煤制甲醇耦合 CCUS 技术的全过程碳排放 核算研究

吴天富¹, 金炜玲^{2,3}, 周 斌^{1,4}, 任亚红⁵, 廖振良^{1,2,3,4,*}

(1. 新疆大学 建筑工程学院,新疆 乌鲁木齐 830046; 2. 同济大学 碳中和研究院,上海 200092; 3. 同济大学 环境科学与工程学院,上海 200092; 4. 新疆大学 西北能源碳中和教育部工程研究中心,新疆 乌鲁木齐 830046; 5. 新疆广汇新能源有限公司,新疆哈密 839303)

摘要:煤制甲醇是甲醇生产的主要方式,但其高碳排放特性严重制约了行业的绿色低碳转型。尽管 CO₂ 捕集、利用与封存(CCUS)技术被视为实现大规模碳减排的有效手段,但其自身的能耗与泄漏风险会影响净减排效果。因此,开展全过程碳排放核算研究并科学评估 CCUS 技术的实际减排效果,对制定有效的减排措施至关重要。然而,煤制甲醇耦合 CCUS 技术的全过程工况复杂,且存在碳核算标准和指南难以应用、减排核证体系不完善等问题。为此,本研究构建了煤制甲醇耦合 CCUS 技术的全过程碳排放核算体系,旨在填补方法上的空白并准确评估 CCUS 技术的实际减排效果。通过界定系统边界、分层分类核算并结合 Aspen Plus 流程模拟,解决了传统方法在碳转移场景中的应用盲区。在此基础上,通过敏感性分析,探索了不确定因素对碳排放核算结果的影响,评价核算结果的可靠性和稳健性。基于某年产 120 万 t 煤制甲醇的典型工业案例,分析结果表明该案例的碳排放强度为 3.00 t CO₂/t 甲醇,而耦合 CCUS 技术后降至 1.88 t CO₂/t 甲醇;尽管该案例中 CO₂ 捕集率达到 83.1%,但受 CCUS 技术自身碳排放的影响,净减排率仅为 37.8%。进一步分析指出,为减排效益最大化,需对产生 CO₂ 的煤气化单元及捕集 CO₂ 的酸性气体脱除单元的操作条件进行协同优化。案例研究表明,本研究提出的核算体系能够为煤制甲醇及其他类似的高碳工业过程提供科学有效的碳核算方法,明确碳排放特征,并准确评估 CCUS 技术的实际减排效果,为系统减排优化提供了理论依据。

关键词: 煤制甲醇; CCUS 技术; 碳排放核算; 碳减排; Aspen Plus 模拟

中图分类号: X701 文献标识码: A

Carbon Emission Accounting of the Entire Process of Coal-to-Methanol Coupled with CCUS Technology

WU Tianfu¹, JIN Weiling^{2,3}, ZHOU Bin^{1,4}, REN Yahong⁵, LIAO Zhenliang^{1,2,3,4,*}

- (1. College of Civil Engineering and Architecture, Xinjiang University, Urumqi 830046, China; 2. Institute of Carbon Neutrality, Tongji University, Shanghai 200092, China; 3. College of Environmental Science and Engineering, Tongji University, Shanghai 200092, China; 4. Engineering Research Center of Northwest Energy Carbon Neutrality of Ministry of Education, Xinjiang University, Urumqi 830046, China;
 - 5. Xinjiang Guanghui New Energy Co., Ltd., Hami 839303, China)

Abstract: Coal-to-methanol remains the dominant industrial pathway for methanol production; however, its significant carbon emissions pose major challenges to the chemical industry's transition toward green and low-carbon development. As global methanol demand continues to grow, addressing

收稿日期: 2025-10-29 修回日期: 2025-11-14 接受日期: 2025-11-16 **DOI**: 10.20078/j.eep.20251111

基金项目: 同济大学碳中和研究院资助课题(20230002); 国家社会科学基金重大项目(21&ZD133)

