_Sekundär	a	Diesel
147 D	D13	Werk 14_Stahl_Sekundär	a	PHEV_2030
148 D	D13	Werk 14_Stahl_Sekundär	a	BEV_2030
149 A	lMg3	Werk 4_Alu_Primär	b	Benziner
150 A	lMg3	Werk 4_Alu_Primär	b	Diesel
151 A	lMg3	Werk 4_Alu_Primär	b	PHEV_2030
152 A	lMg3	Werk 4_Alu_Primär	b	BEV_2030
153 A	lMg3	Werk 1_Alu_Primär	b	Benziner
154 A	lMg3	Werk 1_Alu_Primär	b	Diesel
155 A	lMg3	Werk 1_Alu_Primär	b	PHEV_2030
156 A	lMg3	Werk 1_Alu_Primär	b	BEV_2030
157 A	lMg3	Werk 2_Alu_Primär	b	Benziner
158 A	lMg3	Werk 2_Alu_Primär	b	Diesel
159 A	lMg3	Werk 2_Alu_Primär	b	PHEV_2030
160 A	lMg3	Werk 2_Alu_Primär	b	BEV_2030
161 A	lMg3	Werk 3_Alu_Primär	b	Benziner
162 A	lMg3	Werk 3_Alu_Primär	b	Diesel
163 A	lMg3	Werk 3_Alu_Primär	b	PHEV_2030
164 A	lMg3	Werk 3_Alu_Primär	b	BEV_2030

Präferenzfunktion p in Abhängigkeit der Differenz d des paarweisen Vergleichs zwischen Alternative i und Alternative j: $p\left(d_{GWP_{i,j}}\right) = 1 - e^{-\frac{d_{GWP_{i,j}}^2}{2\sigma^2}}$ mit: $d_{GWP_{i,j}} = A_{GWP_i} - A_{GWP_j}$ und: $\sigma = \frac{A_{GWP}^{max} - A_{GWP}^{min}}{2}$ Für nur zwei Alternativen (Wertschöpfungsketten) gilt: $A_{GWP_i} = A_{GWP}^{max} \text{ und } A_{GWP_j} = A_{GWP}^{min}$ Dann: $p\left(d_{GWP_{i,j}}\right) = 1 - e^{-\left(\frac{d_{GWP_{i,j}}^2}{2}\right)^2}$ $\triangleq p\left(d_{GWP_{i,j}}\right) = 1 - e^{-2} = 0,8646647168$

Abbildung A.7: Teilherleitung zur Begründung der identischen Stabilitätsniveaus der PROMETHEE Ergebnisse in verschiedenen Szenarien

Tabelle A.13: Stabilität der Wertschöpfungsketten mit den höchsten PROMETHEE-Nettoflüssen bei Variation der Präferenzfunktionen

_					
		PROMETHEE	PROMETHEE	PROMETHEE	Kot
Szenario		Gewichtung GWP (g_{co2})	Gewichtung GWP (g_{co2})	Gewichtung GWP (g_{CO2})	Ket-
		GWP: Gauß	GWP: Linear	GWP: Linear	ten
		HK: Linear	HK: Linear	HK: Gauß	Nr.
	Strom-	$g_{CO2} \le 14,4\%$	$g_{CO2} \le 11,7 \%$	$g_{CO2} \leq 3,5\%$	3
150.000 km	mix_	$14,4\% < g_{CO2} \le 65,4\%$	$11,7 \% < g_{CO2} \le 62,5 \%$	$3,5 \% < g_{CO2} \le 59,8 \%$	91
	2020;	65,4 % < <i>g</i> _{CO2}	$62,5 \% < g_{CO2}$	59,8 % < <i>g</i> _{CO2}	150
	Strom-	$g_{CO2} \le 53,6 \%$	$g_{CO2} \le 50,0 \%$	$g_{C02} \le 46,4\%$	4
	mix_	53,6 % < g_{CO2}	50,0 % < g_{CO2}	46,4 % < g_{CO2}	92
	2030;				

GWP: Global Warming Potential; HK: Herstellkosen

B. Literaturverzeichnis

- ADAC (2020): Stromverbrauch Elektroautos: Aktuelle Modelle im ADAC Test. Hg. v. Der Allgemeine Deutsche Automobil-Club e.V. (ADAC).
 Online verfügbar unter https://www.adac.de/rund-umsfahrzeug/tests/elektromobilitaet/stromverbrauch-elektroautos-adactest/, zuletzt geprüft am 30.08.2020.
- Adeos Media GmbH (2018): Aluminium Price Today in Euro. Online verfügbar unter https://www.aluminiumpreis.eu/, zuletzt geprüft am 03.09.2018.
- Afshari, Ali Reza; Mojahed, M.; Yusuff, Rosnah Modh. (2010): Simple Additive Weighting Approach to Personnel Selection Problem. In: International Journal of Innovation and Technology Management (1(5):511-515).
- AGEB (2009): Energiebilanzen der Bundesrepublik Deutschland 1990-2007 und Auswertungstabellen 1990-2008. AG Energiebilanzen e.V, DIW Berlin, EEFA, Köln AG.
- Agora Energiewende (2021): Corona-Jahr 2020: Rekordrückgänge bei CO2-Emissionen und Kohleverstromung.
- Albadvi, Amir; Chaharsooghi, S. Kamal; Esfahanipour, Akbar (2007): Decision making in stock trading. An application of PROMETHEE. In: *European Journal of Operational Research* 177 (2), S. 673–683. DOI: 10.1016/j.ejor.2005.11.022.
- Amghizar, Ismaël; Vandewalle, Laurien A.; van Geem, Kevin M.; Marin, Guy
 B. (2017): New Trends in Olefin Production. In: *Engineering* 3 (2), S.
 171–178. DOI: 10.1016/J.ENG.2017.02.006.
- Anand, G.; Kodali, Rambabu (2008): Selection of lean manufacturing systems using the PROMETHEE. In: *Jnl of Modelling in Management* 3 (1), S. 40–70. DOI: 10.1108/17465660810860372.

- Anderson, Kevin; Bows, Alice (2011): Beyond 'dangerous' climate change: emission scenarios for a new world. In: *Philosophical transactions. Series A, Mathematical, physical, and engineering sciences* 369 (1934), S. 20–44. DOI: 10.1098/rsta.2010.0290.
- Araz, Ceyhun; Mizrak Ozfirat, Pinar; Ozkarahan, Irem (2007): An integrated multicriteria decision-making methodology for outsourcing management. In: *Computers & Operations Research* 34 (12), S. 3738– 3756. DOI: 10.1016/j.cor.2006.01.014.
- Auer, Johannes; Bey, Niki; Schäfer, Johannes-Marius (2017): Combined Life Cycle Assessment and Life Cycle Costing in the Eco-Care-Matrix. A case study on the performance of a modernized manufacturing system for glass containers. In: *Journal of Cleaner Production* 141, S. 99–109. DOI: 10.1016/j.jclepro.2016.08.096.
- Ayres, Robert U. (1995): Life cycle analysis. A critique. In: *Resources, Conservation and Recycling* 14 (3-4), S. 199–223. DOI: 10.1016/0921-3449(95)00017-D.
- Bai, Chunguang; Sarkis, Joseph (2010): Green supplier development.
 Analytical evaluation using rough set theory. In: *Journal of Cleaner Production* 18 (12), S. 1200–1210. DOI: 10.1016/j.jclepro.2010.01.016.
- Bai, Chunguang; Sarkis, Joseph (2011): Evaluating supplier development programs with a grey based rough set methodology. In: *Expert Systems with Applications. DOI:* 10.1016/j.eswa.2011.02.137.
- Bansal, Pratima (2005): Evolving sustainably. A longitudinal study of corporate sustainable development. In: *Strat. Mgmt. J.* 26 (3), S. 197– 218. DOI: 10.1002/smj.441.
- Bartusch, Hauke; Fernandez Alcalde, Ana M.; Fröhling, Magnus; Schultmann, Frank; Schwaderer, Frank (2013): Erhöhung der Energieund Ressourceneffizienz und Reduzierung der Treibhausgasemissionen in der Eisen-, Stahl- und Zinkindustrie (ERESTRE): KIT Scientific Publishing (Produktion und Energie).
- BASF (2015): News Release. BASF starts operations at 300,000-metric-ton TDI plant at Ludwigshafen site 17.11.2015.

- BASF (2016): Standort Ludwigshafen 2015 in Zahlen. Online verfügbar unter https://www.basf.com/documents/corp/de/aboutus/publications/reports/2016/LU-in-Zahlen-2015_Infoblatt_A4_DE.pdf.
- BASF (2017a): Chemieunternehmen zieht positive Bilanz. REGIONALE PRESSEMELDUNG 15.03.2017. Online verfügbar unter https://www.basf.com/de/de/company/aboutus/sites/Schwarzheide/Press/Presseinformationen-Schwarzheide/2017/03/PI-08.html.
- BASF (2017b): Konzernlagebericht Produkte und Investitionen BASF Online-Bericht 2016. Online verfügbar unter https://bericht.basf.com/2016/de/konzernlagebericht/segmente/che micals/produkte-und-investitionen.html, zuletzt geprüft am 03.12.2018.
- BASF (2017c): Standort Ludwigshafen 2017 in Zahlen. Online verfügbar unter https://www.basf.com/documents/corp/de/aboutus/publications/reports/2018/LU-in-Zahlen-2017.pdf, zuletzt geprüft am 22.11.2015.
- BASF (2017d): The Heart of the Verbund. Online verfügbar unter https://www.basf.com/de/en/company/aboutus/sites/ludwigshafen/production/the-productionverbund/Steamcracker.html, zuletzt geprüft am 20.11.2018.
- BASF (2017e): Umwelterklärung Daten und Fakten 2017 BASF Schwarzheide GmbH.

BASF (2019): Der Steamcracker. Umwelt. Online verfügbar unter https://www.basf.com/global/de/who-weare/organization/locations/europe/germansites/ludwigshafen/gesellschaftliches-engagement/woran-wirarbeiten/education/angebote-7-13/unterrichtsmaterialien/Steamcracker.html, zuletzt aktualisiert am 25.01.2019, zuletzt geprüft am 25.01.2019.

- Bauer, Christian; Hofer, Johannes; Althaus, Hans-Jörg; Del Duce, Andrea; Simons, Andrew (2015): The environmental performance of current and future passenger vehicles. Life cycle assessment based on a novel scenario analysis framework. In: *Applied Energy* 157, S. 871–883. DOI: 10.1016/j.apenergy.2015.01.019.
- Baum, Heinz-Georg; Albrecht, Thomas; Raffler, Daniel (2007): Umwelt- und Ressourcenschutz als Unternehmensziel. 1. Aufl. s.l.: DUV Deutscher Universitäts-Verlag. Online verfügbar unter http://gbv.eblib.com/patron/FullRecord.aspx?p=747612.
- BAYERNOIL (2014): Bayernoil journal Das Magazin der BAYERNOIL Raffineriegesellschaft mbH (Ausgabe 2/2014).
- BAYERNOIL (2016): Umwelterklärung 2016 der BAYERNOIL Raffineriegesellschaft mbH.
- Beamon, Benita M. (1999): Measuring supply chain performance. In: Int Jrnl of Op & Prod Mnagemnt 19 (3), S. 275–292. DOI: 10.1108/01443579910249714.
- Becker, Hans Paul (2016): Investition und Finanzierung. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden.
- Beckmann, M.; Künzi, H. P.; Wilhelm, J. (1975): Objectives and Multi-Objective Decision Making Under Uncertainty. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg (112).
- Behr, Arno; Agar, David W.; Jörissen, Jakob (2010): Einführung in die Technische Chemie. Heidelberg: Spektrum Akademischer Verlag.
 Online verfügbar unter http://site.ebrary.com/lib/alltitles/docDetail.action?docID=10356129.
- Behr, Arno; Agar, David W.; Jörissen, Jakob; Vorholt, Andreas J. (2016): Einführung in die Technische Chemie. 2. Auflage. Berlin: Springer Spektrum. Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-3-662-52856-3.

- Behzadian, Majid; Kazemzadeh, R. B.; Albadvi, A.; Aghdasi, M. (2010):
 PROMETHEE. A comprehensive literature review on methodologies and applications. In: *European Journal of Operational Research* 200 (1), S. 198–215. DOI: 10.1016/j.ejor.2009.01.021.
- Bello, Sara; Méndez-Trelles, Pedro; Rodil, Eva; Feijoo, Gumersindo; Moreira, Maria Teresa (2020): Towards improving the sustainability of bioplastics. Process modelling and life cycle assessment of two separation routes for 2,5-furandicarboxylic acid. In: *Separation and Purification Technology* 233, S. 116056. DOI: 10.1016/j.seppur.2019.116056.
- Belton, Valerie; Stewart, Theodor J. (2002): Multiple Criteria Decision Analysis. An Integrated Approach. Boston, MA, s.l.: Springer US. Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4615-1495-4.
- Benchaita, T. (2013): Greenhouse Gas Emissions from New Petrochemical Plants. Background Information Paper for the Elaboration of Technical Notes and Guidelines for IDB Projects. Online verfügbar unter https://publications.iadb.org/bitstream/handle/11319/5962/Greenho use%20Gas%20Emissions%20from%20New%20Petrochemical%20Pla nts%20.pdf;sequence=1, zuletzt geprüft am 20.11.2018.
- Bieda, Boguslaw (2012a): Life cycle inventory processes of the ArcelorMittal Poland (AMP) S.A. in Kraków, Poland—basic oxygen furnace steel production. In: *Int J LCA* 17 (4), S. 463–470. DOI: 10.1007/s11367-011-0370-y.
- Bieda, Boguslaw; Skalna, Iwona; Gaweł, Bartłomiej; Grzesik, Katarzyna; Henclik, Anna; Sala, Dariusz (2018): Life cycle inventory processes of the integrated steel plant (ISP) in Krakow, Poland-continuous casting of steel (CCS). A case study. In: *Int J LCA* 23 (6), S. 1274–1285. DOI: 10.1007/s11367-017-1365-0.
- Bieda, Bogusław (2012b): Life cycle inventory processes of the Mittal Steel Poland (MSP) S.A. in Krakow, Poland—blast furnace pig iron production—a case study. In: *Int J LCA* 17 (6), S. 787–794. DOI: 10.1007/s11367-012-0422-y.

- Bieda, Bogusław (2014): Application of stochastic approach based on Monte Carlo (MC) simulation for life cycle inventory (LCI) to the steel process chain: case study. In: *The Science of the total environment* 481, S. 649–655. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2013.10.123.
- Bierer, Annett; Götze, Uwe; Meynerts, Lilly; Sygulla, Ronny (2015): Integrating life cycle costing and life cycle assessment using extended material flow cost accounting. In: *Journal of Cleaner Production* 108, S. 1289–1301. DOI: 10.1016/j.jclepro.2014.08.036.
- Bilec, Melissa; Ries, Robert; Matthews, H. Scott; Sharrard, Aurora L. (2006): Example of a Hybrid Life-Cycle Assessment of Construction Processes. In: J. Infrastruct. Syst. 12 (4), S. 207–215. DOI: 10.1061/(ASCE)1076-0342(2006)12:4(207).
- Bilitewski, Bernd; Härdtle, Georg (2013): Abfallwirtschaft. Handbuch für Praxis und Lehre. 4., aktualisierte und erw. Aufl. Berlin: Springer. Online verfügbar unter http://site.ebrary.com/lib/alltitles/docDetail.action?docID=10695455.
- Blanchard, Benjamin S. (1978): Design and manage to life cycle cost. Portland, Or.: M/A Press.
- Bloech, Jürgen; Bogaschewsky, Ronald; Buscher, Udo; Daub, Anke; Götze, Uwe; Roland, Folker (2014): Einführung in die Produktion. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg.
- Blohm, Hans; Beer, Thomas; Seidenberg, Ulrich; Silber, Herwig (2008): Produktionswirtschaft. Kontrollfragen ; Aufgaben mit Lösungshinweisen. 4., vollst. überarb. Aufl. Herne: Verl. Neue Wirtschafts-Briefe (NWB-Studium-Betriebswirtschaft Lehrbuch). Online verfügbar unter http://deposit.dnb.de/cgibin/dokserv?id=2824173&prov=M&dok_var=1&dok_ext=htm.
- BMBF (2020): Grüner Wasserstoff für klimafreundlichen Stahl. Hg. v. Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF). Online verfügbar unter https://www.bmbf.de/de/gruener-wasserstoff-fuerklimafreundlichen-stahl-12102.html, zuletzt geprüft am 10.11.2020.

- BMLFUW (2010): Leitfaden für das Klima- und Energiekonzept im Rahmen von UVP-Verfahren. Spezialteil Industrieanlagen. Bundesministerium für Land- und Forstwirtschaft, Umwelt und Wasserwirtschaft Österreich (BMLFUW).
- BMU (2017): Jahresbericht über die Altfahrzeug-Verwertungsquoten in Deutschland im Jahr 2017. nach Art. 7 Abs. 2 der Altfahrzeug-Richtlinie 2000/53/EG. Unter Mitarbeit von Umweltbundesamt (UBA). Online verfügbar unter https://www.bmu.de/fileadmin/Daten_BMU/Download_PDF/Abfallwi rtschaft/jahresbericht altfahrzeug 2017 bf.pdf.
- BMU (2018): Klimaschutz in Zahlen. Fakten, Trends und Impulse deutscher Klimapolitik. Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit (BMU).
- BMU (2019a): CO2-Emissionen in Deutschland. Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit (BMU). Online verfügbar unter https://www.bmu.de/fileadmin/Daten_BMU/Download_PDF/Klimasc hutz/pi-thg abbildungen bf.pdf.
- BMU (2019b): Wie klimafreundlich sind Elektroautos? Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit (BMU). Online verfügbar unter https://www.bmu.de/fileadmin/Daten_BMU/Download_PDF/Verkehr /emob_klimabilanz_2017_bf.pdf, zuletzt geprüft am 24.01.2019.
- BMU; UBA; Öko-Institut e.V. (2009): Memorandum Product Carbon Footprint. Positionen zur Erfassung und Kommunikation des Product Carbon Footprint für die internationale Standardisierung und Harmonisierung. Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit (BMU); Umweltbundesamt (UBA); Öko-Institut e.V.
- BMUB (2016): Klimaschutzplan 2050. Klimaschutzpolitische Grundsätze und Ziele der Bundesregierung. Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit (BMUB). 1. Auflage.

- BMWi (2018): Abkommen von Paris. Bundesministerium für Wirtschaft und Energie. Online verfügbar unter https://www.bmwi.de/Redaktion/DE/Artikel/Industrie/klimaschutzabkommen-von-paris.html, zuletzt geprüft am 15.11.2019.
- BMWi (2019): Klimaschutzprogramm 2030. Bundesministerium für Wirtschaft und Energie. Online verfügbar unter https://www.bmwi.de/Redaktion/DE/Artikel/Industrie/klimaschutzpr ogramm-2030.html, zuletzt geprüft am 12.04.2020.
- Bodansky, Daniel (1993): The United Nations Framework Convention on Climate Change: A Commentary. Article 2. In: Yale Journal of International Law (Volume 18).
- Böge, Alfred (2011): Handbuch Maschinenbau. Wiesbaden: Vieweg+Teubner.
- Bornschlegl, M.; Kreitlein, S.; Bregulla, M.; Franke, J. (2015): A Method for Forecasting the Running Costs of Manufacturing Technologies in Automotive Production during the Early Planning Phase. In: *Procedia CIRP* 26, S. 412–417. DOI: 10.1016/j.procir.2014.07.103.
- bp (2008): Financial and Operating Information 2004-2008. Refining and Marketing. BP Europa SE.
- bp Deutschland (2018a): Historie. BP Europa SE. Online verfügbar unter http://www.bp.com/de_de/germany/ueber-bp/aktivitaeten-indeutschland/raffinerie-gelsenkirchen/wer-wir-sind/historie.html.
- bp Deutschland (2018b): Wo wir sind. BP Europa SE. Online verfügbar unter https://www.bp.com/de_de/germany/ueber-bp/aktivitaetenin-deutschland/raffinerie-gelsenkirchen/wo-wir-sind.html, zuletzt geprüft am 20.11.2018.
- bp Deutschland (2018c): Zahlen und Fakten. Online verfügbar unter http://www.bp.com/de_de/germany/ueber-bp/aktivitaeten-indeutschland/raffinerie-gelsenkirchen/wer-wir-sind/zahlen-undfakten.html.