第一作者: 吳天富(2002—), 男, 黑龙江哈尔滨人, 硕士研究生, 主要研究方向为人工环境工程。E-mail; 107552401524@stu.xju.edu.cn *通讯作者: 廖振良(1970—), 男, 江西抚州人, 教授, 主要研究方向为环境系统工程。E-mail; 04150@tongji.edu.cn

the environmental burden of coal-based production has become increasingly critical. Carbon capture, utilization, and storage (CCUS) is widely recognized as a promising solution for large-scale emission reduction. However, its high energy consumption, process complexity, and potential leakage risks can offset some of the net climate benefits. Therefore, a comprehensive and scientifically robust carbon emission accounting framework is essential for accurately evaluating the mitigation potential of CCUS across the entire coal-to-methanol value chain. Integrating CCUS into coal-to-methanol systems introduces a range of challenges due to complex inter-unit interactions and the nonlinear behavior of material and energy flows. Existing carbon accounting standards are often difficult to apply directly, as they fail to capture internal carbon transfers among subsystems and overlook feedback mechanisms induced by CCUS. To address these limitations, this study develops a full-process carbon emission accounting framework tailored for coal-to-methanol systems with integrated CCUS. The framework aims to fill current methodological gaps, enhance transparency and comparability of emission data, and support scientific evaluation of emission reduction performance at both process and system levels. The framework defines system boundaries encompassing raw material input, syngas generation, methanol synthesis, purification, CCUS operation, and product delivery. Layered and categorized accounting methods are applied to systematically trace carbon sources, flows, and sinks throughout each stage. To improve accuracy and represent process dynamics, the framework is coupled with Aspen Plus process simulations, allowing real-time tracking of carbon flows under various operational scenarios. This coupling overcomes limitations of static accounting approaches and enables quantitative assessment of the impact of process integration on carbon balance. Sensitivity analysis is conducted to evaluate the influence of uncertain parameters on accounting results, thereby assessing the robustness of the proposed method. A case study of an industrial-scale coal-to-methanol plant with an annual capacity of 1.2 million tons validates the framework. Results indicate that the baseline carbon emission intensity of the conventional process is 3.00 tons of CO₂ per ton of methanol, which decreases to 1.88 tons after CCUS integration. Despite an 83.1% CO₂ capture rate, the net emission reduction rate is only 37.8% due to emissions from CCUS operations. Further analysis reveals that maximizing mitigation potential requires coordinated optimization of both the gasification and acid gas removal units. Overall, the proposed framework provides a rigorous and generalizable approach for carbon emission assessment in coal-to-methanol and other carbon-intensive industries.

Keywords: Coal-to-methanol; CCUS technology; Carbon emission accounting; Carbon emission reduction; Aspen Plus simulation

0 引 言

伴随着社会经济与技术的发展,全球对于一次能源的需求持续上涨^[1]。据统计,2022年我国碳排放量累计达110亿t,约占全球碳排放量的28.87%,是全球温室气体排放的主要国家之一^[2]。温室气体主要来自化石能源的消耗,而我国最主要的化石消耗能源是煤炭^[3]。煤制甲醇是煤化工行业中的重要组成部分,也是我国获取甲醇的主要方式之一^[4]。然而传统煤制甲醇工艺涉及众多技术环节,其碳排放量亦会受到多种因素的影响^[5],存在碳排放强度高、能耗大等问题,亟待能源转型

和技术革新。在现有的碳减排技术中, CCUS 技术被视为实现大规模低碳和净零排放的重要技术手段。然而, 目前针对煤化工行业的碳排放核算研究仍显不足, 对 CCUS 技术的减排量化研究较为有限, 仅有一些指导性和框架式的规范或指南^[6]。随着全国碳市场于 2021 年正式启动^[7], 对企业碳排放精准量化的需求也不断提升, 开发科学全面的碳排放核算方法已成为当务之急。基于此, 本文将围绕煤制甲醇耦合 CCUS 技术的全过程展开碳排放核算及减排优化研究, 为制订减排措施提供坚实的理论依据和数据支撑。

目前,工业合成甲醇主要是通过 CO 与 H₂ 发

生化学反应(式(1))。煤制甲醇即以煤为原料,产 生以 CO 和 H₂ 为主的粗合成气,再通过水煤气变 换反应(式(2))调节其氢碳比,最终合成甲醇的 过程。

$$CO + 2H_2 \rightarrow CH_3OH$$
 (1)

$$CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2 \tag{2}$$

煤的高碳属性导致大量未被利用的碳元素最终以 CO₂ 的形式排放。据统计, 化工行业的 CO₂ 排放量约占我国总排放量的 10%, 其中甲醇行业的 CO₂ 排放量占化工行业的 17.8% ^[8]。