- Bradley, Ryan; Jawahir, I. S.; Badurdeen, Fazleena; Rouch, Keith (2016): A Framework for Material Selection in Multi-Generational Components.
 Sustainable Value Creation for a Circular Economy. In: *Procedia CIRP* 48, S. 370–375. DOI: 10.1016/j.procir.2016.03.247.
- Brans, J. P. (1982): L'ingénierie de la decision. Elaboration d'instruments d'aide à la décision. Méthode PROMETHEE. Québec, Canada:
 Konferenzbeitrag präsentiert auf der L'aide à la Décision: Nature, Instruments et Perspectives d'avenir.
- Brans, J. P.; Vincke, Ph. (1985): Note—A Preference Ranking Organisation Method. In: *Management Science* 31 (6), S. 647–656. DOI: 10.1287/mnsc.31.6.647.
- Brans, J. P.; Vincke, Ph.; Mareschal, B. (1986): How to select and how to rank projects. The Promethee method. In: *European Journal of Operational Research* 24 (2), S. 228–238. DOI: 10.1016/0377-2217(86)90044-5.
- Bratzel, S. (2013): AutomotiveSustainability 2013: Umwelttrends der globalen Automobilhersteller in der Produktion. Transparenz, Umwelttrends und strategische Ziele im Vergleich von 13 globalen Automobilherstellern im betrieblichen Umweltschutz. Hg. v. Center of Automotive Management (CAM).
- Bretzke, Wolf-Rüdiger; Barkawi, Karim (2012): Nachhaltige Logistik. Antworten auf eine globale Herausforderung. 2. Aufl. 2012. Berlin, Heidelberg: Springer. Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-29370-2.
- Breun, Patrick (2016): Ein Ansatz zur Bewertung klimapolitischer
 Instrumente am Beispiel der Metallerzeugung und -verarbeitung.
 Dissertation. Karlsruher Institut für Technologie (KIT); Karlsruher
 Institut für Technologie, Karlsruhe. Online verfügbar unter http://nbn-resolving.de/urn:nbn:de:0072-527140.
- BSW (2016): Umwelterklärung 2016. Badische Stahlwerke GmbH. Online verfügbar unter http://www.bat-kehl.de/bsw-dewAssets/docs/umweltschutz/16-0394_BSW_Umwelterklaerung_2016-DE_web-aktuell.pdf.

- Buchner, Hanno; Laner, David; Rechberger, Helmut; Fellner, Johann (2015): Future Raw Material Supply. Opportunities and Limits of Aluminium Recycling in Austria. In: J. Sustain. Metall. 1 (4), S. 253–262. DOI: 10.1007/s40831-015-0027-3.
- Buekens, Alfons; Zhou, Xujian (2014): Recycling plastics from automotive shredder residues. A review. In: *J Mater Cycles Waste Manag* 16 (3), S. 398–414. DOI: 10.1007/s10163-014-0244-z.
- Bundesministerium der Justiz und für Verbraucherschutz (2012): Gesetz zur Förderung der Kreislaufwirtschaft und Sicherung der umweltverträglichen Bewirtschaftung von Abfällen (Kreislaufwirtschaftsgesetz - KrWG). KrWG.
- Bundesnetzagentur Deutschland (2018): Kraftwerksliste 2018.
- Bundesregierung (2020): Grundlage für CO2-Preis steht. Hg. v. Die Bundesregierung. Online verfügbar unter https://www.bundesregierung.de/bregde/themen/klimaschutz/nationaler-emissionshandel-1684508, zuletzt geprüft am 21.10.2020.
- Burchart-Karol, Dorota (2011): Significance of environmental life cycle assessment (LCA) method in the iron and steel industry. In: *Metalurgija*.
- Burchart-Korol, Dorota (2013): Life cycle assessment of steel production in Poland. A case study. In: *Journal of Cleaner Production* 54, S. 235–243. DOI: 10.1016/j.jclepro.2013.04.031.
- Burghausen (2018): Industriegebiet Nord Zukunft des Industrie-Standorts. Online verfügbar unter https://www.burghausen.com/index.php?id=98, zuletzt geprüft am 20.11.2018.
- Burschel, Carlo; Losen, Dirk; Wiendl, Andreas (2004): Betriebswirtschaftslehre der Nachhaltigen Unternehmung. München: Oldenbourg (Lehr- und Handbücher zur ökologischen Unternehmensführung und Umweltökonomie). Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1524/9783486700435.

- Buttermann, Hans. G.; Hillebrand, Bernhard (2005): Die Bedeutung von Stahl- Werkstoffen als "Rohstoff" für die Wirtschaftsstruktur in Deutschland. EEFA -Energy Environment Forecast Analysis GmbH. Forschungsbericht.
- Büttner, J.; Mackenroth, W.; Hermann, H.; Konieczny, P.; Gebauer, J. (2005): Patent Herstellung DNT - WO2005075407A1. Online verfügbar unter https://patents.google.com/patent/WO2005075407A1/de?q=Herstell ung&q=Dinitrotoluol&scholar&oq=Herstellung+Dinitrotoluol, zuletzt geprüft am 21.11.2018.
- Cai, Haiyong; Krzywicki, Andrzej; Oballa, Michael C. (2002): Coke formation in steam crackers for ethylene production. In: *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* 41 (3), S. 199–214. DOI: 10.1016/S0255-2701(01)00135-0.
- CalEPA (2004): Estimation of average lifetime vehicle miles of travel. Online verfügbar unter https://ww3.arb.ca.gov/regact/grnhsgas/vmt.pdf, zuletzt geprüft am 03.09.2020.
- CAM (2020): Electromobility Report 2020. Analysis of Market and Innovation Trends in International Core Markets.
- Canals, Lluc; Martinez-Laserna, Egoitz; Amante García, Beatriz; Nieto, Nerea (2016): Sustainability analysis of the electric vehicle use in Europe for CO2 emissions reduction. In: *Journal of Cleaner Production* 127, S. 425–437. DOI: 10.1016/j.jclepro.2016.03.120.
- Carlowitz, Hans Carl von; Irmer, Klaus; Grober, Ulrich (2000): Sylvicultura oeconomica. Anweisung zur wilden Baum-Zucht. Reprint der Ausg. Leipzig, Braun, 1713. Freiberg: TU Bergakademie (Veröffentlichungen der Bibliothek "Georgius Agricola" der Technischen Universität Bergakademie Freiberg, 135).
- CATI; AMZ (2019): Elektromobilitätsstrategien der Automobilhersteller. Hg. v. Chemnitz Automotive Institute - CATI (TU Chemnitz) und Automobilzuliefernetzwerk AMZ. Online verfügbar unter https://www.tu-chemnitz.de/tu/pressestelle/aktuell/9291.

- CEFIC (2008): An allocation method for petrochemicals. Ad hoc Group Energy, Feedstock & Logistics. Hg. v. The European Chemical Industry Council.
- CEFIC (2019): Propylene: Nameplate capactiy, production, consumption in EU15 + Norway. Unter Mitarbeit von PetroChemicalsEurope. Hg. v. The European Chemical Industry Council. Online verfügbar unter https://www.petrochemistry.eu/aboutpetrochemistry/petrochemicals-facts-and-figures/european-marketoverview/.

Ceresana Market Research (2014): Marktstudie Propylen (2. Auflage). Online verfügbar unter https://www.ceresana.com/de/marktstudien/chemikalien/propylen/ propylen-markt-anteil-kapazitaet-angebot-nachfrage-prognoseinnovation-anwendung-wachstum-produktion-industrie.html, zuletzt geprüft am 20.11.2018.

Cerri, D.; Taisch, M.; Terzi, S. (2013): Multi-objective Optimization of Product Life-Cycle Costs and Environmental Impacts. In: In: Emmanouilidis C., Taisch M., Kiritsis D. (eds) Advances in Production Management Systems. Competitive Manufacturing for Innovative Products and Services. APMS 2012. IFIP Advances in Information and Communication Technology, vol 397. Springer, Berlin, Heidelberg.

CES (2016): CES EduPack Granta Design.

- Chaabane, Amin; Ramudhin, Amar; Paquet, Marc (2011): Designing supply chains with sustainability considerations. In: *Production Planning & Control* 22 (8), S. 727–741. DOI: 10.1080/09537287.2010.543554.
- Chakrabarty, Arijit (2017): The Hadamard product and the free convolutions. In: *Statistics & Probability Letters* 127, S. 150–157. DOI: 10.1016/j.spl.2017.04.009.
- Chang, Yu-Hern; Yeh, Chung-Hsing (2001): Evaluating airline
 competitiveness using multiattribute decision making. In: Omega 29 (5), S. 405–415. DOI: 10.1016/S0305-0483(01)00032-9.

- Chappin, Emile J.L.; Ligtvoet, Andreas (2014): Transition and transformation. A bibliometric analysis of two scientific networks researching socio-technical change. In: *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 30, S. 715–723. DOI: 10.1016/j.rser.2013.11.013.
- Chasek, Pamela S. (2006): Handbuch globale Umweltpolitik. Berlin: Parthas-Verl.
- Chatterjee, Prasenjit; Chakraborty, Shankar (2014): Investigating the Effect of Normalization Norms in Flexible Manufacturing Sytem Se-lection Using Multi - Criteria Decision - Making Methods. In: *JESTR* 7 (3), S. 141–150. DOI: 10.25103/jestr.073.23.
- Cheah, Lynette W. (2010): Cars on a Diet: The Material and Energy Impacts of Passenger Vehicle Weight Reduction in the U.S.
- ChemCoastPark Brunsbüttel (2018a): Unternehmen. Online verfügbar unter https://www.chemcoastpark.de/de/unternehmen/#sasolgermany, zuletzt geprüft am 22.11.2018.
- ChemCoastPark Brunsbüttel (2018b): Unternehmen. Covestro Deutschland - Gebündelte Kompetenz. Online verfügbar unter https://www.chemcoastpark.de/de/unternehmen/, zuletzt geprüft am 23.11.2018.
- CHEMCologne (2018): Erfolgsfaktor für die Region Verbundproduktion. Online verfügbar unter https://www.chemcologne.de/investieren-imrheinland/verbundproduktion.html, zuletzt geprüft am 23.11.2018.
- Chemie Technik (2016): Erfolgreicher Turnaround in Traditions-Chemiewerk (Heft Juni). Online verfügbar unter https://www.chemietechnik.de/erfolgreicher-turnaround-intraditions-chemiewerk/.
- CHEMPARK (2016): Bilanz des CHEMPARK Dormagen für 2015. 271 Millionen Euro Investitionen stärken Standort, zuletzt aktualisiert am 06.04.2016, zuletzt geprüft am 22.11.2016.

- CHEMPARK (2017): Chempark Dormagen. Zahlen und Fakten. Online verfügbar unter https://www.chempark.de/de/chemparkdormagen.html, zuletzt aktualisiert am 31.12.2017, zuletzt geprüft am 20.11.2018.
- Chen, Qianqian; Lv, Min; Wang, Danfeng; Tang, Zhiyong; Wei, Wei; Sun, Yuhan (2017): Eco-efficiency assessment for global warming potential of ethylene production processes. A case study of China. In: *Journal of Cleaner Production* 142, S. 3109–3116. DOI: 10.1016/j.jclepro.2016.10.156.
- Chhipi-Shrestha, Gyan Kumar; Hewage, Kasun; Sadiq, Rehan (2015): 'Socializing' sustainability. A critical review on current development status of social life cycle impact assessment method. In: *Clean Techn Environ Policy* 17 (3), S. 579–596. DOI: 10.1007/s10098-014-0841-5.
- Chien, J. M.; McKinstry, K. C.; Baek C.; Horvath, A.; Dornfeld, D. (2012): Multi-objective Analysis on Joining Technologies. In: *In: Dornfeld D., Linke B. (eds) Leveraging Technology for a Sustainable World. Springer, Berlin, Heidelberg.*
- Chou, Shuo-Yan; Chang, Yao-Hui; Shen, Chun-Ying (2008): A fuzzy simple additive weighting system under group decision-making for facility location selection with objective/subjective attributes. In: *European Journal of Operational Research* 189 (1), S. 132–145. DOI: 10.1016/j.ejor.2007.05.006.
- Chu Hui, Ooi; Mohammed, Abdul Hakim (2015): The Role of Cost Breakdown Structure in Life Cycle Cost Model. In: *Jurnal Teknologi* 74 (2). DOI: 10.11113/jt.v74.4531.
- Ciacci, Luca; Eckelman, Matthew J.; Passarini, Fabrizio; Chen, Wei-Qiang; Vassura, Ivano; Morselli, Luciano (2014): Historical evolution of greenhouse gas emissions from aluminum production at a country level. In: *Journal of Cleaner Production* 84, S. 540–549. DOI: 10.1016/j.jclepro.2014.03.062.
- Clayden, Jonathan; Greeves, Nick; Warren, Stuart G. (2012): Organic chemistry. Second edition. Oxford: Oxford University Press.

- Clift, Roland (2003): Metrics for supply chain sustainability. In: *Clean Technologies and Environmental Policy* 5 (3-4), S. 240–247. DOI: 10.1007/s10098-003-0220-0.
- Clift, Roland; Wright, Lucy (2000): Relationships Between Environmental Impacts and Added Value Along the Supply Chain. In: *Technological Forecasting and Social Change* 65 (3), S. 281–295. DOI: 10.1016/S0040-1625(99)00055-4.
- Coello Coello, Carlos A.; van Veldhuizen, David A.; Lamont, Gary B. (2002): Evolutionary algorithms for solving multi-objective problems. New York, NY: Kluwer Acad./Plenum Publ (Genetic algorithms and evolutionary computation, 5).
- Coenenberg, Adolf Gerhard; Fischer, Thomas M.; Günther, Thomas (2016): Kostenrechnung und Kostenanalyse. 9., überarbeitete Auflage. Stuttgart: Schäffer Poeschel. Online verfügbar unter http://search.ebscohost.com/login.aspx?direct=true&scope=site&db= nlebk&AN=1214580.
- Colsman, Bernhard (2016): Nachhaltigkeitscontrolling. Strategien, Ziele, Umsetzung. 2. Auflage. Wiesbaden: Springer Gabler. Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-3-658-09437-9.
- Commerzbank (2014): Metallerzeugung und -bearbeitung. Branchenbericht - Corporate Sector Report.
- Corsten, Hans; Roth, Stefan (2012): Nachhaltigkeit. Wiesbaden: Gabler Verlag.
- Covestro Deutschland AG (2018a): Hochwertige Materialien aus Brunsbüttel und vom Niederrhein. Hilfreich im täglichen Leben. Online verfügbar unter https://www.covestro.de/de/products-andservices/overview, zuletzt geprüft am 22.11.2018.
- Covestro Deutschland AG (2018b): Nördlichster Produktionsstandort von Covestro. Kreuzfahrtschiffe und ein Schornstein als Kunstwerk. Online verfügbar unter https://www.covestro.de/de/sites/brunsbuettel/overview.

- Covestro Deutschland AG (2018c): Zahlen und Fakten. An vier Standorten arbeiten rund 6.200 Menschen - Schwerpunkt Rheinschiene. Online verfügbar unter https://www.covestro.de/de/company/facts-andfigures, zuletzt geprüft am 22.11.2018.
- Dağdeviren, Metin (2008): Decision making in equipment selection. An integrated approach with AHP and PROMETHEE. In: *J Intell Manuf* 19 (4), S. 397–406. DOI: 10.1007/s10845-008-0091-7.
- Dai, Jing; Blackhurst, Jennifer (2012): A four-phase AHP–QFD approach for supplier assessment. A sustainability perspective. In: *International Journal of Production Research* 50 (19), S. 5474–5490. DOI: 10.1080/00207543.2011.639396.
- Das, Sujit (2011): Life cycle assessment of carbon fiber-reinforced polymer composites. In: *Int J LCA* 16 (3), S. 268–282. DOI: 10.1007/s11367-011-0264-z.
- DAT GmbH; VDA; VDIK (2016): Leitfaden über den Kraftstoffverbrauch, die CO2-Emissionen und den Stromverbrauch. Hg. v. Deutsche Automobil Treuhand GmbH (DAT), Verband der Automobilindustrie und Verband der internationalen Kraftfahrzeughersteller e.V.
- DEHSt (2019): Emissionshandelspflichtige Anlagen in Deutschland 2018. Hg. v. Deutsche Emissionshandelsstelle. Umweltbundesamt (UBA). Online verfügbar unter https://www.dehst.de/SharedDocs/downloads/DE/anlagenlisten/201 8.pdf?__blob=publicationFile&v=2, zuletzt geprüft am 30.06.2020.
- Delogu, M.; Zanchi, L.; Dattilo, C. A.; Ierides, M. (2018): Parameters Affecting the Sustainability Trade-off between Production and Use Stages in the Automotive Lightweight Design. In: *Procedia CIRP* 69, S. 534–539. DOI: 10.1016/j.procir.2017.12.063.
- Denkena, Berend; Schürmeyer, Jan; Eikötter, Mark (2010): Berücksichtigung temporärer Effekte von Lebenszykluskosten in der Technologiebewertung. In: ZWF 105 (11), S. 959–963. DOI: 10.3139/104.110426.

- Deutscher Bundestag (2019): Verbot von Verbrennungsmotoren. Dokumentation. Online verfügbar unter https://www.bundestag.de/resource/blob/651454/e949b6b43bd9b5 ac738510e556e611e6/WD-8-048-19-pdf-data.pdf, zuletzt geprüft am 16.10.2020.
- Dienhart, Matthias (2003): Ganzheitliche Bilanzierung der Energiebereitstellung für die Aluminiumherstellung (Dissertation).
- DIN CEN ISO/TS 14067:2013, 2014: Treibhausgase Carbon Footprint von Produkten – Anforderungen an und Leitlinien für Quantifizierung und Kommunikation.
- DIN EN ISO 14051:2011, 2011: Umweltmanagement -Materialflusskostenrechnung - Allgemeine Rahmenbedingungen (ISO 14051:2011); Deutsche und Englische Fassung EN ISO 14051:2011.
- DIN EN ISO 14044:2006: Umweltmanagement Ökobilanz Anforderungen und Anleitungen (ISO 14044:2006); Deutsche und Englische Fassung EN ISO 14044:2006.
- DIN EN ISO 14040:2006, 2006: Umweltmanagement –Ökobilanz Grundsätze und Rahmenbedingungen - Environmental management life cycle assessment - principles and framework.
- DIN EN ISO 14001:2015, 2015: Umweltmanagementsysteme -Anforderungen mit Anleitung zur Anwendung (ISO 14001:2015).
- DIN EN 60300-3-3, 2014-09: Zuverlässigkeitsmanagement- Teil 3.3: Anwendungsleitfaden - Lebenszykluskosten (IEC 56/1549/CD:2014).
- Doege, Eckart; Behrens, Bernd-Arno (2018): Handbuch Umformtechnik. Grundlagen, Technologien, Maschinen. 3., überarbeitete Auflage. Berlin: Springer Vieweg (VDI-Buch). Online verfügbar unter http://www.springer.com/de/book/9783662438909.
- Domininghaus, Hans; Elsner, Peter; Eyerer, Peter; Hirth, Thomas (Hg.) (2012): Kunststoffe. Eigenschaften und Anwendungen. 8., neu bearb. und erw. Aufl. Berlin, Heidelberg: Springer (VDI-Buch). Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-16173-5.

- Dou, Yijie; Zhu, Qinghua; Sarkis, Joseph (2014): Evaluating green supplier development programs with a grey-analytical network process-based methodology. In: *European Journal of Operational Research* 233 (2), S. 420–431. DOI: 10.1016/j.ejor.2013.03.004.
- Doukas, Haris; Patlitzianas, Konstantinos D.; Psarras, John (2006): Supporting sustainable electricity technologies in Greece using MCDM. In: *Resources Policy* 31 (2), S. 129–136. DOI: 10.1016/j.resourpol.2006.09.003.
- DOW (2015): Daten und Fakten. Dow in Mitteldeutschland. Online verfügbar unter https://de.dow.com/dede/standorte/mitteldeutschland, zuletzt geprüft am 04.05.2020.
- Ducker (2015): Anteile der bei der Produktion eines Pkws verwendeten Materialien im Jahr 2015. Statista. Online verfügbar unter https://de.statista.com/statistik/daten/studie/658683/umfrage/verw endete-materialien-in-der-automobilproduktion/, zuletzt geprüft am 30.01.2019.
- Dyckhoff, Harald (1992): Betriebliche produktion. Theoretische grundlagen einer umweltorientierten produktionswirtschaft. [Place of publication not identified]: Springer.
- Dyckhoff, Harald; Souren, Rainer (2008): Nachhaltige Unternehmensführung. Grundzüge industriellen Umweltmanagements ; mit 13 Tabellen. Berlin: Springer (Springer-Lehrbuch). Online verfügbar unter http://deposit.d-nb.de/cgibin/dokserv?id=2984786&prov=M&dok_var=1&dok_ext=htm.
- Dyckhoff, Harald; Spengler, Thomas Stefan (2010): Produktionswirtschaft. Eine Einführung. 3., überarb. und erw. Aufl. Berlin: Springer (Springer-Lehrbuch). Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-13684-9.
- Dyllick, Thomas; Hockerts, Kai (2002): Beyond the business case for corporate sustainability. In: *Bus. Strat. Env.* 11 (2), S. 130–141. DOI: 10.1002/bse.323.

- Eberle, Reinhard (2000): Methodik zur ganzheitlichen Bilanzierung im Automobilbau. Zugl.: Berlin, Techn. Univ., Diss., 2000. TU, Univ.-Bibliothek, Abt. Publ, Berlin.
- Eberle, Reinhard; Franze, Harald A. (1998): Modelling the Use Phase of Passenger Cars in LCI. In:. Total Life Cycle Conference & Exposition, NOV. 30, 1998: SAE International400 Commonwealth Drive, Warrendale, PA, United States (SAE Technical Paper Series).
- Ecoinvent (2019): Organisation. Ecoinvent is a not-for-profit association founded by several institutes of the ETH Domain and by Agroscope. Online verfügbar unter https://www.ecoinvent.org/about/organisation/organisation.html, zuletzt geprüft am 18.11.2019.
- Ecoinvent V2.2 (2007-2013): Ecoinvent. Version V2.2: Swiss Federal Institute of Technology Zurich (ETH Zurich); EPF Lausanne; Paul Scherrer Institute (PSI); the Swiss Federal Laboratories for Materials Science and Technology (Empa); Agroscope, Institute for Sustainability Sciences. Online verfügbar unter https://www.ecoinvent.org/database/older-versions/ecoinventversion-2/ecoinvent-version-2.html.
- Ecoinvent V3 (2017): Ecoinvent. Version V3.4: Swiss Federal Institute of Technology Zurich (ETH Zurich); EPF Lausanne; Paul Scherrer Institute (PSI); the Swiss Federal Laboratories for Materials Science and Technology (Empa); Agroscope, Institute for Sustainability Sciences. Online verfügbar unter https://www.ecoinvent.org/database/olderversions/ecoinvent-34/new-data-in-ecoinvent-34/new-data-inecoinvent-34.html.
- EEA (2007-2016): European Pollutant Release and Transfer Register.
 Facility level. Member States reporting under Article 7 of Regulation (EC) No 166/2006. Hg. v. European Environment Agency. Online verfügbar unter https://prtr.eea.europa.eu/#/facilitylevels.

- EEA (2017): GHG Inventory EU 15-01-2017. DEU_2017_2015_11012017_101416.xlsx. Hg. v. European Environment Agency. Online verfügbar unter http://cdr.eionet.europa.eu/de/eu/mmr/art07_inventory/ghg_invent ory/envwhvj6g/index_html?&page=2, zuletzt geprüft am 13.02.2019.
- EEA (2018): CO2 emission intensity. Electricity generation CO2 emission intensity European Union. Hg. v. European Environment Agency. Copenhagen. Online verfügbar unter https://www.eea.europa.eu/data-and-maps/daviz/co2-emissionintensity-5/download.table, zuletzt geprüft am 23.05.2020.
- EEA (2020): EEA greenhouse gas data reviewer. Hg. v. European Environment Agency. Online verfügbar unter https://www.eea.europa.eu/data-and-maps/data/dataviewers/greenhouse-gases-viewer, zuletzt geprüft am 24.07.2020.
- Egede, Patricia (2017): Environmental Assessment of Lightweight Electric Vehicles. Cham: Springer International Publishing.
- Ehrenberger, S.; Schmid, S.; Knöfel, S.; Schüler-Hainsch, E. (2013):
 Recycling, Life-Cycle-Assessment und Rohstoffverfügbarkeit. In: Horst
 E. Friedrich (Hg.): Leichtbau in der Fahrzeugtechnik. Wiesbaden, s.l.:
 Springer Fachmedien Wiesbaden (ATZ / MTZ-Fachbuch).
- Elkington, John (1998): Cannibals with forks. The triple bottom line of 21st century business. Gabriola Island, BC, Stony Creek, CT: New Society Publishers (Conscientious commerce).
- EMBER (2020): Tracking the European Union Emissions Trading System carbon market price day-by-day. Online verfügbar unter https://ember-climate.org/data/carbon-price-viewer/, zuletzt geprüft am 21.10.2020.
- Enquete-Kommission (1994): Schutz des Menschen und der Umwelt. Die Industriegesellschaft gestalten - Perspekiven für einen nachhaltigen Umgang mit Stoff- und Materialströmen.
- Enquete-Kommission (1998): "Konzept Nachhaltigkeit: Vom Leitbild zur Umsetzung. Abschlussbericht der Enquete-Kommission "Schutz des Menschen und der Umwelt-Ziele und Rahmenbedingungen einer nachhaltig zukunftsverträglichen Entwicklung".". In "Schutz des Menschen und der Umwelt" des 13. Deutschen Bun-destages, edited by Deutscher Bundestag. Bonn.
- Enviros Consulting (2006): EU ETS Phase II new entrant benchmarks: Petrochemicals. Online verfügbar unter http://ebooks.lib.ntu.edu.tw/1_file/moeaidb/013215/23_%E7%9F%B 3%E5%8C%96%E7%94%A2%E5%93%81.pdf.
- EU (2000): Richtlinie 2000/53/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 18. September 2000 über Altfahrzeuge - Erklärung der Kommission.
- EU (2006a): Verordnung (EG) Nr. 166/2006 des Europäischen Parlaments und des Rates über die Schaffung eines Europäischen Schadstofffreisetzungs- und -verbringungsregisters undzur Änderung der Richtlinien 91/689/EWG und 96/61/EG des Rates. Verordnung (EG) Nr.166/2006.
- EU (2006b): Verordnung (EG) Nr. 1893/2006 Des Europäischen Parlaments und des Rates. Zur Aufstellung der statistischen Systematik der Wirtschaftszweige NACE Revision 2 und zur Änderung der Verordnung (EWG) Nr. 3037/90 des Rates sowie einiger Verordnungen der EG über bestimmte Bereiche der Statistik.
- EU (2009): Verordnung (EG) Nr. 443/2009 des Europäischen Parlaments und des Rates vom 23. April 2009 zur Festsetzung von Emissionsnormen für neue Personenkraftwagen im Rahmen des Gesamtkonzepts der Gemeinschaft zur Verringerung der CO2-Emissionen von Personenkraftwagen und leichten Nutzfahrzeugen.
- Euro Chlor (2010): Energy consumption data of chlor-alkali plants in the EU-27 and EFTA countries.
- Euro Chlor (2011): Euro Chlor position on energy consumption in chloralkali production.

- Euro Chlor (2015): Chlorine Industry Review 2014-2015. Maintaining Momentum in Uncertain Times.
- Europäische Kommission (2020): Speech by President von der Leyen at the Climate Ambition Summit. Online verfügbar unter https://ec.europa.eu/commission/presscorner/detail/en/speech_20_ 2403, zuletzt geprüft am 06.01.2021.
- European Aluminium (2013): Environmental Profile Report for the European Aluminium Industry Data for the year 2010. Life-Cycle inventory data for aluminium production and transformation processes in Europe. Brussels. Online verfügbar unter https://european-aluminium.eu/media/1329/environmental-profilereport-for-the-european-aluminium-industry.pdf, zuletzt geprüft am 13.05.2020.
- European Commission (2001): Reference Document on Best Available Techniques in the Ferrous Metals Processing Industry.
- European Commission (2003): Integrated Pollution Prevention and Control (IPPC) Reference Document on Best Available Techniques in the Large Volume Organic Chemical Industry.
- European Commission (2010): ILCD handbook. General guide for life cycle assessment : detailed guidance. Luxembourg: Publications Office of the European Union (Scientific and technical research series, EUR 24708).
- European Commission (2013): Best available techniques (BAT) reference document for iron and steel production. Industrial emissions directive 2010/75/EU (integrated pollution prevention and control). Luxembourg: Publications Office of the European Union (Scientific and technical research series, 25521). Online verfügbar unter http://bookshop.europa.eu/en/best-available-techniques-batreference-document-for-iron-and-steel-production-pbLFNA25521/.
- European Commission (2014a): Best available techniques (BAT) reference document for the non-ferrous metals industries. Industrial Emissions Directive 2010/75/EU (integrated pollution prevention and control): Final Draft. Luxembourg: Publications Office of the European Union.

- European Commission (2014b): Best Available Techniques Reference Document for the Production of Chlor-alkali. JRC Science and Policy Reports. Industrial Emissions Directive 2010/75/EU (Integrated Pollution Prevention and Control).
- European Commission (2017a): Best available techniques (BAT) reference document for the non-ferrous metals industries. Industrial Emissions Directive 2010/75/EU (integrated pollution prevention and control). Luxembourg: Publications Office of the European Union (EUR, Scientific and technical research series, 28648). Online verfügbar unter https://eippcb.jrc.ec.europa.eu/sites/default/files/2020-01/JRC107041_NFM_bref2017.pdf.
- European Commission (2017b): Best Available Techniques (BAT) Reference Document in the Large Volume Organic Chemical Industry. Final Draft.
- European Commission (2020a): European Clean Hydrogen Alliance. Hg. v. Europäische Kommission. Online verfügbar unter https://ec.europa.eu/growth/industry/policy/european-cleanhydrogen-alliance_en, zuletzt geprüft am 07.09.2020.
- European Commission (2020b): Green Deal: Kommission legt Strategien für das Energiesystem der Zukunft und sauberen Wasserstoff vor. Hg. v. Europäische Kommission. Online verfügbar unter https://ec.europa.eu/germany/news/20200708wasserstoffstrategie_de.
- Europur (2015): Flexible Polyurethane (PU) Foam. Eco-profiles and Environmental Product Declarations of the European Plastics Manufacturers.
- Evonik Industries AG (2018): Der Leitgedanke Poolbetrieb Münchsmünster. Online verfügbar unter https://history.evonik.com/sites/geschichte/de/gesellschaften/skwtrostberg/muenchsmuenster/.

- Falagas, Matthew E.; Pitsouni, Eleni I.; Malietzis, George A.; Pappas, Georgios (2008): Comparison of PubMed, Scopus, Web of Science, and Google Scholar: strengths and weaknesses. In: FASEB journal : official publication of the Federation of American Societies for Experimental Biology 22 (2), S. 338–342. DOI: 10.1096/fj.07-9492LSF.
- Farjana, Shahjadi Hisan; Huda, Nazmul; Mahmud, M. A. Parvez (2019): Impacts of aluminum production. A cradle to gate investigation using life-cycle assessment. In: *The Science of the total environment* 663, S. 958–970. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2019.01.400.
- Faßbender-Wynands, Ellen (2002): Umweltorientierte
 Lebenszyklusrechnung. Instrument zur Unterstützung des
 Umweltkostenmanagements. Gabler Edition Wissenschaft.
 Wiesbaden: Deutscher Universitätsverlag. Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-3-322-81401-2.
- Feldmann, Klaus; Schöppner, Volker; Spur, Günter (Hg.) (2014): Handbuch Fügen, Handhaben, Montieren. 2., vollständig neu bearbeitete Auflage. München: Hanser (Edition Handbuch der Fertigungstechnik, / hrsg. von Günter Spur; 5).
- Feng, Kuishuang; Chapagain, Ashok; Suh, Sangwon; Pfister, Stephan; Hubacek, Klaus (2011): COMPARISON OF BOTTOM-UP AND TOP-DOWN APPROACHES TO CALCULATING THE WATER FOOTPRINTS OF NATIONS. In: *Economic Systems Research* 23 (4), S. 371–385. DOI: 10.1080/09535314.2011.638276.
- Feralpi Stahl (2015): Aktualisierte Umwelterklärung 2014. Hg. v. ESF Elbe-Stahlwerke Feralpi GmbH. Online verfügbar unter https://www.feralpigroup.com/wpcontent/uploads/2015/09/aktualisierte_umwelterklaerung_2014_fina l_2.pdf.
- DIN 8580, 2003-09: Fertigungsverfahren Begriffe, Einteilung.
- DIN 8582, 2003-09: Fertigungsverfahren Umformen.
- Fet, Annik Magerholm (1998): Environmental management tools and their application a review with reference to case studies. In: 2nd international conference on technology policy and innovation.

Figueira, José; Ehrogott, Matthias; Greco, Salvatore (2005): Multiple Criteria Decision Analysis: State of the Art Surveys. New York, NY: Springer Science + Business Media Inc (International series in operations research & management science, 78). Online verfügbar unter

http://site.ebrary.com/lib/alltitles/docDetail.action?docID=10129381.

- Fischer, Ulrich (2008): Tabellenbuch Metall. 44., neu bearb. Aufl. Haan-Gruiten: Verl. Europa-Lehrmittel (Europa-Fachbuchreihe für Metallberufe).
- Fitch, Peder E.; Smith Cooper, Joyce (2004): Life Cycle Energy Analysis as a Method for Material Selection. In: *Journal of Mechanical Design* 126 (5), S. 798–804. DOI: 10.1115/1.1767821.
- Fleiter, Tobias; Schlomann, Barbara; Eichhammer, Wolfgang (Hg.) (2013):
 Energieverbrauch und CO2-Emissionen industrieller
 Prozesstechnologien. Einsparpotenziale, Hemmnisse und Instrumente.
 Fraunhofer-Institut für Systemtechnik und Innovationsforschung.
 Stuttgart: Fraunhofer-Verl. (ISI-Schriftenreihe
 "Innovationspotenziale"). Online verfügbar unter
 http://publica.fraunhofer.de/dokumente/N-234719.html.
- Fonseca, Ana Sofia; Nunes, Maria Isabel; Matos, Manuel Arlindo; Gomes, Ana Paula (2013): Environmental impacts of end-of-life vehicles' management. Recovery versus elimination. In: *Int J LCA* 18 (7), S. 1374–1385. DOI: 10.1007/s11367-013-0585-1.
- Fraunhofer IPA; e-mobil BW; ifW; DLR (2012): Leichtbau in Mobilität und Fertigung. Chancen für Baden-Württemberg. Hg. v. Landesagentur für Elektromobilität und Brennstoffzellentechnologie Baden-Württemberg (e-mobil BW), Fraunhofer Institut für Produktionstechnik und Automatisierung (IPA), Universität Stuttgart und Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V. (DLR).
- French, Simon; Maule, John; Papamichail, Nadia (2009): Decision Behaviour, Analysis and Support. Cambridge: Cambridge University Press.

- Friedrich, Horst E. (Hg.) (2013): Leichtbau in der Fahrzeugtechnik. Wiesbaden, s.l.: Springer Fachmedien Wiesbaden (ATZ / MTZ-Fachbuch). Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-3-8348-2110-2.
- Fritz, Alfred Herbert; Schulze, Günter (Hg.) (2015): Fertigungstechnik. 11., neu bearbeitete und ergänzte Auflage. Berlin, Heidelberg: Springer Vieweg (Springer-Lehrbuch). Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-3-662-46555-4.
- Fröhling, M.; Bartusch, H.; Schwaderer, F.; Schultmann, F. (2009): An intercompany Approach to improve Resource and Energy Efficiency and reduce Greenhouse Gas Emissions in Metal Industries by linking Flow Sheet Models. In: *World of metallurgy - Erzmetall*.
- Fuchs, Stephan (2014): Verfahren zur parameterbasierten Gewichtsabschätzung neuer Fahrzeugkonzepte.
- Gabler (2013): Gabler Wirtschafts Lexikon: Springer Verlag.
- Gantar, Gašper; Glojek, Andrej; Mori, Mitja; Nardin, Blaž; Sekavčnik, Mihael (2013): Resource Efficient Injection Moulding with Low Environmental Impacts. In: *SV-JME* 59 (3), S. 193–200. DOI: 10.5545/svjme.2012.661.
- Gara, Stefan; Schrimpf, Sabine (1998): Behandlung von Reststoffen und Abfällen in der Eisen- und Stahlindustrie. Online verfügbar unter https://www.umweltbundesamt.at/fileadmin/site/publikationen/M09 2.pdf, zuletzt geprüft am 08.07.2020.
- GDA (2018): Produktion von Hüttenaluminium und Recyclingaluminium weltweit. Hg. v. Gesamtverband der Aluminiumindustrie e.V. Online verfügbar unter http://www.aluinfo.de/produktion-weltweit.html.
- GDA (2020): Weltweite Aluminiumproduktion. Hg. v. Gesamtverband der Aluminiumindustrie e.V. Online verfügbar unter http://www.aluinfo.de/produktion-weltweit.html, zuletzt geprüft am 24.07.2020.

- Gebeshuber, Andreas; Aigner, Martin; Müller, Thomas (2020): A comparison of plasma an gas nitriding processes from an environmental point of view. Hg. v. Rübig Group.
- Geldermann, Jutta; Lerche, Nils (2014): Leitfaden zur Anwendung von Methoden der multikriteriellen Entscheidungsunterstützung. Methode: Promethee.
- Geldermann, Jutta; Rentz, Otto (2001): Entwicklung eines multikriteriellen Entscheidungsunterstützungssystems zur integrierten
 Technikbewertung. In: Fleischmann B., Lasch R., Derigs U., Domschke W., Rieder U. (eds) Operations Research Proceedings (vol 2000).
- Geldermann, Jutta; Rentz, Otto (2005): Multi-criteria Analysis for Technique Assessment. Case Study from Industrial Coating. In: Journal of Industrial Ecology 9 (3), S. 127–142. DOI: 10.1162/1088198054821591.
- Geldermann, Jutta; Spengler, Thomas; Rentz, Otto (2000): Fuzzy outranking for environmental assessment. Case study. Iron and steel making industry. In: *Fuzzy Sets and Systems* 115 (1), S. 45–65. DOI: 10.1016/S0165-0114(99)00021-4.
- Geldermann, Jutta; Zhang, Kejing; Rentz, Otto (2003): Sensitivitätsanalysen für das Outranking-Verfahren PROMETHEE. In: Habenicht, Walter; Scheubrein, Beate; Scheubrein, Ralph (Hrsg.). Multi-Criteria- und Fuzzy-Systeme in Theorie und Praxis.
- Georgii, Hans-Otto (2009): Stochastik. Einführung in die Wahrscheinlichkeitstheorie und Statistik. 4., überarb. und erw. Aufl. Berlin: de Gruyter (De-Gruyter-Lehrbuch). Online verfügbar unter http://www.referenceglobal.com/doi/book/10.1515/9783110215274.
- Gerspacher, Andreas; Arens, Marlene; Eichhammer, Wolfgang (2011): Zukunftsmarkt Energieeffiziente Stahlherstellung.
- GHG Protocol (2004): The Greenhouse Gas Protocol. A Corporate Accounting and Reporting Standard, zuletzt geprüft am 29.04.2020.