CCUS 技术因其规模化减排潜力被视为核心 解决方案。根据国际能源署(International Energy Agency, IEA)^[9] 和政府间气候变化专门委员会(Intergovernmental Panel on Climate Change, IPCC) [10] 的估算, CCUS 技术对实现全球气温上升控制在 2 ℃ 目标的基准贡献度能达到 15%~20%。煤化 工行业作为高浓度碳排放源,通常适合采用物理 吸收法捕集 CO2[11]。利用 CO2在低温、高压条件 下具有较高溶解度的特性,将其从气体混合物中 分离^[12]。捕集后的 CO₂ 主要用于地质和化工行 业[13], 其中利用 CO₂提高石油采收率(Carbon Dioxide Enhanced Oil Recovery, CO2-EOR) 技术具 有较大潜力, 我国现已推进 69 个以 CO₂-EOR 为 主的 CCUS 示范项目[14]。然而, CO₂ 具有较强的 渗透性和流动性,通过井壁、地质缺陷等泄漏至环 境中的风险不容忽视[15]。

为规范碳排放管理,国内外颁布了如《工业企业温室气体排放核算和报告通则》(GB/T 32150—2015)和《Greenhouse Gases》(ISO 14064)等碳排放核算标准,为各行业的碳排放核算工作提供了统一依据,也为科学制定碳管理和减排措施奠定了基础。然而,煤制甲醇与 CCUS 技术耦合后,系统内同时存在碳排放、碳转移与碳利用过程,导致系统边界复杂。现有碳排放核算方法难以应用于此类复杂系统,而针对煤制甲醇耦合 CCUS 技术的全过程碳排放核算体系尚未建立,CCUS 技术的实际减排效果也有待评估,煤制甲醇工艺的关键碳排放环节还未得到识别。

为填补上述研究空白,本文将构建煤制甲醇 耦合 CCUS 技术的全过程碳排放核算体系、分析 耦合系统的碳排放特征、科学评估 CCUS 技术的 实际减排效果,为煤制甲醇及类似高碳工业过程 的碳排放核算及减排优化提供科学依据。

1 方法与模型

1.1 煤制甲醇耦合 CCUS 技术全过程碳排放核算体系构建

1.1.1 确定核算边界

煤制甲醇工艺的流程如图 1 所示。

本研究划定的核算边界如图 2 所示,旨在清晰界定系统范围,避免重复计算或遗漏碳流。

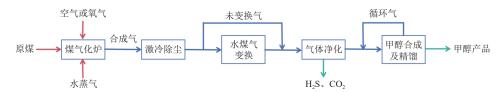


图 1 煤制甲醇工艺流程示意图

Fig. 1 Schematic of the coal-to-methanol process flow

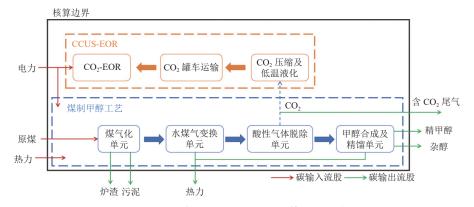


图 2 煤制甲醇耦合 CCUS 技术核算边界示意图

Fig. 2 Schematic of the accounting boundary for coal-to-methanol coupled with CCUS technology

本研究选择 CO₂-EOR 作为 CO₂产品的利用 方式,并考虑其普遍采用公路运输的方式。本研 究划定的 CCUS 技术具体核算边界如图 3 所示。

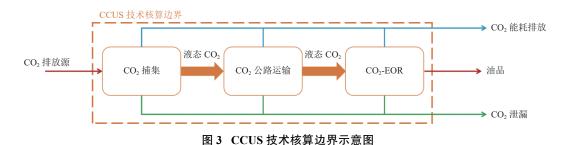


Fig. 3 Schematic of the CCUS technology accounting boundary

1.1.2 碳排放源核算方法

本研究根据核算边界,按照其功能属性对全 过程进行分层分类的碳排放核算。

(1)煤制甲醇工艺碳排放核算方法

煤制甲醇工艺碳排放 E_{CTM} 分为 4 个部分: 生产过程排放 E_{d} 、电力消耗排放 E_{e} 、热力消耗排放 E_{h} 和 CO₂ 回收利用量 E_{r} (式(3))

$$E_{\text{CTM}} = E_{\text{d}} + E_{\text{e}} + E_{\text{h}} - E_{\text{r}}$$
(3)
(a)生产过程碳排放 E_{d}