- GHG Protocol (2013): Corporate Value Chain (Scope 3) Accounting and Reporting Standard. Supplement to the GHG Protocol Corporate Accounting and Reporting Standard, zuletzt geprüft am 29.04.2020.
- Gielen, Dolf; Moriguchi, Yuichi (2002): CO2 in the iron and steel industry. An analysis of Japanese emission reduction potentials. In: *Energy Policy* 30 (10), S. 849–863. DOI: 10.1016/S0301-4215(01)00143-4.
- Global Carbon Project (2019): Entwicklung des weltweiten CO2-Ausstoßes in den Jahren 1995 bis 2018. Hg. v. Global Carbon Project. Online verfügbar unter http://www.globalcarbonatlas.org/en/CO2emissions, zuletzt geprüft am 15.10.2020.
- GlobalData (2019): Global Propylene Capacity and Capital Expenditure Outlook, 2019 – China and India to Lead Globally in Terms of Propylene Capacity Additions. Hg. v. GlobalData. Online verfügbar unter https://store.globaldata.com/report/gdch0059mar--globalpropylene-capacity-and-capital-expenditure-outlook-2019-china-andindia-to-lead-globally-in-terms-of-propylene-capacity-additions/.
- Göhler, Georg; Schmaus, Claudio; Klingler, Anna-Lena (2019): Netzbelastung und Netzdienstleistungen durch Elektrofahrzeuge. Hg. v. Universität Stuttgart. Online verfügbar unter https://elib.unistuttgart.de/bitstream/11682/10624/3/2019_G%c3%b6hler_Netzbela stungen_und_Netzdienstleistungen_durch%20Elektrofahrzeuge.pdf.
- Gonzalez-Garay, Andres; Guillen-Gosalbez, Gonzalo (2018): SUSCAPE. A framework for the optimal design of SUStainable ChemicAl ProcEsses incorporating data envelopment analysis. In: *Chemical Engineering Research and Design* 137, S. 246–264. DOI: 10.1016/j.cherd.2018.07.009.
- Götze, Uwe; Bloech, Jürgen (2002): Investitionsrechnung. Modelle und Analysen zur Beurteilung von Investitionsvorhaben. Dritte, verbesserte und erweiterte Auflage. Berlin, Heidelberg, s.l.: Springer Berlin Heidelberg (Springer-Lehrbuch). Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-3-662-08019-1.

- Graedel, Thomas E.; Saxton, Elizabeth (2002): Improving the overall environmental performance of existing telecommunications facilities. In: *Int J LCA* 7 (4), S. 219–224. DOI: 10.1007/BF02978876.
- Greco, Salvatore; Ehrgott, Matthias; Figueira, José Rui (Hg.) (2016):
 Multiple criteria decision analysis. State of the art surveys. Second edition. New York, Heidelberg, Dordrecht, London: Springer (International series in operations research & management science, 233). Online verfügbar unter http://ebooks.ciando.com/book/index.cfm/bok_id/1990015.
- Gruden, Dušan (2008): Umweltschutz in der Automobilindustrie. Motor, Kraftstoffe, Recycling. Wiesbaden: Vieweg +Teubner / GWV Fachverlage GmbH Wiesbaden (ATZ / MTZ-Fachbuch). Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-3-8348-9526-4.
- Grunwald, Armin; Kopfmüller, Jürgen (2012): Nachhaltigkeit. 2., aktualisierte Auflage. 2. aktualisierte Auflage Auflage. Frankfurt, New York: Campus (Campus »Studium«). Online verfügbar unter http://www.contentselect.com/index.php?id=bib view&ean=9783593412795.
- Guinée, Jeroen B.; Heijungs, Reinout; Huppes, Gjalt; Zamagni, Alessandra; Masoni, Paolo; Buonamici, Roberto et al. (2011): Life cycle assessment: past, present, and future. In: *Environmental science & technology* 45 (1), S. 90–96. DOI: 10.1021/es101316v.
- Guinée, Jeroen B.; Heijungs, Reinout; Udo de Haes, Helias A.; Huppes, Gjalt (1993): Quantitative life cycle assessment of products. In: *Journal of Cleaner Production* 1 (2), S. 81–91. DOI: 10.1016/0959-6526(93)90046-E.
- Günther, Edeltraud (2008): Ökologieorientiertes Management. Um-(weltorientiert) Denken in der BWL ; mit 104 Tabellen. 1. Aufl. Stuttgart: Lucius und Lucius (Eine Lange Publikation, 8383). Online verfügbar unter http://www.utb-studi-e-book.de/9783838583839.

- Günther, T.; Günther, E.; Hoppe, H. (Hrsg.) (2005): Entwicklung eines Entscheidungsmodells zur Anwendung von Umweltkostenrechnungssystemen: Aktuelle Entwicklungen und Anwendungsbereiche. Dresdner Beiträge zur Lehre der Betrieblichen Umweltökonomie. Dresden.
- Günther, T.; Kriegbaum, C. (1999): Life Cycle Costing. Ein Instrument zur Unterstützung der ökologieorientierten Kostenrechnung. In: *In: Baum, H.G./Coenenberg, A.G/Günther, E. (Hrsg.): Betriebliche Umweltökonomie in Fällen. Band I: Anwendung betriebswirtschaftlicher Instrumente. München, Wien S.231-266.*
- Gunvor Raffinerie Ingolstadt (2016): Aktualisierte Umwelterklärung 2016.
- Gunvor Raffinerie Ingolstadt (2017): Pressmeldung: TÜV-Revision in der Gunvor Raffinerie (Nr. 1 / 13.02.2017).
- Gunvor Raffinerie Ingolstadt (2018): 50 Jahre Raffinerie Ingolstadt. Wärme und Mobilität mit Perspektive! Die Geschichte der Raffinerie Ingolstadt.
- Gupta, S.; D. A. Tirpak; N. Burger; J. Gupta; N. Höhne; A. I. Boncheva et al. (Hg.) (2007): Policies, Instruments and Co-operative Arrangements. Unter Mitarbeit von B. Metz, O.R. Davidson, P.R. Bosch, R. Dave, L.A. Meyer (eds). Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA (Climate Change 2007: Mitigation. Contribution of Working Group III to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change).
- Hakamada, Masataka; Furuta, Tetsuharu; Chino, Yasumasa; Chen, Youqing; Kusuda, Hiromu; Mabuchi, Mamoru (2007): Life cycle inventory study on magnesium alloy substitution in vehicles. In: *Energy* 32 (8), S. 1352–1360. DOI: 10.1016/j.energy.2006.10.020.
- Han, Qing-lan; Gao, Lan; Figueira, M.; Guo, Z. (2016): Comprehensive Evaluation of Car-Body Light-Weighting Scheme Based on LCC Theory. In: *MATEC Web Conf.* 81 (8), S. 8004. DOI: 10.1051/matecconf/20168108004.

- Hannouf, Marwa; Assefa, Getachew (2017): Life Cycle Sustainability
 Assessment for Sustainability Improvements. A Case Study of HighDensity Polyethylene Production in Alberta, Canada. In: Sustainability
 9 (12), S. 2332. DOI: 10.3390/su9122332.
- Haralambopoulos, D. A.; Polatidis, H. (2003): Renewable energy projects. Structuring a multi-criteria group decision-making framework. In: *Renewable Energy* 28 (6), S. 961–973. DOI: 10.1016/S0960-1481(02)00072-1.
- Hardwick, Alexander Patrick; Outteridge, Tim (2016): Vehicle lightweighting through the use of molybdenum-bearing advanced high-strength steels (AHSS). In: *Int J LCA* 21 (11), S. 1616–1623. DOI: 10.1007/s11367-015-0967-7.
- Hartley, Janet L.; Choi, Thomas Y. (1996): Supplier development. Customers as a catalyst of process change. In: *Business Horizons* 39 (4), S. 37–44. DOI: 10.1016/S0007-6813(96)90050-6.

Hauff, Michael von (2012): Nachhaltige Entwicklung – Begründung und Anforderungen des neuen Leitbildes. In: Online Akademie. Online verfügbar unter https://fes-onlineakademie.de/fileadmin/Inhalte/01_Themen/03_Nachhaltigkeit/doku mente/FES_OA_Leitbild_nachhalt._Entwicklung.pdf.

Hauff, Michael von; Kleine, Alexandro (2009): Nachhaltige Entwicklung. Grundlagen und Umsetzung. München: de Gruyter. Online verfügbar unter

http://www.degruyter.com/search?f_0=isbnissn&q_0=978348685094 9&searchTitles=true.

- HBEFA (2014): Handbuch für Emissionsfaktoren des Strassenverkehrs. HBEFA 3.2.
- Heijungs, Reinout (1994): A generic method for the identification of options for cleaner products. In: *Ecological Economics* 10 (1), S. 69–81.
 DOI: 10.1016/0921-8009(94)90038-8.

- Heijungs, Reinout; Guinée, J. B. (Hg.) (1992): Environmental life cycle assessment of products. [study carried out under the auspices of the National Reuse of Waste Research Programme (NOH)].
 Rijksuniversiteit Leiden; Nederlandse Organisatie voor Toegepast-Natuurwetenschappelijk Onderzoek. Leiden: Centrum voor Milieukunde (NOH report).
- Heisel, Uwe (2014): Handbuch Spanen. 2., vollst. neu bearb. Aufl. München: Hanser (Ed. Handbuch der Fertigungstechnik). Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.3139/9783446436992.
- Helms, H.; Pehnt, M.; Lambrecht, U.; Liebich, A. (2010): Electric vehicle and plug-in hybrid energy efficiency and life cycle emissions. In: *18th International Symposium Transport and Air Pollution*.
- Helms, Hinrich; Lambrecht, Udo (2007): The Potential Contribution of Light-Weighting to Reduce Transport Energy Consumption. In: *The International Journal of Life Cycle Assessment*.
- Hendrickson, C. T.; Horvath, A.; Joshi, S.; Klausner, M.; Lave, L. B.;
 McMichael, F. C. (1997): Comparing two life cycle assessment approaches: a process model vs. economic input-output-based assessment. In: 1997 IEEE International Symposium on Electronics and the Environment. ISEE-1997. San Francisco, CA, USA, 5-7 May 1997, S. 176–181.
- Hertig, Elke (2004): Niederschlags- und Temperaturabschätzungen für den Mittelmeerraum unter anthropogen verstärktem Treibhauseffekt, zuletzt geprüft am 15.01.2019.
- Hillier, Frederick S.; Figueira, JosÉ; Greco, Salvatore; Ehrogott, Matthias (2005): Multiple Criteria Decision Analysis: State of the Art Surveys. New York, NY: Springer New York (78).
- Hochfeld, Ch.; Jenseits, W. (1998): Allokation in Ökobilanzen und bei der Berechnung des Kumulierten Energieaufwandes (KEA). Arbeitspapier im Rahmen des UBAF& E-Vorhabens Nr. 104 01 123.
- Holborn Refinery (2018): Holborn Refinery Our operations. Online verfügbar unter http://www.oilinvest.com/en/what-we-do/ouroperations/holborn-refinery, zuletzt geprüft am 20.11.2018.

- Holleman, Arnold F.; Wiberg, Egon; Wiberg, Nils (2007): Lehrbuch der anorganischen Chemie. 102., stark umgearb. u. verb. Aufl. Berlin: de Gruyter. Online verfügbar unter http://www.referenceglobal.com/action/showBook?doi=10.1515/9783110177701.
- Huang, Xiaoyan; Wang, Zhongjie; Liu, Ying; Hu, Wentao; Ni, Wen (2016):
 On the use of blast furnace slag and steel slag in the preparation of green artificial reef concrete. In: *Construction and Building Materials* 112, S. 241–246. DOI: 10.1016/j.conbuildmat.2016.02.088.
- Huang, Zhijia; Ding, Xiao; Sun, Hao; Liu, Siyue (2010): Identification of main influencing factors of life cycle CO2 emissions from the integrated steelworks using sensitivity analysis. In: *Journal of Cleaner Production* 18 (10-11), S. 1052–1058. DOI: 10.1016/j.jclepro.2010.02.010.
- Huber, Joseph (2001): Allgemeine UmweltSoziologie. Wiesbaden: VS Verlag für Sozialwissenschaften. Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-3-322-80398-6.
- Hur, Tak; Lee, Jiyong; Ryu, Jiyeon; Kwon, Eunsun (2005): Simplified LCA and matrix methods in identifying the environmental aspects of a product system. In: *Journal of environmental management* 75 (3), S. 229–237. DOI: 10.1016/j.jenvman.2004.11.014.
- Hustede, R. (2018): Gute Landung für Koloss von Knielingen. Online verfügbar unter https://bnn.de/lokales/karlsruhe/gute-landung-fuerkoloss-von-knielingen, zuletzt geprüft am 20.11.2018.
- Hüthig GmbH (2018a): Chemie Technik Fachinformationen für Entscheider - Industrieparks Chemie, Pharma, Biotech. Port of Rotterdam (Havenbedrijf Rotterdam). Online verfügbar unter https://marktuebersichten.chemietechnik.de/mu-industrieparkschemie-pharma-biotech/2603/port-of-rotterdam-havenbedrijfrotterdam/detail, zuletzt geprüft am 23.11.2018.
- Hüthig GmbH (2018b): PLASTVERARBEITER Das Portal für den Kunststoffverarbeiter. Online verfügbar unter https://marktuebersichten.plastverarbeiter.de/mu-industrieparkschemie-pharma-biotech/2599/bayer-industriepark-brunsbuttel/detail, zuletzt geprüft am 22.11.2018.

- Hwang, Ching-Lai; Masud, Abu Syed Md (1979): Multiple Objective Decision Making - Methods and Applications. A State-of-the-Art Survey. Berlin, Heidelberg: Springer (Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems, 164). Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-45511-7.
- Hwang, Ching-Lai; Yoon, Kwangsun (1981): Multiple Attribute Decision Making. Methods and Applications A State-of-the-Art Survey. Berlin, Heidelberg: Springer (Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems, 186). Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-48318-9.
- ICCT (2016): Kraftstoffverbrauch und CO2-Emissionen neuer PKW in der EU - Prüfstand versus Realität. Hg. v. The international council on clean transportation. Online verfügbar unter http://www.theicct.org/sites/default/files/FactSheet_FromLabToRoad _ICCT_2016_DE.pdf.
- IEA (2007): Tracking Industrial Energy Efficiency and CO2 Emissions. International Energy Agency.
- IEA (2009): Chemical and Petrochemical Sector Potential of best practice technology and other measures for improving energy efficiency. International Energy Agency.
- IEA (2020): Data and statistics. Explore energy data by category, indicator, country or region. Hg. v. International Energy Agency. Online verfügbar unter https://www.iea.org/data-and-statistics/datatables/?country=NORWAY&energy=Electricity&year=2019.
- IFA (2012): Gestis-Stoffdatenbank Wasser. Hg. v. Institut f
 ür Arbeitsschutz der Deutschen Gesetzlichen Unfallversicherung (IFA), zuletzt gepr
 üft am 2016.
- IFA (2013): Gestis-Stoffdatenbank Ammoniak (wasserfrei). Hg. v. Institut für Arbeitsschutz der Deutschen Gesetzlichen Unfallversicherung (IFA), zuletzt geprüft am 2015.
- IFA (2015): Gestis-Stoffdatenbank Stickstoff. Hg. v. Institut für Arbeitsschutz der Deutschen Gesetzlichen Unfallversicherung (IFA).

- IFA (2016): Gestis-Stoffdatenbank Benzol. Hg. v. Institut für Arbeitsschutz der Deutschen Gesetzlichen Unfallversicherung (IFA).
- IKA (2014): Abschlussbericht: CO2-Emissionsreduktion bei Pkw und leichten Nutzfahrzeugen nach 2020. Institut f
 ür Kraftfahrzeuge der RWTH Aachen.
- Ilsen, Rebecca (2012): Ein Beitrag zur modellgestützten Analyse umweltpolitischer Instrumente in den Bereichen Luftreinhaltung und Klimawandel. Zugl.: Karlsruhe,KIT, Diss., 2011. Hannover, Karlsruhe: Technische Informationsbibliothek u. Universitätsbibliothek; KIT Scientific Publishing. Online verfügbar unter https://edocs.tib.eu/files/e01fn13/688759653.pdf.
- Industriepark Schwedt (2018): Industrie- und Energiestandort mit Zukunft. Online verfügbar unter http://www.ipsdt.de/, zuletzt geprüft am 20.11.2018.

INEOS Köln GmbH (2007): INEOS Unternehmensbroschüre.

- IPCC (2001): Climate Change 2001. The Scientific Basis. Contribution of the Working Group I to the Third Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC).
- IPCC (Hg.) (2007a): Climate change 2007. The physical science basis ; contribution of Working Group I to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change. Unter Mitarbeit von Susan Solomon. IPCC. 1st published. New York: UNEP. Online verfügbar unter http://www.loc.gov/catdir/enhancements/fy0806/2007282362
 - d.html.
- IPCC (2007b): Climate change 2007. The Physical Science Basis: Contribution of Working Group I to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change. Cambridge: Cambridge University Press. Online verfügbar unter https://www.ipcc.ch/site/assets/uploads/2018/05/ar4_wg1_full_repo rt-1.pdf.

- IPCC (2007c): Summary for Policymakers. Contribution of Working Group I to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change. In: *Climate Change 2007: The Physical Science Basis*.
- IPCC (2010): Understanding climate change: 22 years of IPCC assessment. Intergovernmental Panel on Climate Change.
- IPCC (Hg.) (2013): Climate change 2013. The physical science basis ; summary for policymakers, a report of Working Group I of the IPCC, technical summary, a report accepted by Working Group I of the IPCC but not approved in detail and frequently asked questions ; part of the Working Group I contribution to the fifth assessment report of the Intergovernmental Panel on Climate Change. Unter Mitarbeit von Stocker, T.F., D. Qin, G.-K. Plattner, M. Tignor, S.K. Allen, J. Boschung, A. Nauels, Y. Xia, V. Bex and P.M. Midgley. Intergovernmental Panel on Climate Change. New York: Intergovernmental Panel on Climate Change. Online verfügbar unter http://www.ipcc.ch/.
- IPCC (2018): Global Warming of 1.5°C, Summary for Policymakers. Intergovernmental Panel on Climate Change.
- Jaeger, Carlo C.; Jaeger, Julia (2010): Warum zwei Grad. In: *APuZ* (32-33), S. 7–15.
- Jahn, Alexandra (2018): Reduced probability of ice-free summers for 1.5 °C compared to 2 °C warming. In: *Nature Clim Change* 8 (5), S. 409–413. DOI: 10.1038/s41558-018-0127-8.
- Jochem, Eberhard; Schön, Michael; Angerer, Gerhard; Ball, Michael; Bradke, Harald; Celik, Birgül et al. (2004): Werkstoffeffizienz: Einsparpotenziale bei Herstellung und Verwendung energieintensiver Grundstoffe. Forschungsbericht.
- Kádárová, Jaroslava; Kobulnický, Ján; Teplicka, Katarína (2015): Product Life Cycle Costing. In: *AMM* 816, S. 547–554. DOI: 10.4028/www.scientific.net/AMM.816.547.
- Kadziński, Miłosz; Tervonen, Tommi; Tomczyk, Michał K.; Dekker, Rommert (2017): Evaluation of multi-objective optimization approaches for solving green supply chain design problems. In: *Omega* 68, S. 168– 184. DOI: 10.1016/j.omega.2016.07.003.

- Kaiser, W. (2015): Kunststoffchemie für Ingenieure. München: Carl Hanser Verlag GmbH & Co. KG.
- Kaiser, Wolfgang (2016): Kunststoffchemie für Ingenieure. Von der Synthese bis zur Anwendung. 4., neu bearbeitete und erweiterte Auflage. München: Hanser. Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.3139/9783446447745.
- Kanchanapiya, Premrudee; Limphitakphong, Nantamol; Pharino, Chanathip; Chavalparit, Orathai (2015): Evaluation of greenhouse gas emissions and reduction from the petrochemical industry in Thailand. In: Greenhouse Gas Measurement and Management 4 (2-4), S. 161– 177. DOI: 10.1080/20430779.2015.1008362.
- Karakoyun, F.; Kiritsis, D. (2014): Closed-loop lifecycle management of automotive components. Holistic life cycle approach as decision support system. In: *Matériaux & Techniques* 102 (6-7), S. 606. DOI: 10.1051/mattech/2014045.
- Ke, Wenwei; Zhang, Shaojun; He, Xiaoyi; Wu, Ye; Hao, Jiming (2017): Wellto-wheels energy consumption and emissions of electric vehicles. Mid-term implications from real-world features and air pollution control progress. In: *Applied Energy* 188, S. 367–377. DOI: 10.1016/j.apenergy.2016.12.011.
- Keller, Florian; Lee, Roh Pin; Meyer, Bernd (2020): Life cycle assessment of global warming potential, resource depletion and acidification potential of fossil, renewable and secondary feedstock for olefin production in Germany. In: *Journal of Cleaner Production* 250, S. 119484. DOI: 10.1016/j.jclepro.2019.119484.
- Kicherer, Andreas; Schaltegger, Stefan; Tschochohei, Heinrich; Pozo, Beatriz Ferreira (2007): Eco-efficiency. In: Int J Life Cycle Assess 12 (7), S. 537–543. DOI: 10.1065/lca2007.01.305.