生产过程碳排放是由原料煤发生一系列反应 所引起的碳排放,可以根据整体物质的输入与输 出的碳质量平衡进行计算(式(4)):

$$E_{\rm d} = \left\{ \sum (AD_{\rm coal} \times CC_{\rm coal}) - \left[\sum (AD_p \times CC_p) + \sum (AD_w \times CC_w) \right] \right\} \times \frac{44}{12}$$
(4)

式中: E_d —生产过程碳排放量, kg CO_{2eq}/h ;

AD_{coal}——原煤消耗量, kg/h;

CCcoal——原煤含碳量, kg/h;

 AD_p 一产品 p 的产出量, 固液产品, t; 气体产品, Nm^3 ;

 CC_p 一产品 p 的含碳量, 固液产品, t C/t; 气体产品, t C/ \int Nm³:

 AD_{w} ——废物 w 的产出量, t;

 CC_w ——废物 w 的含碳量, t C/t。

(b)电力消耗碳排放 E。和热力消耗碳排放 E。

工艺过程中设备会消耗大量的电力或热力, 间接导致上游生产方的碳排放,采用排放因子法 进行计算(式(5)):

$$E = (AD_{\rm in} - AD_{\rm out}) \times EF \tag{5}$$

式中: E—电力或热力净消耗引起的碳排放量, $kg CO_{2-eq}/h$;

ADin——消耗总电力, kW·h; 消耗总热力, GJ;

 AD_{out} 一产生总电力, $kW \cdot h$; 产生总热力, GJ; EF—全国化石能源电力碳排放因子, $0.8426 kg CO_2/(kW \cdot h)$; 国家发展和改革委员会颁

布的《工业其他行业企业温室气体排放核算方法与报告指南(试行)》提供的热力碳排放因子缺省值为 0.11 t CO₂/GJ。

(c)CO₂ 回收利用量E_r

捕获的高浓度 CO_2 尾气, 在计算碳排放时需 予以扣除, CO_2 -EOR 中回收外供的为液态 CO_2 , 按式(6)计算。

$$E_{\rm r} = M_{\rm CO_2} \times PUR_{\rm CO_2} \tag{6}$$

式中: E_r —回收利用的 CO_2 量, $kg CO_{2-pq}/h$;

 M_{CO_2} ——回收外供的 CO_2 液体质量, kg_{\circ}

 PUR_{CO_2} ——回收外供的 CO_2 质量分数, %;

(2)CO₂-EOR 碳排放核算

 CO_2 -EOR 碳排放核算分为 3 个部分: CO_2 捕集排放 E_{ce} 、 CO_2 运输排放 E_{tre} 和 CO_2 -EOR 排放 E_{ue} (式(7)):

$$E_{\text{CCUS}} = E_{\text{ce}} + E_{\text{tre}} + E_{\text{ue}} \tag{7}$$

(a)CO₂捕集碳排放E_{ce}

 CO_2 捕集碳排放核算主要是捕集设备消耗电力或热力产生的间接碳排放,采用排放因子法进行计算(式(8)):

$$E_{ce} = AD_{e} \times EF_{ele} + AD_{h} \times EF_{h}$$
 (8)

式中: E_{ce} ——捕集过程的碳排放量, kg CO_{2-eq}/h ;

 EF_{ele} —电力碳排放因子;

ADe—捕集过程耗电量,kW·h;

AD_h——捕集过程耗热量,GJ;

 EF_b ——热力碳排放因子。

(b)CO₂ 运输碳排放 E_{tre}

主要来源于交通工具消耗的化石能源以及槽车装卸损耗产生的 CO, 泄漏量(式(9)~(11)):

$$E_{\text{tre}} = AD_{\text{fuel}} \times EF_{\text{fuel}} \times d + E_{\text{trleak}} \tag{9}$$

$$EF_{\text{fuel}} = NCV_{\text{fuel}} \times CC_{\text{fuel}} \times OF_{\text{fuel}} \times \frac{44}{12}$$
 (10)

$$E_{\text{trleak}} = Q_{\text{in}} - Q_{\text{out}} \tag{11}$$

式中: E_{tre} —— CO_2 运输过程的碳排放量, kg CO_{2-eq}/h ;

 AD_{fuel} ——化石能源消耗量, kg;

 EF_{fuel} ——化石能源碳排放系数, kg CO_2 / (kg·km);

d——运输距离, km;

NCV_{fuel}——化石燃料平均低位发热量,液体燃料单位为 MJ/kg;