- Kikuchi, Yasunori; Oshita, Yuko; Mayumi, Kazuya; Hirao, Masahiko (2017): Greenhouse gas emissions and socioeconomic effects of biomassderived products based on structural path and life cycle analyses. A case study of polyethylene and polypropylene in Japan. In: *Journal of Cleaner Production* 167, S. 289–305. DOI: 10.1016/j.jclepro.2017.08.179.
- Kim, Hyung Chul; Keoleian, Gregory A.; Grande, Darby E.; Bean, James C. (2003): Life cycle optimization of automobile replacement. Model and application. In: *Environmental science & technology* 37 (23), S. 5407– 5413. DOI: 10.1021/es0345221.
- Kim, I. Y.; Weck, O. L. de (2005): Adaptive weighted-sum method for biobjective optimization. Pareto front generation. In: *Struct Multidisc Optim* 29 (2), S. 149–158. DOI: 10.1007/s00158-004-0465-1.
- Kindler, H.; Nikles, A. (1980): Energieaufwand zur Herstellung von Werkstoffen - Berechnungsgrundsätze und Energieäquivalentzwerte von Kunststoffen. Kunststoffe.
- Kleindorfer, Paul R.; Singhal, Kalyan; Wassenhove, Luk N. (2005): Sustainable Operations Management. In: *Production and Operations Management* 14 (4), S. 482–492. DOI: 10.1111/j.1937-5956.2005.tb00235.x.
- Klemp, Dieter; Mihelcic, Djuro; Mittermaier, Bernhard (2012): Messung und Bewertung von Verkehrsemissionen. Jülich: Forschungszentrum Jülich (Schriften des Forschungszentrums Jülich Reihe Energie & Umwelt, Bd. 21). Online verfügbar unter http://hdl.handle.net/2128/4612.
- Klöpffer, W. (2008): Outlook. Role of Environmental Life Cycle Costing in Sustainability Assessment. In: In: Hunkeler, D./Lichtenvort, K./Rebitzer, G. (Hrsg.): Environmental Life Cycle Costing.
- Klöpffer, Walter; Grahl, Birgit (2009): Ökobilanz (LCA). Ein Leitfaden für Ausbildung und Beruf. Weinheim: WILEY-VCH. Online verfügbar unter http://lib.myilibrary.com?id=213988.

- Klöpffer, Walter; Renner, Isa (2008): Life-Cycle Based Sustainability
 Assessment of Products. In: Stefan Schaltegger, Martin Bennett, Roger
 L. Burritt und Christine Jasch (Hg.): Environmental Management
 Accounting for Cleaner Production, Bd. 24. Dordrecht: Springer
 Netherlands (Eco-Efficiency in Industry and Science), S. 91–102.
- Klöpffer, Walter; Wagner, Burkhard O. (2007): Atmospheric degradation of organic substances. Data for persistence and long-range transport potential. Weinheim, Chichester: John Wiley distributor. Online verfügbar unter

http://site.ebrary.com/lib/alltitles/docDetail.action?docID=10302340.

- Kndungu, Peter; Molavi, Jeffrey M. (2014): A Hybrid LCA Approach to Quantify the Environmental Impacts during Construction. In: *IJIRSET* 03 (10), S. 16402–16413. DOI: 10.15680/IJIRSET.2014.0310002.
- Koffler, Christoph (2014): Life cycle assessment of automotive lightweighting through polymers under US boundary conditions. In: Int J LCA 19 (3), S. 538–545. DOI: 10.1007/s11367-013-0652-7.
- Koffler, Christoph; Rohde-Brandenburger, Klaus (2010): On the calculation of fuel savings through lightweight design in automotive life cycle assessments. In: *Int J LCA* 15 (1), S. 128–135. DOI: 10.1007/s11367-009-0127-z.
- Kokubu, Katsuhiko; Campos, M.K.S.; Furukawa, Y.; Tachikawa, H. (2009): Material flow cost accounting with ISO 14051. In: *ISO Management Systems*.
- Koottungal, L. (2015): International Survey of Ethylene From Steam Crackers - 2015. In: *Oil & Gas Journal*.
- Koplin, Julia (2006): Nachhaltigkeit im Beschaffungsmanagement. 1. Aufl. s.l.: DUV Deutscher Universitäts-Verlag. Online verfügbar unter http://gbv.eblib.com/patron/FullRecord.aspx?p=749796.
- Kornelíusdóttir, Anna Margrét (2014): A cradle-to-gate life cycle assessment of primary aluminium production at Norðurál.

- Koski, J. (1988): Multicriteria Truss Optimization: Springer, Bosten (Stadler, Wolfram (Hrsg.) Multicriteria Optimization in Engineering and in the Sciences. Mathematical Concepts and Methods in Science and Engineering., 37).
- Kovács, Viktória Barbara; Kiss, László (2016): Comparative Analysis of the Environmental Impacts of Aluminum Smelting Technologies. In: Margaret Hyland (Hg.): Light Metals 2015. Cham and s.l.: Springer International Publishing, S. 529–534.

Kraftfahrtbundesamt (2015): Durchschnittliches Leergewicht von neu zugelassenen Personenkraftwagen in Deutschland im Jahr 2015 nach Segmenten (in Kilogramm). Hg. v. Statista. Kraftfahrtbundesamt Flensburg. Online verfügbar unter https://de.statista.com/statistik/daten/studie/239565/umfrage/leerg ewicht-von-pkw-neuzulassungen-in-deutschland-nach-segmenten/, zuletzt geprüft am 23.01.2017.

- Kraftfahrtbundesamt (2016): Bestand an Personenkraftwagen am 1. Januar 2016 gegenüber 1. Januar 2015 (Zulassungen ab 1990).
- Kraftfahrtbundesamt (2019): Fahrzeugzulassungen (FZ). Neuzulassungen von Kraftfahrzeugen nach Umwelt-Merkmalen Jahr 2019.
- Kramer, Matthias (2010): Integratives Umweltmanagement. Systemorientierte Zusammenhänge zwischen Politik, Recht, Management und Technik. Wiesbaden: Gabler Verlag / Springer Fachmedien Wiesbaden GmbH Wiesbaden. Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-3-8349-8602-3.
- Kranert, Martin; Cord-Landwehr, Klaus (Hg.) (2010): Einführung in die Abfallwirtschaft. Mit 131 Tabellen. 4., vollst. aktualisierte und erw. Aufl. Wiesbaden: Vieweg + Teubner. Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-3-8348-9681-0.
- Krause, Daniel R.; Vachon, Stephan; Klassen, Robert D. (2009): Special Topic Forum on Sustainable Supply Chain Management: Introduction and Reflections on the Role of Purchasing Management. In: Journal of Supply Chain Management.

- Kropp, Ariane (2019): Grundlagen der Nachhaltigen Entwicklung. Handlungsmöglichkeiten und Strategien zur Umsetzung. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden (essentials). Online verfügbar unter https://doi.org/10.1007/978-3-658-23072-2.
- Kullbach, Werner (1980): Mengenberechnungen in der Chemie. Grundlagen und Praxis. Weinheim: Verl. Chemie.
- Kuo, Tsai; Lee, Yile (2019): Using Pareto Optimization to Support Supply Chain Network Design within Environmental Footprint Impact Assessment. In: *Sustainability* 11 (2), S. 452. DOI: 10.3390/su11020452.
- Kurati (2019): Coke prevention during steam cracking for ethylene production. Online verfügbar unter https://www.kurita.eu/en/coke-inhibition-in-cracking-processes, zuletzt geprüft am 21.03.2019.
- Lang-Koetz, C.; Springer, S.; Beucker, S. (2006): Life Cycle e-Valuation -Produkt, Service, System. Stuttgart: Fraunhofer IRB.
- Laplace, Pierre-Simon de (1812): Théorie analytique des probabilités.
- Latscha, Hans Peter; Kazmaier, Uli; Klein, Helmut (2016): Organische Chemie. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg.
- Lechner, M. D.; Gehrke, K.; Nordmeier, E. H. (2003): Makromolekulare Chemie. Ein Lehrbuch für Chemiker, Physiker, Materialwissenschaftler und Verfahrenstechniker. 3. überarbeitete und erweiterte Auflage. Basel, s.l.: Birkhäuser Basel. Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-3-0348-5094-0.
- Lei, L.; Bao, X. (2014): The forecast of propylene market supply pattern in China. In: *Chem. Ind.* (32 (8), 19-21,28).
- Leimkühler, Hans-Joachim (2010): Managing CO2 Emissions in the Chemical Industry. Weinheim, Germany: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.
- Leontief, Wassily (1986): Input-output economics. 2nd ed. New York: Oxford University Press. Online verfügbar unter http://search.ebscohost.com/login.aspx?direct=true&scope=site&db= nlebk&db=nlabk&AN=151058.

- Leontief, Wassily W. (1936): Quantitative Input and Output Relations in the Economic Systems of the United States. In: *The Review of Economics and Statistics* 18 (3), S. 105. DOI: 10.2307/1927837.
- Li, Li; Lei, Yalin; Pan, Dongyang (2016): Study of CO2 emissions in China's iron and steel industry based on economic input–output life cycle assessment. In: *Nat Hazards* 81 (2), S. 957–970. DOI: 10.1007/s11069-015-2114-y.
- Lindner, F.; Schmitt, R. (2015): Goal-oriented Life Cycle Investigations for Composite Manufacturing Chains. In: *Procedia CIRP* 29, S. 438–443. DOI: 10.1016/j.procir.2015.02.043.
- Liu, Gang; Müller, Daniel B. (2012): Addressing sustainability in the aluminum industry. A critical review of life cycle assessments. In: *Journal of Cleaner Production* 35, S. 108–117. DOI: 10.1016/j.jclepro.2012.05.030.
- Loew, Thomas; Ankele, Kathrin; Braun, Sabine; Clausen, Jens (2004): Bedeutung der internationalen CSR-Diskussion für Nachhaltigkeit und die sich daraus ergebenden Anforderungen an Unternehmen mit Fokus Berichterstattung: Endbericht: Future e.V. Online verfügbar unter https://www.upj.de/fileadmin/user_upload/MAINdateien/Themen/Einfuehrung/ioew_csr_diskussion_2004.pdf, zuletzt geprüft am 10.11.2019.
- Loken, E. (2007): Use of multicriteria decision analysis methods for energy planning problems. In: *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 11 (7), S. 1584–1595. DOI: 10.1016/j.rser.2005.11.005.
- Lorenz, W.; Muenning, J.; Pennemann, B.; Pohl, F.; Wiechers, G. (2006): DE102006033722A1 - Verfahren zur Herstellung von Dinitrotoluol -Google Patents. Online verfügbar unter https://patents.google.com/patent/DE102006033722A1/de?q=Herste llung&q=Dinitrotoluol&scholar&oq=Herstellung+Dinitrotoluol, zuletzt geprüft am 21.11.2018.
- Lübbers, Peter (2012): Berechnung von Produktionsindizes für das verarbeitende Gewerbe. In: *Statistische Monatshefte Rheinland-Pfalz* (07/2012).

- Lubes Schmierstoff GmbH (2018): Umformöle. Korrosionsschutzöle. Online verfügbar unter www.tigrol.net/produkte/industryperformance/umformoele-korrosionsschutzoele, zuletzt geprüft am 26.05.2018.
- Luo, Zheng; Soria, Antonio (2008): Prospective Study of the World Aluminium Industry.
- Lynondellbasell (2017): Nachbar Weltkonzern. In Wesseling stimmt die Chemie. Online verfügbar unter https://www.lyondellbasell.com/globalassets/lyb-around-theworld/plant-sites/eai/wesseling/german/lyondellbasell_corporatebrochure.pdf?id=19868, zuletzt geprüft am 20.11.2018.
- Ma, Fangwu; Zhao, Ying; Pu, Yongfeng; Li, Jinhang (2018): A
 Comprehensive Multi-Criteria Decision Making Model for Sustainable
 Material Selection Considering Life Cycle Assessment Method. In: *IEEE* Access 6, S. 58338–58354. DOI: 10.1109/ACCESS.2018.2875038.
- Markl-Hummel, Lioba; Geldermann, Jutta (2014): A local-level, multiple criteria decision aid for climate protection. In: *EURO J Decis Process* 2 (1-2), S. 121–152. DOI: 10.1007/s40070-013-0011-8.
- Marler, R. T.; Arora, J. S. (2004): Survey of multi-objective optimization methods for engineering. In: *Structural and Multidisciplinary Optimization* 26 (6), S. 369–395. DOI: 10.1007/s00158-003-0368-6.
- Martens, Hans; Goldmann, Daniel (2016): Recyclingtechnik. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden.
- Mayyas, Ahmad T.; Qattawi, Ala; Mayyas, Abdel Raouf; Omar, Mohammed A. (2012): Life cycle assessment-based selection for a sustainable lightweight body-in-white design. In: *Energy* 39 (1), S. 412–425. DOI: 10.1016/j.energy.2011.12.033.
- McKinsey (2006): Kosten und Potenziale der Vermeidung von Treibhausgasemissionen in Deutschland. Sektorenperspektive Industrie.

- McKinsey (2009): Roads toward a low-carbon future- Reducing CO2 emissions from passenger vehicles in the global road transportation system.
- Meadows, Donella H. (1974): The limits to growth. A report for the Club of Rome's Project on the Predicament of Mankind. 2. ed. New York: Universe Books. Online verfügbar unter http://www.donellameadows.org/wp-content/userfiles/Limits-to-Growth-digital-scan-version.pdf.

 Mellerowicz, Konrad (2011): Allgemeine Betriebswirtschaftslehre. 8th ed. Berlin/Boston: De Gruyter Inc (Sammlung Göschen Ser, v.1153).
 Online verfügbar unter https://ebookcentral.proquest.com/lib/gbv/detail.action?docID=5117 301.

- Memariani, Azizollah; Amini, Abbas; Alinezhad, Alireza (2009): Sensitivity Analysis of Simple Additive Weighting Method (SAW): The Results of Change in the Weight of One Attribute on the Final Ranking of Alternatives. In: *Journal of Optimization in Industrial Engineering* Volume 2.
- Mendivil, Ramon; Fischer, Ulrich; Hirao, Masahiko; Hungerbühler, Konrad (2006): A New LCA Methodology of Technology Evolution (TE-LCA) and its Application to the Production of Ammonia (1950-2000) (8 pp).
 In: Int J Life Cycle Assessment 11 (2), S. 98–105. DOI: 10.1065/Ica2005.08.222.
- Merchant Research & Consulting (2013): TDI Manufacturers in Europe Restructure and Expand their Production Capacities. Online verfügbar unter https://mcgroup.co.uk/news/20150505/tdi-manufacturerseurope-restructure-expand-production-capacities.html, zuletzt geprüft am 23.11.2018.
- Merkle, Michael (2018): Der Dieselmotor im elektrifizierten Antriebsstrang.
 In: Helmut Tschöke, Klaus Mollenhauer und Rudolf Maier (Hg.):
 Handbuch Dieselmotoren. Wiesbaden: Springer Fachmedien
 Wiesbaden (Springer Reference Technik), S. 1143–1147.

- Miah, J. H.; Koh, S.C.L.; Stone, D. (2017): A hybridised framework combining integrated methods for environmental Life Cycle Assessment and Life Cycle Costing. In: *Journal of Cleaner Production* 168, S. 846–866. DOI: 10.1016/j.jclepro.2017.08.187.
- MiRO Mineraloelraffinerie Oberrhein (2018): Willkommen bei Miro. Miro in Zahlen. Online verfügbar unter http://www.miroka.de/de/portrait/miro-in-zahlen.htm, zuletzt geprüft am 20.11.2018.
- Mock, Peter; Kühlwein, Jörg; Tietge, Uwe; Franco, Vicente; Bandivadekar, Anup; German, John (2014): The WLTP: How a new test procedure for cars will affect fuel consumption values in the EU.
- Müller, Richard; Loster, Marc; Volk, Rebekka; Schultmann, Frank (2018): CO2-based assessment for sustainable production planning in the metal processing industry. In: *Procedia Manufacturing* 21, S. 289–296. DOI: 10.1016/j.promfg.2018.02.123.
- Müller, Richard; Schiessl, Andreas; Volk, Rebekka; Schultmann, Frank (2021): Assessment of site-specific greenhouse gas emissions of chemical producers: case studies of propylene and toluene diisocyanate. (akzeptiert Juni 2021). In: Journal of Cleaner Production.
- Müller-Christ, Georg (2001): Nachhaltiges Ressourcenmanagement. Eine wirtschaftsökologische Fundierung. Zugl.: Bayreuth, Univ., Habil.-Schr., 2001. Marburg: Metropolis-Verl. (Theorie der Unternehmung, 10).
- MWV (2003): Mineralöl und Raffinerien. Hg. v. Mineralölwirtschaftsverband e.V. Online verfügbar unter https://www.mwv.de/wp-content/uploads/2016/07/mwvpublikationen-broschuere-Mineraloel-und-Raffinerien-2003.pdf, zuletzt geprüft am 18.03.2019.
- Neelis, M. L.; Patel, M.; Gielen, D. J.; Blok, K. (2005): Modelling CO2 emissions from non-energy use with the non-energy use emission accounting tables (NEAT) model. In: *Resources, Conservation and Recycling* 45 (3), S. 226–250. DOI: 10.1016/j.resconrec.2005.05.003.
- Nelson, W. L. (1960a): How complexity of a refinery affects costs of processing. In: *Oil & Gas Journal* (Sept. 26), p. 216.

- Nelson, W. L. (1960b): How to describe refining complexity. In: *Oil & Gas Journal* (Mar. 14), S. 189.
- Nelson, W. L. (1961): How to compute refinery complexity. In: *Oil & Gas Journal* (June 19), p. 109.
- Nelson, W. L. (1976a): Complexity-1: The concept of refinery complexity. In: *Oil & Gas Journal* (Sept. 13), p. 81.
- Nelson, W. L. (1976b): Complexity-2: Process unit complexity factors examined. In: *Oil & Gas Journal* (Sept. 20), p. 202.
- Nelson, W. L. (1976c): Complexity-3: How to apply complexity. In: *Oil & Gas Journal* (Sept. 27), p. 83.
- Nertinger, Stefan (2015): Carbon and Material Flow Cost Accounting.
- Ngatchou, P.; Zarei, A.; El-Sharkawi, A. (2005): Pareto Multi Objective Optimization. In: 13th International Conference on, Intelligent Systems Application to Power Systems. Arlington, Virginia, USA, Nov. 6-10, 2005, S. 84–91.
- Nitzsche, R.; Budzinski, M.; Gröngröft, A.; Majer, S.; Müller-Langer, F.; Thrän, D. (2016): Process Simulation and Sustainability Assessment during Conceptual Design of New Bioeconomy Value Chains. In: *European Biomass Conference and Exhibition Proceedings* (Volume 2016, Issue 24thEUBCE, 2016, Pages 1723-1726).
- Nordhaus, Wiliam D. (1977): Economic Growth and Climate: The Carbon Dioxide Problem. In: *The American Economic Review, Vol. 67, No. 1, Papers and Proceedings of the Eighty-ninth,* S. 341–346.
- Norgate, T. E.; Jahanshahi, S.; Rankin, W. J. (2007): Assessing the environmental impact of metal production processes. In: *Journal of Cleaner Production* 15 (8-9), S. 838–848. DOI: 10.1016/j.jclepro.2006.06.018.
- Nourreddine, Menad (2007): Recycling of auto shredder residue. In: Journal of Hazardous Materials 139 (3), S. 481–490. DOI: 10.1016/j.jhazmat.2006.02.054.

- Nujoom, Reda; Wang, Qian; Mohammed, Ahmed (2018): Optimisation of a sustainable manufacturing system design using the multi-objective approach. In: *Int J Adv Manuf Technol* 96 (5-8), S. 2539–2558. DOI: 10.1007/s00170-018-1649-y.
- Nunez, Pernelle; Jones, Sammy (2016): Cradle to gate: Life cycle impact of primary aluminium production. In: *The International Journal of Life Cycle Assessment* 21 (11), S. 1594–1604. DOI: 10.1007/s11367-015-1003-7.
- Nurjanni, Kartina Puji; Carvalho, Maria S.; Costa, Lino (2017): Green supply chain design. A mathematical modeling approach based on a multi-objective optimization model. In: *International Journal of Production Economics* 183, S. 421–432. DOI: 10.1016/j.ijpe.2016.08.028.
- Oberschmidt, Julia (2010): Multikriterielle Bewertung von Technologien zur Bereitstellung von Strom und Wärme. Dissertation.
- Oberschmidt, Julia; Geldermann, Jutta; Ludwig, Jens; Schmehl, Meike (2010): Modified PROMETHEE approach for assessing energy technologies. In: *Int J of Energy Sector Man* 4 (2), S. 183–212. DOI: 10.1108/17506221011058696.
- OICA (2019): 2019 Production Statistics. Hg. v. International Organization of Motor Vehicle Manufacturers. Online verfügbar unter http://www.oica.net/category/production-statistics/2019-statistics/, zuletzt geprüft am 15.10.2020.
- Olmez, Gulnur Maden; Dilek, Filiz B.; Karanfil, Tanju; Yetis, Ulku (2016): The environmental impacts of iron and steel industry. A life cycle assessment study. In: *Journal of Cleaner Production* 130, S. 195–201. DOI: 10.1016/j.jclepro.2015.09.139.
- OMV Deutschland GmbH (2016): Fortschreibung Umwelterklärung 2016.
- O'Reilly, Ciarán J.; Göransson, Peter; Funazaki, Atsushi; Suzuki, Tetsuya; Edlund, Stefan; Gunnarsson, Cecilia et al. (2016): Life cycle energy optimisation. A proposed methodology for integrating environmental considerations early in the vehicle engineering design process. In: *Journal of Cleaner Production* 135, S. 750–759. DOI: 10.1016/j.jclepro.2016.06.163.

- Ott, Konrad; Döring, Ralf (2011): Theorie und Praxis starker Nachhaltigkeit.3. Aufl. Marburg: Metropolis-Verl. (Beiträge zur Theorie und Praxis starker Nachhaltigkeit, 1).
- Ou, Xunmin; Xiaoyu, Yan; Zhang, Xiliang (2011): Life-cycle energy consumption and greenhouse gas emissions for electricity generation and supply in China. In: *Applied Energy* 88 (1), S. 289–297. DOI: 10.1016/j.apenergy.2010.05.010.
- Paraskevas, Dimos; Kellens, Karel; van de Voorde, Alexander; Dewulf, Wim; Duflou, Joost R. (2016): Environmental Impact Analysis of Primary Aluminium Production at Country Level. In: *Procedia CIRP* 40, S. 209– 213. DOI: 10.1016/j.procir.2016.01.104.
- Pareto, V. (1906): Manuale di economica politica, societa editrice libraria: Manual of political economy, 1971.
- Patel, M. (2003): Cumulative energy demand (CED) and cumulative CO2 emissions for products of the organic chemical industry. In: *Energy* 28 (7), S. 721–740. DOI: 10.1016/S0360-5442(02)00166-4.
- Patil, Akshat; Patel, Arun; Purohit, Rajesh (2017): An overview of Polymeric Materials for Automotive Applications. In: *Materials Today: Proceedings* 4 (2), S. 3807–3815. DOI: 10.1016/j.matpr.2017.02.278.
- PCK (2018): Geschäftsfelder. Online verfügbar unter https://www.pck.de/unternehmen/geschaeftsfelder.html, zuletzt geprüft am 20.11.2018.
- Peereboom, Eric Copius; Kleijn, René; Lemkowitz, Saul; Lundie, Sven (1998): Influence of Inventory Data Sets on Life-Cycle Assessment Results. A Case Study on PVC. In: *Journal of Industrial Ecology* 2 (3), S. 109–130. DOI: 10.1162/jiec.1998.2.3.109.
- Pereira, C. P.; Prata, D. M.; Monteiro, L. P. C.; Mainier, F. B. (2013): Evaluation of the CO2 Emissions in a Petrochemical Plant. In: ARPN Journal of Science and Technology (VOL. 3, NO. 8 August 2013).

- Peters, Nils (2010): Inter-organisational Design of Voluntary Sustainability Initiatives. Increasing the Legitimacy of Sustainability Strategies for Supply Chains. Zugl.: St.Gallen, Univ., Diss., 2009. Wiesbaden: Gabler Verlag / GWV Fachverlage GmbH Wiesbaden (Gabler Research). Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-3-8349-8720-4.
- Pigosso, Daniela Cristina Antelmi; Sousa, S. R. (2011): Life Cycle Assessment (LCA): Discussion on Full-Scale and Simplified Assessments to Support the Product Development Process. In: *3rd International workshop on advances in cleaner production: Cleaner production initiatives and challenges for a sustainable world*.
- PKN ORLEN Capital Group (2016): Company Overview 2016.
- PlasticsEurope (2005a): Eco-profiles of the European Plastics Industry: Naphtha.
- PlasticsEurope (2005b): Eco-profiles of the European Plastics Industry: Natural Gas.
- PlasticsEurope (2012a): Ethylene, Propylene, Butadiene, Pyrolysis Gasoline, Ethylene Oxide (EO), Ethylene Glycols (MEG, DEG, TEG). Eco-profiles and Environmental Product Declarations of the European Plastics Manufacturers.
- PlasticsEurope (2012b): Toluene Diisocyanate (TDI) & Methylenediphenyl Diisocyanate (MDI).
- PlasticsEurope (2013): Chlorine (The chloralkali process) Euro Chlor. An Eco-profile and Environmental Product Declaration of the European Chlor Alkali Industry.
- PlasticsEurope (2017): Plastics the Facts 2017. An analysis of European plastics production, demand and waste data. Online verfügbar unter https://www.plasticseurope.org/application/files/5715/1717/4180/Pl astics_the_facts_2017_FINAL_for_website_one_page.pdf.
- PlasticsEurope (2018): Eco-Profiles. PlasticsEurope's Eco-profiles comprise Life Cycle Inventory datasets (LCI) and Environmental Product Declarations (EPD) for plastics.

- PlasticsEurope (2020): About us. Association of Plastics Manufacturers. Online verfügbar unter https://www.plasticseurope.org/de/aboutus/who-we-are, zuletzt geprüft am 06.05.2020.
- Porter, Michael E. (1986): Wettbewerbsvorteile. Spitzenleistungen erreichen und behaupten = Competitive advantage. Frankfurt: Campus.
- Porter, Michael E. (2014): Wettbewerbsvorteile. Spitzenleistungen erreichen und behaupten = (Competitive Advantage). 8., durchges. Aufl. Frankfurt am Main: Campus-Verlag. Online verfügbar unter http://gbv.eblib.com/patron/FullRecord.aspx?p=666111.
- Posen, I. Daniel; Griffin, W. Michael; Matthews, H. Scott; Azevedo, Inês L. (2015): Changing the renewable fuel standard to a renewable material standard: bioethylene case study. In: *Environmental science & technology* 49 (1), S. 93–102. DOI: 10.1021/es503521r.
- Prammer, Heinz Karl (2009): Integriertes Umweltkostenmanagement.
 Bezugsrahmen und Konzeption für eine ökologisch nachhaltige
 Unternehmensführung. Zugl.: Linz, Univ., Habil.-Schr., 2008.
 Wiesbaden: Betriebswirtschaftlicher Verlag Gabler (neue
 betriebswirtschaftliche forschung (nbf), v.369). Online verfügbar unter
 http://dx.doi.org/10.1007/978-3-8349-8447-0.
- Prevedouros, Panos; Mitropoulos, Lambros (2016): Life Cycle Emissions and Cost Study of Light Duty Vehicles. In: *Transportation Research Procedia* 15, S. 749–760. DOI: 10.1016/j.trpro.2016.06.062.
- Promberger, Kurt; Spiess, Hildegard; Kössler, Werner (2006): Unternehmen und Nachhaltigkeit. Eine managementorientierte Einführung in die Grundlagen nachhaltigen Wirtschaftens. Wien: Linde Verl. (Management und Unternehmenskultur, 12).
- Queiruga, Dolores; Walther, Grit; González-Benito, Javier; Spengler, Thomas (2008): Evaluation of sites for the location of WEEE recycling plants in Spain. In: *Waste management (New York, N.Y.)* 28 (1), S. 181–190. DOI: 10.1016/j.wasman.2006.11.001.

- Quick, Reiner; Knocinski, Martin (2006): Nachhaltigkeitsberichterstattung -Empirische Befunde zur Berichterstattungspraxis von HDAX-Unternehmen. In: *Zeitschrift für Betriebswirtschaft* (76(6)), S. 615– 650.
- Quinkertz, Rainer (2002): Optimierung der Energienutzung bei der Aluminiumherstellung (Dissertation).
- Radloff, Sophia (2016): Modellgestützte Bewertung der Nutzung von Biokohle als Bodenzusatz in der Landwirtschaft.
- Raffinerie Heide GmbH (2012): Mit Hightech und Leistungskraft die Zukunft im Blick. Voller Energie für den Norden.
- Raffinerie Heide GmbH (2016): Zahlen und Statistiken der Raffinerie Heide. Alle wichtigen Daten und Fakten der Raffinerie auf einen Blick. Online verfügbar unter http://www.heiderefinery.com/de/ueber-uns/datenfakten/, zuletzt geprüft am 20.11.2018.
- Rahmstorf, Stefan; Schellnhuber, Hans-Joachim (2007): Der Klimawandel. Diagnose, Prognose, Therapie. originalausgabe, 6. Auflage. München: Verlag C. H. Beck (Beck'sche Reihe C.-H.-Beck-Wissen, 2366).
- Ram, M.; Bogdanov, D.; Aghahosseini, A.; Gulagi, A.; Oyewo, A. S.; Child, M. et al. (2019): Global Energy System based on 100% renewable energy. Power, Heat, Transport and Desalination Sectors. Hg. v. Lappeenranta University of Technology and Energy Watch Group. Online verfügbar unter http://energywatchgroup.org/wpcontent/uploads/EWG_LUT_100RE_All_Sectors_Global_Report_2019. pdf.
- Ramboll Deutschland GmbH (2020): Key Findings of Ramboll's 2019 Sustainability Survey - Managing Sustainability.
- Rao, R. Venkata (2013): Decision Making in Manufacturing Environment Using Graph Theory and Fuzzy Multiple Attribute Decision Making Methods. Volume 2. London: Springer (Springer Series in Advanced Manufacturing). Online verfügbar unter http://site.ebrary.com/lib/alltitles/docDetail.action?docID=10594928.

- Raschke, Ehrhard (2008): Der Treibhauseffekt in der Erdatmosphäre. Hg. v. Welt der Physik. Online verfügbar unter https://www.weltderphysik.de/gebiet/erde/atmosphaere/klimaforsc hung/treibhauseffekt/, zuletzt geprüft am 17.01.2019.
- Rebitzer, Gerald (2002): Integrating Life Cycle Costing and Life Cycle Assessment for Managing Costs and Environmental Impacts in Supply Chains. In: Stefan Seuring und Maria Goldbach (Hg.): Cost Management in Supply Chains. Heidelberg: Physica-Verlag HD, S. 127– 146.
- Rebitzer, Gerald; Nakamura, Shinichiro (2008): Environmental Life Cycle Costing. In: Hunkeler, Lichtenvort, Rebitzer: Environmental Life Cycle Costing. Hoboken: CRC Press. Online verfügbar unter http://gbv.eblib.com/patron/FullRecord.aspx?p=570462.
- Rehl, T.; Müller, J. (2013): CO2 abatement costs of greenhouse gas (GHG) mitigation by different biogas conversion pathways. In: *Journal of environmental management* 114, S. 13–25. DOI: 10.1016/j.jenvman.2012.10.049.
- Reliance Industries Ltd. (2009): Nelson's Complexity Factor. Online verfügbar unter http://pakpas.org/0.REFINERY%20LIBRARY/2.EDCbusiness_petroleum_refiningmktg_lc_ncf.pdf), zuletzt geprüft am 20.11.2018.
- Ren, Hongbo; Gao, Weijun; Zhou, Weisheng; Nakagami, Ken'ichi (2009): Multi-criteria evaluation for the optimal adoption of distributed residential energy systems in Japan. In: *Energy Policy* 37 (12), S. 5484– 5493. DOI: 10.1016/j.enpol.2009.08.014.
- Ren, Tao (2009): Petrochemocals from oil, natural gas, coal and biomass. Energy use, economics and innovation.
- Ren, Tao; Patel M.; Blok, K. (2006): Olefins from conventional and heavy feedstocks. Energy use in steam cracking and alternative processes.
 In: *Energy* 31 (4), S. 425–451. DOI: 10.1016/j.energy.2005.04.001.
- Ren, Tao; Patel M.; Blok, K. (2008): Steam cracking and methane to olefins. Energy use, CO2 emissions and production costs. In: *Energy. DOI:* 10.1016/j.energy.2008.01.002.

- Rentz, Otto; Fröhling, Magnus; Nebel, Falk; Schultmann, Frank; Engels, Bernd (2006): Integrierter Umweltschutz in der Metallerzeugung: Simulationsgestützte operative Produktionsplanung zur Optimierung metallurgischer Abfallverwertungsprozesse. Forschungsbericht.
- Rentz, Otto; Spengler, Thomas; Hähre, Stephan; Sieverdingbeck, Andreas (1997): Prozeßintegrierte Umweltschutzmaßnahmen in der Eisen- und Stahlindustrie. Forschungsbericht.
- Renzulli, Pietro; Notarnicola, Bruno; Tassielli, Giuseppe; Arcese, Gabriella; Di Capua, Rosa (2016): Life Cycle Assessment of Steel Produced in an Italian Integrated Steel Mill. In: *Sustainability* 8 (8), S. 719. DOI: 10.3390/su8080719.
- Research concepts Ltd. (2018): Der Stahlpreisentwicklung auf der Spur. Durchschnittlicher Stahlpreis im 2. Quartal 2018. Online verfügbar unter www.stahlpreise.eu, zuletzt geprüft am 03.09.2018.
- Rheinische Post (2017): Seit 50 Jahren wird in Dormagen Chlor produziert. Online verfügbar unter https://rponline.de/nrw/staedte/dormagen/seit-50-jahren-wird-in-dormagenchlor-produziert aid-19472009, zuletzt geprüft am 03.12.2018.
- Ribeiro, Catarina; Ferreira, José V.; Partidário, Paulo (2007): Life cycle assessment of a multi-material car component. In: *Int J LCA* 12 (5), S. 336–345. DOI: 10.1065/lca2006.12.304.
- Ridge, Lynne (1998): EUCAR Automotive LCA Guidelines Phase 2. Total Life Cycle Conference and Exposition. In: *Total Life Cycle Conference Graz* (339), S. 193–204.
- Rieckhof, R.; Günther, E. (2013): Economic-Ecological Optimization by Combining Material Flow Cost Accounting and Life Cycle Assessment.
 In: EMAN-EU Environmental and Sustainability Management Network (Hrsg.): Conference Proceedings. Material Flow Cost Accounting. EMAN-EU 2013 Conference. Dresden. S. 93-96.
- Rieckhof, Ramona; Guenther, Edeltraud (2018): Integrating life cycle assessment and material flow cost accounting to account for resource productivity and economic-environmental performance. In: Int J Life Cycle Assess 23 (7), S. 1491–1506. DOI: 10.1007/s11367-018-1447-7.

- Riezler, Stephan (1996): Lebenszyklusrechnung. Instrument des Controlling strategischer Projekte. Wiesbaden: Gabler Verlag (Bochumer Beiträge zur Unternehmungsführung und Unternehmensforschung). Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-3-322-91238-1.
- Rogers, Martin; Bruen, Michael (1998): Choosing realistic values of indifference, preference and veto thresholds for use with environmental criteria within ELECTRE. In: *European Journal of Operational Research* 107 (3), S. 542–551. DOI: 10.1016/S0377-2217(97)00175-6.
- Rohde-Brandenburger, K.; Obernolte, J. (2008): CO2-Potential durch Leichtbau im PKW.
- Roijers, Diederik M.; Whiteson, Shimon (2017): Multi-objective decision making. San Rafael: Morgan & Claypool Publishers (Synthesis lectures on artificial intelligence and machine learning, #34). Online verfügbar unter http://ieeexplore.ieee.org/servlet/opac?bknumber=7909257.
- Römpp (2002): Naphtha. Hg. v. Gerog Thieme Verlag KG. Online verfügbar unter https://roempp.thieme.de/roempp4.0/do/data/RD-14-00187, zuletzt aktualisiert am März 2002, zuletzt geprüft am 14.03.2019.
- Rosneft (2016): Rosneft and BP Conclude Dissolution of the Refining Joint Venture Ruhr Oel GmbH in Germany. Online verfügbar unter https://www.rosneft.com/press/releases/item/185259/, zuletzt geprüft am 20.11.2018.
- Roy, B. (1980): Selektieren, Sortieren und Ordnen mit Hilfe von Prävalenzrelationen: Neue Ansätze auf dem Gebiet der Entscheidungshilfe für MultikriteriaProbleme. In: Schmalenbachs Zeitschrift für Betriebswirtschaftliche Forschung (32), S. 465–497.
- Roy, B.; Bouyssou, D. (1993): Aide multicritère à la décision: Méthodes et Cas (Economica, Paris).
- Roy, Bernard (1991): The outranking approach and the foundations of electre methods. In: *Theor Decis* 31 (1), S. 49–73. DOI: 10.1007/BF00134132.

- Rutherford, B. A. (1977): Value Added as a Focus of Attention for Financial Reporting. Some Conceptual Problems. In: *Accounting and Business Research* 7 (27), S. 215–220. DOI: 10.1080/00014788.1977.9728707.
- S&P Global Platts (2015): World electric power plants database. Online verfügbar unter https://www.spglobal.com/platts/en/productsservices/electric-power/world-electric-power-plants-database, zuletzt geprüft am 13.05.2019.
- Sadrnia, Abdolhossein; Ismail, Napsiah; Zulkifli, Norzima; Ariffin, M. K. A.; Nezamabadi-pour, Hossein; Mirabi, Hamed (2013): A Multiobjective Optimization Model in Automotive Supply Chain Networks. In: *Mathematical Problems in Engineering* 2013 (5), S. 1–10. DOI: 10.1155/2013/823876.
- Safaeimohamadabadi, H.; Tichkowsky, G.; Kumar, A. (2009): Development of a multi-criteria assessment model for ranking of renewable and non-renewable transportation fuel vehicles. In: *Energy* 34 (1), S. 112– 125. DOI: 10.1016/j.energy.2008.09.004.
- Sakai, Shin-ichi; Yoshida, Hideto; Hiratsuka, Jiro; Vandecasteele, Carlo; Kohlmeyer, Regina; Rotter, Vera Susanne et al. (2014): An international comparative study of end-of-life vehicle (ELV) recycling systems. In: J Mater Cycles Waste Manag 16 (1), S. 1–20. DOI: 10.1007/s10163-013-0173-2.
- Salzgitter AG: Geschäftsbericht 2012. Hg. v. Salzgitter AG Peiner Träger GmbH. Online verfügbar unter https://www.salzgitterag.com/fileadmin/footage/MEDIA/SZAG/finanzberichte/2012/gb2012 /de/szag_gb_2012.pdf, zuletzt geprüft am 30.06.2020.
- Sarkar, Biswajit; Omair, Muhammad; Choi, Seok-Beom (2018): A Multi-Objective Optimization of Energy, Economic, and Carbon Emission in a Production Model under Sustainable Supply Chain Management. In: *Applied Sciences* 8 (10), S. 1744. DOI: 10.3390/app8101744.
- Saygin, Değer (2012): Assessing industrial energy use and CO2 emissions. Opportunities for energy efficiency, biomass and CCS.

- Scaife, Peter; Nunn, Jason; Cottrell, Aaron; Wibberley, Louis (2002): Towards Sustainable Steelmaking – an LCA perspective. In: *ISIJ International* 42 (Suppl), S5-S9. DOI: 10.2355/isijinternational.42.Suppl_S5.
- Schaltegger, Stefan; Petersen, Holger; Burritt, Roger (2003): An introduction to corporate environmental management. Striving for sustainability. Sheffield England: Greenleaf Pub. Online verfügbar unter http://site.ebrary.com/lib/subhamburg/Doc?id=10650125.
- Schiessl, Andreas; Müller, Richard; Volk, Rebekka; Schultmann, Frank (2021): Site-specific environmental impact assessment as a basis for supplier selections – exemplary application to aluminum. In: *Journal* of Cleaner Production. DOI: 10.1016/j.jclepro.2020.125703.
- Schiessl, Andreas; Müller, Richard; Volk, Rebekka; Zimmer, Konrad; Breun, Patrick; Schultmann, Frank (2020): Integrating site-specific environmental impact assessment in supplier selection. Exemplary application to steel procurement. In: J Bus Econ 27, S. 93. DOI: 10.1007/s11573-020-00967-1.
- Schmidt, A.; Frydendal, J. (2003): Methods for calculating the environmental benefits of 'green' products. In: *Erdmenger, C. (Ed.). Buying into the environment:*
- Schmidt, Anja; Götze, Uwe; Sygulla, Ronny (2015): Extending the scope of Material Flow Cost Accounting – methodical refinements and use case. In: *Journal of Cleaner Production* 108, S. 1320–1332. DOI: 10.1016/j.jclepro.2014.10.039.
- Schmidt, Benedikt (2013): Soziale Nachhaltigkeit bei der Lieferantenauswahl. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden.
- Schmidt, Jannick; Thrane, Mikkel (2009): Life cycle assessment of aluminium production in new Alcoa smelter in Greenland.
- Schmidt, Mario; Nakajima, Michiyasu (2013): Material Flow Cost Accounting as an Approach to Improve Resource Efficiency in Manufacturing Companies. In: *Resources* 2 (3), S. 358–369. DOI: 10.3390/resources2030358.
- Schmitt, Andreas; Beidl, Christian; Koch, Thomas (2013): Beitrag zur NOx Emissionsminderung für Niedrig-Emissions-Fahrzeuganwendungen mittels Selektiver-Katalytischer-Reduktion. Dissertation. Universitätsund Landesbibliothek Darmstadt, Darmstadt.
- Schönbucher, Axel (2002): Thermische Verfahrenstechnik. Grundlagen und Berechnungsmethoden für Ausrüstungen und Prozesse. Berlin, Heidelberg: Springer. Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-56308-9.
- Schönmayr, David (2016): Plastics recycling in the automotive sector. rethinking the industry by integrative research and holistic solutions for sustainable management in the automotive plastics production and recycling system.
- Schrack, Daniela (2016): Nachhaltigkeitsorientierte Materialflusskostenrechnung. Anwendung in Lieferketten, der Abfallwirtschaft und Integration externer Effekte.
- Schreiber, Rudolf L. (2004): Neue Wege im Naturschutz. Wie muss Nachhaltikgkeit kommuniziert werden? In: *ASK - die Cleantech Community*. Online verfügbar unter https://www.askeu.de/News/6787/Neue-Wege-im-Naturschutz.htm.
- Schröder, Tim; Lauven, Lars-Peter; Beyer, Beatriz; Lerche, Nils; Geldermann, Jutta (2019): Using PROMETHEE to assess bioenergy pathways. In: *Cent Eur J Oper Res* 27 (2), S. 287–309. DOI: 10.1007/s10100-018-0590-3.
- Schwarz, Winfried; Leisewitz, André (2000): Emissionen und
 Minderungspotenzial von HFKW, FKW und SF6 in Deutschland. In:
 UWSF Z. Umweltchem. Ökotox. 12 (\$) 209 213.
- Schy, Albert A.; Giesy, Daniel P. (1988): Multicriteria Optimization Methods for Design of Aircraft Control Systems: Springer, Bosten (Stadler, Wolfram (Hrsg.) Multicriteria Optimization in Engineering and in the Sciences. Mathematical Concepts and Methods in Science and Engineering., 37).

- Sell, Ina; Ott, Denise; Kralisch, Dana (2013): Lebenszykluskostenanalyse zur Entscheidungsunterstützung in der chemischen Prozessentwicklung.
 In: *Chemie Ingenieur Technik* 85 (4), S. 447–454. DOI: 10.1002/cite.201200246.
- Sell, Ina; Ott, Denise; Kralisch, Dana (2014): Life Cycle Cost Analysis as Decision Support Tool in Chemical Process Development. In: *ChemBioEng Reviews* 1 (1), S. 50–56. DOI: 10.1002/cben.201300007.
- Seuring, Stefan A. (1999): Corporate material and energy flow analysis. Framework, compilation and evaluation. Oldenburg: SAS-Verl.
- Shama, M. S.; Vinodh, S.; Jayakrishna, K. (2015): Integrated life cycle assessment and activity based life cycle costing approach for an automotive product. In: *Scientia Iranica E (2015) 22(3), 1179-1188*.
- Sheikhalishahi, M.; Torabi, S. A. (2014): Maintenance supplier selection considering life cycle costs and risks. A fuzzy goal programming approach. In: *International Journal of Production Research* 52 (23), S. 7084–7099. DOI: 10.1080/00207543.2014.935826.
- Shell Rheinland Raffinerie (2018): Imagebroschüre. Online verfügbar unter www.shell.de/rheinlandraffinerie, zuletzt geprüft am 20.11.2018.
- Siddique, Rafat (2014): Utilization of Industrial By-products in Concrete. In: *Procedia Engineering* 95, S. 335–347. DOI: 10.1016/j.proeng.2014.12.192.
- Simões, Carla L.; Figueirêdo de Sá, R.; Ribeiro, Carlos J.; Bernardo, Pedro; Pontes, António J.; Bernardo, C. A. (2016): Environmental and economic performance of a car component. Assessing new materials, processes and designs. In: *Journal of Cleaner Production* 118, S. 105– 117. DOI: 10.1016/j.jclepro.2015.12.101.
- Sonnemann, Guido; Castells, Francesc; Schuhmacher, Marta (2004): Integrated life-cycle and risk assessment for industrial processes. Boca Raton: Lewis. Online verfügbar unter http://www.loc.gov/catdir/enhancements/fy0646/2003054632d.html.

- Spengler, T.; Geldermann, J.; Hähre, S.; Sieverdingbeck, A.; Rentz, O. (1998): Development of a multiple criteria based decision support system for environmental assessment of recycling measures in the iron and steel making industry. In: *Journal of Cleaner Production* 6 (1), S. 37–52. DOI: 10.1016/S0959-6526(97)00048-6.
- Spengler, Thomas Stefan (1998): Industrielles Stoffstrommanagement. Betriebswirtschaftliche Planung und Steuerung von Stoff- und Energieströmen in Produktionsunternehmen. Zugl.: Karlsruhe, Univ., Habil.-Schr., 1998. Berlin: E. Schmidt (Technological economics, 54).
- Stadtwerke Karlsruhe (2018a): Tarifberater Gas. Online verfügbar unter www.stadtwerke-karlsruhe.de/swk/privatkunden/erdgas/tarifberater, zuletzt geprüft am 19.06.2018.
- Stadtwerke Karlsruhe (2018b): Wasserpreise. Preisübersicht. Online verfügbar unter www.stadtwerkekarlsruhe.de/swk/privatkunden/trinkwasser/wasserpreise, zuletzt geprüft am 24.05.2018.
- Stahlinstitut VDEh (2014a): Fakten zur Stahlindustrie in Deutschland. Hg. v. Wirtschaftsvereinigung Stahl. Online verfügbar unter https://www.stahl-online.de/wpcontent/uploads/2013/12/Fakten_Stahlindustrie_2014-04_6.pdf.
- Stahlinstitut VDEh (2014b): PLANTFACTS database. Stahleisen, Düsseldorf.
- Stahlinstitut VDEh (2014c): Statistisches Jahrbuch der Stahlindustrie 2013/2014. Stahleisen, Düsseldorf.
- Stahlinstitut VDEh (2019): Rohstahlerzeugung im Elektrolichtbogenofen. Online verfügbar unter https://www.stahlonline.de/index.php/themen/stahltechnologie/stahlerzeugung/2/, zuletzt geprüft am 04.04.2019.
- Stahl-Zentrum (2013): Erzeugnisformen. Information. Unter Mitarbeit von Wirtschaftsvereinigung Stahl und Stahlinstitut VDEh. Online verfügbar unter https://www.stahl-online.de/wpcontent/uploads/2013/08/Erzeugnisformen_V1.pdf, zuletzt geprüft am 03.04.2019.

- Stahl-Zentrum (2016): Stahlerzeugung in Deutschland. Unter Mitarbeit von Wirtschaftsvereinigung Stahl und Stahlinstitut VDEh. Online verfügbar unter https://www.stahl-online.de/index.php/statistiken/.
- Statista (2014): Typische Lebensdauer von Autos in Deutschland nach Automarken. Hg. v. Wirtschaftswoche. Datenerhebung durch Entsorgung.de.
- Statistisches Bundesamt (2008): Klassifikation der Wirtschaftszweige. Mit Erläuterungen.
- Statistisches Bundesamt (2009): Fachserie 4, Reihe 4,3, Kostenstrukturstsatistik 2007, zuletzt geprüft am 18.05.2009.
- Statistisches Bundesamt (2018a): Produzierendes Gewerbe 2017. Produktion des Verarbeitenden Gewerbes sowie des Bergbaus und der Gewinnung von Steinen und Erden. In: *Erden - Fachserie 4 Reihe 3.1.*
- Statistisches Bundesamt (2018b): Umweltnutzung und Wirtschaft -Tabellen zu den UGR, Teil 3: Luftemissionen - Ausgabe 2018. Umweltökonomische Gesamtrechnung.

Statistisches Bundesamt; VCI (2019): Umsätze der wichtigsten Industriebranchen in Deutschland in den Jahren von 2015 bis 2017 (in Milliarden Euro. Online verfügbar unter https://de.statista.com/statistik/daten/studie/241480/umfrage/umsa etze-der-wichtigsten-industriebranchen-in-deutschland/, zuletzt geprüft am 29.01.19.

- Steinhilper, Rolf; Süchting, Martin Andreas; Kafara, Markus (2013): Total Cost and Environmental Impact of Ownership — TCEIO. In: ZWF 108 (1-2), S. 63–67. DOI: 10.3139/104.110894.
- Stewart, T. J. (1992): A critical survey on the status of multiple criteria decision making theory and practice. In: *Omega* 20 (5-6), S. 569–586. DOI: 10.1016/0305-0483(92)90003-P.

- Stibbe, Rosemarie (2017): Globales Life-Cycle-Controlling. Footprinting in der Praxis. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden. Online verfügbar unter https://ebookcentral.proquest.com/lib/gbv/detail.action?docID=4797 384.
- Strebel, H. (2003): Kritische Würdigung der Umweltkosten- und Stoffflussrechnungen. In: Kramer, M./Eifler, P. (Hrsg.): Umwelt- und kostenorientierte Unternehmensführung.
- Suciati, Asri; Goto, Naohiro (Hg.) (2014): Environmental Impact Assessment of the Development of Primary Aluminium Industry in Indonesia based on MFA and LCA as a Baseline Study to Achieve Sustainable Industry. IPCBEE. 70. Aufl. Singapore: IACSIT Press.
- Suh, Sangwon; Lenzen, Manfred; Treloar, Graham J.; Hondo, Hiroki; Horvath, Arpad; Huppes, Gjalt et al. (2004): System boundary selection in life-cycle inventories using hybrid approaches. In: *Environmental science & technology* 38 (3), S. 657–664. DOI: 10.1021/es0263745.
- Sullivan, J. L.; Burnham, A.; Wang, M. (2010): Energy-Consumption and Carbon-Emission - Analysis of Vehicle and Component Manufacturing.
- Sullivan, John L.; Hu, Jenny (1995): Life Cycle Energy Analysis for Automobiles. In:. 1995 Total Life Cycle Conference and Exposition, OCT. 16, 1995: SAE International400 Commonwealth Drive, Warrendale, PA, United States (SAE Technical Paper Series).
- Sultana, Arifa; Kumar, Amit (2012): Ranking of biomass pellets by integration of economic, environmental and technical factors. In: *Biomass and Bioenergy* 39, S. 344–355. DOI: 10.1016/j.biombioe.2012.01.027.
- SWR (2018): Für TDI-Anlage Schwertransport mit Reaktor erreicht BASF 02.03.2018. Online verfügbar unter https://www.swr.de/swraktuell/rp/fuer-tdi-anlage-schwertransportmit-reaktor-erreicht-basf/-/id=1682/did=21264170/nid=1682/jv8ejg/index.html.

- Tan, Reginald B.H.; Khoo, Hsien H. (2005): An LCA study of a primary aluminum supply chain. In: *Journal of Cleaner Production* 13 (6), S. 607–618. DOI: 10.1016/j.jclepro.2003.12.022.
- Theißen, Sebastian; Spinler, Stefan (2014): Strategic analysis of manufacturer-supplier partnerships. An ANP model for collaborative CO2 reduction management. In: *European Journal of Operational Research* 233 (2), S. 383–397. DOI: 10.1016/j.ejor.2013.08.023.
- Thinkstep (2019): Ökobilanzen erstellen mit GaBi Software. Online verfügbar unter https://www.thinkstep.com/de/software/gabi-software.
- Thyssenkrupp AG (2018): The Carbon2Chem project. Online verfügbar unter www.thyssenkrupp.com/de/carbon2chem/., zuletzt geprüft am 13.05.2019.
- Topcu, Y.I; Ulengin, F. (2004): Energy for the future. An integrated decision aid for the case of Turkey. In: *Energy* 29 (1), S. 137–154. DOI: 10.1016/S0360-5442(03)00160-9.
- Torres-Ruiz, Aineth; Ravindran, A. (2018): Multiobjective optimisation model for the selection of critical suppliers integrating sustainability criteria. In: *IJOR* 33 (2), S. 208. DOI: 10.1504/IJOR.2018.095198.
- Total Raffinierie Mitteldeutschland (2018): Kraftstoffe aus Leuna. Online verfügbar unter https://www.total.de/ueber-total/profil-in-deutschland/raffinerie-mitteldeutschland.html#oben, zuletzt geprüft am 20.11.2018.
- Triantaphyllou, E.; Shu, B.; Nieto Sanchez, S.; Ray, T. (1998): Multi-criteria decision making: an operations research approach. In: *Encyclopedia of Electrical and Electronics Engineering* (Volume 15), 175-186.
- Triantaphyllou, Evangelos (2010): Multi-criteria decision making methods. A comparative study. Dordrecht: Kluwer (Applied optimization, 44).

- Trippe, Frederik (2013): Techno-ökonomische Bewertung alternativer Verfahrenskonfigurationen zur Herstellung von Biomass-to-Liquid (BtL) Kraftstoffen und Chemikalien. Zugl.: Karlsruhe, KIT, Diss., 2013.
 Print on demand. Hannover, Karlsruhe: Technische Informationsbibliothek u. Universitätsbibliothek; KIT Scientific Publishing (Produktion und Energie, 3). Online verfügbar unter https://edocs.tib.eu/files/e01fn13/750499583.pdf.
- Tschandl, Martin; Posch, Alfred (Hg.) (2012): Integriertes Umweltcontrolling. Von der Stoffstromanalyse zum Bewertungs- und Informationssystem. 2. Aufl. Wiesbaden: Gabler Verlag / Springer Fachmedien Wiesbaden GmbH Wiesbaden. Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-3-8349-6844-9.
- U.S. Department of Energy (2016): Fuel Economy Guide 2016. Hg. v. Office of Energy Efficiency and Renewable Energy und United States Environment Protection Agency (EPA). Online verfügbar unter https://www.fueleconomy.gov/feg/download.shtml.
- U.S. Geological Survey (2013): Area reports International Europe and Central Eurasia: U.S. Geological Survey Minerals Yearbook 2011. U.S. Government Printing Office.
- U.S. Geological Survey (2014): 2012 Minerals Yearbook Germany.
- U.S. Geological Survey (2015a): 2015 Minerals Yearbook Copper.
- U.S. Geological Survey (2015b): 2015 Minerals Yearbook Lead.
- U.S. Geological Survey (2015c): Area reports International Europe and Central Eurasia: U.S. Geological Survey Minerals Yearbook 2012. U.S. Government Printing Office.
- U.S. Geological Survey (2016): 2016 Minerals Yearbook Zinc.
- U.S. Geological Survey (2017): 2014 Minerals Yearbook Germany.
- UBA (2003): Ansätze der Umweltkostenrechnung im Vergleich Vergleichende Beurteilung von Ansätzen der Umweltkostenrechnung auf ihre Eignung für die betriebliche Praxis und ihren Beitrag für eine ökologische Unternehmensführung. Umweltbundesamt (Texte 78 2003).

- UBA (2009): Nachhaltige Chemie. Positionen und Kriterien des Umweltbundesamtes.
- UBA (2012): Carbon Footprint Teilgutachten. "Monitoring für den CO2-Ausstoß in der Logistikkette". Hg. v. Umweltbundesamt Deutschland. Online verfügbar unter https://www.umweltbundesamt.de/sites/default/files/medien/461/p ublikationen/4306.pdf, zuletzt geprüft am 17.06.2020.
- UBA (2013): Schätzung der Umweltkosten in den Bereichen Energie und Verkehr. Empfehlungen des Umweltbundesamtes, zuletzt geprüft am aktualisiert 2014.
- UBA (2015): ProBas. Prozessorientierte Basisdaten für Umweltmanagementsysteme. Umweltbundesamt. Online verfügbar unter https://www.probas.umweltbundesamt.de/php/index.php, zuletzt geprüft am 18.11.2019.
- UBA (2016): CO2-Emissionsfaktoren für fossile Brennstoffe. Umweltbundesamt; Juhrich, K. Fachgebiet Emissionssituation (I 2.6) (27/2016).
- UBA (2018a): Berichterstattung unter der Klimarahmenkonvention der Vereinten Nationen und dem Kyoto-Protokoll 2018. Nationaler Inventarbericht zum Deutschen Treibhausgasinventar 1990-2016. Umweltbundesamt - UNFCCC-Submission (12/2018).
- UBA (2018b): Emissionen aus der Betrieben der Metallindustrie. Hg. v. Umweltbundesamt. Online verfügbar unter https://www.umweltbundesamt.de/daten/umweltwirtschaft/industrie/emissionen-aus-betrieben-dermetallindustrie#textpart-1, zuletzt geprüft am 02.06.2020.
- UBA (2018c): Entwicklung der energiebedingten Treibhausgas-Emissionen nach Quellgruppen. Nationale Trendtabellen für die deutsche Berichterstattung. Umweltbundesamt.

- UBA (2018d): Strom- und Wärmeversorgung in Zahlen. Entwicklung der spezifischen Kohlendioxid-Emissionen des deutschen Strommix 1990-2016 und erste Schätzungen 2017 im Vergleich zu CO2-Emissionen der Stromerzeugung. Hg. v. Umweltbundesamt Deutschland. Online verfügbar unter https://www.umweltbundesamt.de/themen/klimaenergie/energieversorgung/strom-waermeversorgung-inzahlen#Strommix, zuletzt geprüft am 23.11.2018.
- UBA (2019a): Entwicklung der spezifischen Kohlendioxid-Emissionen des deutschen Strommix in den Jahren 1990 - 2018. Hg. v. Umweltbundesamt Deutschland. Online verfügbar unter https://www.umweltbundesamt.de/sites/default/files/medien/1410/ publikationen/2019-04-10_cc_10-2019_strommix_2019.pdf, zuletzt geprüft am 23.05.2020.
- UBA (2019b): Methodenkonvention 3.0 zur Ermittlung von Umweltkosten. Kostensätze Stand 02/2019. Umweltbundesamt. Online verfügbar unter https://www.umweltbundesamt.de/sites/default/files/medien/1410/ publikationen/2019-02-11_methodenkonvention-3-0_kostensaetze_korr.pdf.
- UBA (2019c): Wie umweltfreundlich sind die Akkus der E-Scooter? Umweltbundesamt (UBA). Online verfügbar unter https://www.umweltbundesamt.de/service/uba-fragen/wieumweltfreundlich-sind-die-akkus-der-e-scooter.
- UBA (2020a): Abschätzung der Treibhausgasminderungswirkung des Klimaschutzprogramms 2030 der Bundesregierung. Teilbericht des Projektes "THG-Projektion: Weiterentwicklung der Methoden und Umsetzung der EU-Effort Sharing Decision im Projektbericht 2019 ("Politikszenarien IX")". Umweltbundesamt. Unter Mitarbeit von Ökö-Institut, Fraunhofer ISI und IREES GmbH.

- UBA (2020b): Emissionen aus Betrieben der Metallindustrie. Umweltbundesamt (UBA). Online verfügbar unter https://www.umweltbundesamt.de/daten/umweltwirtschaft/industrie/emissionen-aus-betrieben-dermetallindustrie#umweltbelastende-emissionen-aus-dermetallindustrie-, zuletzt geprüft am 05.11.2020.
- UBA (2020c): Stickstoffoxide. Umweltbundesamt (UBA). Online verfügbar unter https://www.umweltbundesamt.de/themen/luft/luftschadstoffe/stick stoffoxide, zuletzt geprüft am 05.11.2020.
- Umweltbundesamt Österreich (2016a): Ökobilanz alternativer Antriebe. Perspektiven für Umwelt & Gesellschaft. Abteilung I/5: Mobilität, Verkehr, Lärm.
- Umweltbundesamt Österreich (2016b): Ökobilanz alternativer Antriebe. Fokus Elektrofahrzeuge. Unter Mitarbeit von David Fritz und Holger et al. Heinfellner. Online verfügbar unter https://www.umweltbundesamt.at/fileadmin/site/publikationen/rep0 572.pdf.
- Vafaei, Nazanin; Ribeiro, Rita; Camarinha-Matos, Luis (2018): Selection of Normalization Technique for Weighted Average Multi-criteria Decision Making. In: *Technological Innovation for Resilient Systems*, S. 43–52. DOI: 10.1007/978-3-319-78574-5_4.
- van Basshuysen, Richard; Schäfer, Fred (2015): Handbuch
 Verbrennungsmotor. Grundlagen, Komponenten, Systeme,
 Perspektiven. 7., vollst. überarb. und erw. Aufl. Wiesbaden: Springer
 Vieweg (ATZ/MTZ-Fachbuch). Online verfügbar unter
 http://dx.doi.org/10.1007/978-3-658-04678-1.
- VCI (2012): Verband der chemischen Industrie e.V.: Basischemie 2030. Online verfügbar unter https://www.vci.de/langfassungenpdf/basischemie-2030.pdf.
- VCI (2018): Chemiewirtschaft in Zahlen 2018. Verband der chemischen Industrie e.V.

- VCI (2019): Produktionsvolumen ausgewählter petrochemischer Primärprodukte in Deutschland im Jahr 2017 (in 1.000 Tonnen). Hg. v. Verband der chemischen Industrie e.V. Online verfügbar unter https://de.statista.com/statistik/daten/studie/868074/umfrage/prod uktion-von-petrochemikalien-in-deutschland/, zuletzt geprüft am 21.02.2019.
- VCÖ-Mobilität mit Zukunft (2019): Wie viele Ressourcen werden bei der Pkw–Produktion verbraucht? - Mobilität mit Zukunft-Wien. Hg. v. Verkehrsclub Österreich (VCÖ). Online verfügbar unter https://www.vcoe.at/service/fragen-und-antworten/wie-vieleressourcen-werden-bei-der-pkw-produktion-verbraucht, zuletzt geprüft am 24.01.2019.
- VDA (2017a): WLTP Neues Testverfahren weltweit am Start. Hg. v. Verband der Automobilindustrie. Online verfügbar unter https://www.vda.de/de/services/Publikationen/wltp---neuestestverfahren-weltweit-am-start.html, zuletzt geprüft am 25.08.2020.
- VDA (2017b): WLTP weltweit am Start für realitätsnähere Ergebnisse beim Kraftstoffverbrauch. Was unterscheidet das neue Testverfahren vom alten? Hg. v. Verband der Automobilindustrie. Online verfügbar unter https://www.vda.de/de/themen/umwelt-und-klima/WLTPrealitaetsnaehere-Ergebnisse-beim-Kraftstoffverbrauch/WLTP-Wasunterscheidet-das-neue-Testverfahren-vom-alten.html, zuletzt geprüft am 26.11.2020.
- VDA (2020): Deutscher Pkw-Markt 2019 im Plus. Hg. v. Verband der Automobilindustrie. Online verfügbar unter https://www.vda.de/de/presse/Pressemeldungen/200106-Deutscher-Pkw-Markt-2019-im-Plus.html, zuletzt geprüft am 15.10.2020.
- VDI (2014): Studie: Werkstoffinnovationen f
 ür nachhaltige Mobilit
 ät und Energieversorgung. Verein Deutscher Ingenieure e.V. (VDI) -Gesellschaft Materials Engineering.

- VDI-Z (2020): Nachhaltigkeit: Herausforderungen für
 Produktionsunternehmen. Hg. v. Verein Deutscher Ingenieure e.V.
 Online verfügbar unter https://www.ingenieur.de/fachmedien/vdiz/strategie-vdi-z/drei-grosse-herausforderungen-fuerproduktionsunternehmen-und-wie-sie-geloest-werden-koennen/, zuletzt geprüft am 11.11.2020.
- Verband der Wirtschaft für Emissionshandel und Klimaschutz e.V. -Co2ncept plus (2012): Information - Die wissenschaftliche Debatte um den Klimawandel - natürlich oder anthropogen.
- Viere, T.; Moeller, A.; Prox, M. (2011): A Material flow cost accounting Approach to Improvement Assessment in LCA. In: *Int J Sustain Innov* (1:1-7).
- Viere, T.; Möller, A.; Prox, M. (2010a): A Material Flow Cost Accounting Approach to Improvement Assessment in LCA. In: *Conference Paper for the International Symposium on a Sustainable Future (ISSF 2010). Mumbai*, S. 120–127.
- Viere, Tobias; Möller, Andreas; Prox, Martina (2009): Materialflusskostenrechnung. In: Ökobilanzierung 2009 - Ansätze und Weiterentwicklungen zur Operationalisierung von Nachhaltigkeit.
- Viere, Tobias; Möller, Andreas; Schmidt, Mario (2010b): Methodische Behandlung interner Materialkreisläufe in der Materialflusskostenrechnung. In: *uwf* 18 (3-4), S. 203–208. DOI: 10.1007/s00550-010-0187-3.
- Vigon, B. W. (1994): Life-cycle assessment. Inventory guidelines and principles. Boca Raton: Lewis.
- Virvou, Maria; Kabassi, Katerina (2004): Evaluating an intelligent graphical user interface by comparison with human experts. In: *Knowledge-Based Systems* 17 (1), S. 31–37. DOI: 10.1016/j.knosys.2003.08.010.
- Vogl, Susanne (2017): Quantifizierung. In: *KZfSS Kölner Zeitschrift für Soziologie und Sozialpsychologie* 69 (2), S. 287–312. DOI: 10.1007/s11577-017-0461-2.

- Vogt, E. T. C.; Weckhuysen, B. M. (2015): Fluid catalytic cracking: recent developments on the grand old lady of zeolite catalysis. In: *Chemical Society reviews* 44 (20), S. 7342–7370. DOI: 10.1039/c5cs00376h.
- Vogt, Markus (2013): Prinzip Nachhaltigkeit. Ein Entwurf aus theologischethischer Perspektive. 3. Auflage. München: Oekom (Hochschulschriften zur Nachhaltigkeit, 39).
- Volkswagen (2019): So macht Volkswagen den ID.3 CO2-neutral. Der ID.3 ist bilanziell klimaneutral. Hg. v. Volkswagen AG. Online verfügbar unter

https://www.volkswagenag.com/de/news/stories/2019/11/how-volkswagen-makes-the-id-3-carbon-neutral.html#, zuletzt geprüft am 19.10.2020.

- Wagner, H. (1912): Selbstkostenberechnung gemischter Werke der Grofseisenindustrie. Unter besonderer Berücksichtigung des Zusammenhanges der einzelnen Teilglieder. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg. Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-47770-6.
- Wallau, Frank (2001): Kreislaufwirtschaftssystem Altauto. Eine empirische Analyse der Akteure und Märkte der Altautoverwertung in Deutschland. Wiesbaden: Deutscher Universitätsverlag (DUV Wirtschaftswissenschaft). Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-3-322-81049-6.
- Walther, Grit (2010): Nachhaltige Wertschöpfungsnetzwerke.
 Überbetriebliche Planung und Steuerung von Stoffströmen entlang des Produktlebenszyklus. Zugl.: Braunschweig, Techn. Univ., Habil.-Schr., 2009. 1. Aufl. Wiesbaden: Gabler (Produktion und Logistik).
 Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-3-8349-8643-6.
- Wang, Z. (2014): Optimization of technological process of reducing energy consumption of ethylene plant. In: *Public Commun. Sci. Technol.* (9 (18)), 136-137 (in chinese).

- WBGU (2009): Kassensturz für den Weltklimavertrag der Budgetansatz. Sondergutachten. Wissenschaftlicher Beirat Globale Umweltveränderungen (WBGU). Berlin. Online verfügbar unter http://www.wbgu.de/wbgu_sn2009.html.
- WCED (1987): Report of the World Commission on Environment and Development: Our Common Future. Online verfügbar unter https://sustainabledevelopment.un.org/content/documents/5987our -common-future.pdf.
- Weber, Eva (2014): Prozessbedingte CO2-Emissionen in Bayern. Beiträge aus der Statistik. In: Bayern in Zahlen 5. Online verfügbar unter https://www.destatis.de/GPStatistik/servlets/MCRFileNodeServlet/BY Monografie_derivate_00000079/201405A3.pdf;jsessionid=BE4A7020 B7ABC76C295FC1EE3FE355FB.
- Weck, Manfred; Brecher, Christian (2005): Werkzeugmaschinen 1.
 Maschinenarten und Anwendungsbereiche. 6., neu bearb. Aufl. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag Berlin Heidelberg (VDI-Buch). Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-3-540-28085-9.
- Weidema, Bo P. (2003): Matching Bottom-up and top-down for verification and integration of LCI databases. In: *International Workshop on LCI-Quality, Karlsruhe.* Online verfügbar unter https://lcanet.com/files/matching.pdf, zuletzt geprüft am 01.04.2020.
- Weidemann, Ulrich (2017): Montagecluster zur Strukturierung der Fahrzeugendmontage – Eine Methode zur frühzeitigen Planung und Auslegung von Endmontagelinien. Dissertation.
- Weimann, Joachim (2019): Der Ausstieg aus der Kohle. Alternativlos oder verantwortungslos? In: *Perspektiven der Wirtschaftspolitik* 20 (1), S. 14–22. DOI: 10.1515/pwp-2019-0011.
- Weitz, K. A.; Todd, J. A.; Curran, M. A.; Malkin, M. J. (1996): Streamlining Life Cycle Assessment: considerations and report on the state of practice. In: *International Journal of Life Cycle Assessment* (2), S. 79– 85.

- Westkämper, Engelbert; Löffler, Carina (2016): Strategien der Produktion. Technologien, Konzepte und Wege in die Praxis. Berlin, Heidelberg: Springer. Online verfügbar unter http://gbv.eblib.com/patron/FullRecord.aspx?p=4530194.
- Weymar, Elisabeth; Finkbeiner, Matthias (2016): Statistical analysis of empirical lifetime mileage data for automotive LCA. In: *Int J LCA* 21 (2), S. 215–223. DOI: 10.1007/s11367-015-1020-6.
- Wirtschaftsregion Lausitz GmbH (2018): Chemiestandort Schwarzheide. Online verfügbar unter http://wirtschaftsregionlausitz.de/de/wirtschaft/industrie-undtechnologieparks/chemiestandort-basf-schwarzheide-gmbh.html, zuletzt geprüft am 22.11.2018.
- Witik, Robert A.; Payet, Jérôme; Michaud, Véronique; Ludwig, Christian; Månson, Jan-Anders E. (2011): Assessing the life cycle costs and environmental performance of lightweight materials in automobile applications. In: *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing* 42 (11), S. 1694–1709. DOI: 10.1016/j.compositesa.2011.07.024.
- Wohlfarth, Katharina; Schlomann, Barbara; Jochem, Eberhard; Reitze, Felix; Schön, Michael; Toro, Felipe (2016): Sektorale Emissionspfade in Deutschland bis 2050 - Sektoren Gewerbe, Handel, Dienstleistungen (GHD)und Industrie. Hg. v. Öko-Institut e.V., Fraunhofer Institut für System- und Innovationsforschung (ISI) und Institut für Ressourceneffizienz und Energiestrategien (IREES).
- World Aluminium (2013): Global Life Cycle Inventory Data for the primary aluminium Industry. 2010 Data.
- World Steel Association (2018): Steel Statistical Yearbook 2018.
- World Steel Association (2019a): Fact Sheet: Energy use in the steel industry. Online verfügbar unter https://www.worldsteel.org/en/dam/jcr:f07b864c-908e-4229-9f92-669f1c3abf4c/fact_energy_2019.pdf.

World Steel Association (2019b): Steel Statistical Yearbook 2019. Consice Version. Online verfügbar unter

https://www.worldsteel.org/en/dam/jcr:7aa2a95d-448d-4c56-b62bb2457f067cd9/SSY19%2520concise%2520version.pdf, zuletzt geprüft am 24.07.2020.

- World Steel Association (2020): 2020 World Steel in Figures. Online verfügbar unter https://www.worldsteel.org/en/dam/jcr:f7982217cfde-4fdc-8ba0-795ed807f513/World%2520Steel%2520in%2520Figures%25202020i.p df. zuletzt aktualisiert am 24.07.2020.
- Worrell, E.; Price, L.; Neelis, M.; Galitsky, C.; Nan, Z. (2008): World Best Practice Energy Intensity Values for Selected Industrial Sectors.
- Worrell, E.; van Gent, P.; Neelis, M.; Blomen, E.; Masanet, E. (2009): Energy efficiency improvement and cost saving opportunities for the US Iron and Steel Industry an ENERGY STAR(R) Guide for Energy and Plant Managers. Ernest Orlando Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkley.
- Worrell, E.; van Heijningen, R.J.J.; Castro, J.F.M. de; Hazewinkel, J.H.O.; Beer, J. G. de; Faaij, A.P.C.; Vringer, K. (1994): New gross energyrequirement figures for materials production. In: *Energy* 19 (6), S. 627–640. DOI: 10.1016/0360-5442(94)90003-5.
- Wuebbenhorst, Klaus L. (1984): Konzept der Lebenszykluskosten. Klaus L. Wübbenhorst ; Grundlagen, Problemstellungen u. technologische Zusammenhänge. Darmstadt: Verl. für Fachliteratur (Betriebswirtschaften).
- WVMetalle (2018): Metallstatistik 2018. Hg. v. WirtschaftsVereinigung Metalle. Online verfügbar unter https://www.wvmetalle.de/fileadmin/uploads/public/Metallstatistik/ Metallstatistik_fuer_2018.pdf, zuletzt geprüft am 22.06.2020.
- Xiang, Dong; Qian, Yu; Man, Yi; Yang, Siyu (2014a): Techno-economic analysis of the coal-to-olefins process in comparison with the oil-toolefins process. In: *Applied Energy* 113, S. 639–647. DOI: 10.1016/j.apenergy.2013.08.013.

- Xiang, Dong; Yang, Siyu; Li, Xiuxi; Qian, Yu (2015): Life cycle assessment of energy consumption and GHG emissions of olefins production from alternative resources in China. In: *Energy Conversion and Management* 90, S. 12–20. DOI: 10.1016/j.enconman.2014.11.007.
- Xiang, Dong; Yang, Siyu; Liu, Xia; Mai, Zihao; Qian, Yu (2014b): Technoeconomic performance of the coal-to-olefins process with CCS. In: *Chemical Engineering Journal* 240, S. 45–54. DOI: 10.1016/j.cej.2013.11.051.
- Yang, Yi; Guo, Yao-qi; Zhu, Wen-song; Huang, Jian-bai (2019): Environmental impact assessment of China's primary aluminum based on life cycle assessment. In: *Transactions of Nonferrous Metals Society* of China 29 (8), S. 1784–1792. DOI: 10.1016/S1003-6326(19)65086-7.
- Yao, Yuan; Graziano, Diane J.; Riddle, Matthew; Cresko, Joe; Masanet, Eric (2015): Understanding Variability To Reduce the Energy and GHG Footprints of U.S. Ethylene Production. In: *Environmental science & technology* 49 (24), S. 14704–14716. DOI: 10.1021/acs.est.5b03851.
- Yao, Yuan; Graziano, Diane J.; Riddle, Matthew; Cresko, Joe; Masanet, Eric (2016): Prospective Energy Analysis of Emerging Technology Options for the United States Ethylene Industry. In: *Ind. Eng. Chem. Res.* 55 (12), S. 3493–3505. DOI: 10.1021/acs.iecr.5b03413.
- Yellishetty, Mohan; Mudd, Gavin M.; Ranjith, P. G.; Tharumarajah, A. (2011): Environmental life-cycle comparisons of steel production and recycling. Sustainability issues, problems and prospects. In: *Environmental Science & Policy* 14 (6), S. 650–663. DOI: 10.1016/j.envsci.2011.04.008.
- Zadeh, L. (1963): Optimality and Non-Scalar-Valued Performance Criteria. In: *IEEE Trans Autom Control*, S. 59–60.
- Zhang, Hongshen; Chen, Ming (2014): Current recycling regulations and technologies for the typical plastic components of end-of-life passenger vehicles. A meaningful lesson for China. In: J Mater Cycles Waste Manag 16 (2), S. 187–200. DOI: 10.1007/s10163-013-0180-3.

- Zhao, R. (2012): Simulation-Based Environmental Cost Analysis for Workin-Process. In: *Int. j. simul. model.* 11 (4), S. 211–224. DOI: 10.2507/IJSIMM11(4)4.218.
- Zhao, Zhitong; Liu, Yong; Wang, Feng; Li, Xuekuan; Deng, Shuping; Xu, Jie; Wei, Wei (2017): Life cycle assessment of primary energy demand and greenhouse gas (GHG) emissions of four propylene production pathways in China. In: *Journal of Cleaner Production* 163, S. 285–292. DOI: 10.1016/j.jclepro.2015.12.099.
- Zimmer, Konrad (2016): Entscheidungsunterstützung zur Auswahl und Steuerung von Lieferanten und Lieferketten unter Berücksichtigung von Nachhaltigkeitsaspekten. Dissertation. Karlsruher Institut für Technologie.
- Zimmer, Konrad; Fröhling, Magnus; Breun, Patrick; Schultmann, Frank (2017): Assessing social risks of global supply chains. A quantitative analytical approach and its application to supplier selection in the German automotive industry. In: *Journal of Cleaner Production* 149, S. 96–109. DOI: 10.1016/j.jclepro.2017.02.041.
- Zimmermann, Hans-Jürgen; Gutsche, Lothar (1991): Multi-Criteria Analyse. Einführung in die Theorie der Entscheidungen bei Mehrfachzielsetzungen. Berlin, Heidelberg: Springer (Heidelberger Lehrtexte Wirtschaftswissenschaften). Online verfügbar unter http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-58198-4.
- Ziolkowska, Jadwiga R. (2013): Evaluating sustainability of biofuels feedstocks. A multi-objective framework for supporting decision making. In: *Biomass and Bioenergy* 59, S. 425–440. DOI: 10.1016/j.biombioe.2013.09.008.