 CC_{fuel} ——化石燃料单位热值含碳量, kg $\mathrm{CO_2}/$ MJ;

 OF_{fuel} ——化石燃料的碳氧化率,%;

 E_{trleak} ——运输过程的泄漏量, kg CO₂;

 Q_{in} ——装载运输的 CO_2 量, kg;

 Q_{out} —利用地点卸载的 CO_2 量, kg。

(c)CO₂-EOR 碳排放E_{ue}

CO₂-EOR 碳排放主要是由驱油设备耗能及封存后的泄漏产生。CO₂ 的井筒泄漏可能发生在井筒内的任何位置,表现出不确定性^[16],且具有多源、多途径、影响周期长、影响范围广泛的特点^[17]。现存实施的 CO₂-EOR 项目的 CO₂ 泄漏数据不足,故采用 CO₂ 封存率指标进行计算(式(12)~(14))。

$$E_{ue} = E_{EOR-e} + E_{EOR-leak} \tag{12}$$

$$E_{\text{EOR-e}} = AD_{\text{EOR-e}} \times EF_{\text{ele}} \tag{13}$$

$$E_{\text{EOR-leak}} = E_{\text{r}} \times f \tag{14}$$

式中: E_{ue} —— CO_2 -EOR 过程的碳排放量, kg CO_{2-eq}/h ;

 E_{EOR-e} —驱油电耗引起的碳排放量, kg CO_{2-eo}/h ;

 $E_{\text{EOR-leak}}$ —— CO_2 驱油封存过程中的泄漏量, $\text{kg CO}_{2\text{-eq}}/\text{h};$

AD_{EOR-e}——设备耗电量, kW·h;

f—— CO_2 的封存率,%。

1.2 煤制甲醇工艺流程模拟

本研究借助 Aspen Plus 软件对煤制甲醇工艺进行稳态模拟,以精准获取碳排放核算所需的物料与能量数据,进而准确评估各个环节的碳排放情况。

模拟基于新疆某化工企业年产 120 万 t 甲醇的生产工艺, 年实际生产时间计 7 200 h, 原料煤消耗量约为 267.8 t/h, 作出以下假设:

(1)生产过程处于稳态,投入原煤量和煤质

恒定;

- (2)各单元操作均达到热力学平衡;
- (3)合成气主要组分为 CO、H₂、CO₂、N₂、H₂S、COS、CH₄和 H₂O;
 - (4)消耗的电力和热力均为外购;
- (5)重点关注工艺过程中的物料流动,简化热集成过程。

1.3 敏感性分析

为探究关键工艺参数对系统碳排放的影响, 在传统流程模拟的基础上,借助 Aspen Plus 软件 得到不同工艺参数模拟运行下的物流结果。采用 敏感性分析,研究输入变量对系统输出的影响,进 而制定高效的减排策略。

敏感性分析可以考察碳排放核算结果对不确定变量的响应情况,识别关键因素,提高模型的可靠性和稳定性。敏感性分析在数学建模、工程优化和风险评估中具有重要作用,尤其在不确定性较高的系统中,能够提供关键决策支持。

2 带有碳捕集的典型煤制甲醇工艺流程模拟

2.1 煤气化单元模拟

原料煤与水混合通过磨浆机产生质量浓度为65%的水煤浆,与流量为7347kmol/h、温度40℃、压力8.1 MPa的纯氧在气化炉内以1350℃、6.5 MPa的条件反应生成高温合成气。粗合成气降温并分离炉渣后进入水洗塔,洗掉灰分物质后送入下一单元,流程如图4所示。

将模型输出结果与实际数据对比见表 1,模拟结果与参考数据吻合良好,验证了模型的可靠性。H,S 与 N,由于浓度较低,其绝对误差可接受。

2.2 水煤气变换单元模拟

粗合成气分离出冷凝液后分为 2 股,一股预热至 265 $^{\circ}$ 后进入装有 Co-Mo 催化剂的变换反应器,反应温度为 415 $^{\circ}$ C,操作压力为 6.28 MPa。输出的合成气降温后与另一股未变换的合成气混合,降温至 40 $^{\circ}$ C 后进入下一个单元,流程如图 5 所示。

该单元的模拟结果及验证对比见表 2,模拟结果与参考数据吻合良好,验证了模型的可靠性。 N₂和 COS 由于浓度较低,结果偏差的影响更显著, 但是其绝对误差在工业生产过程的控制范围内。

2.3 酸性气体脱除单元模拟

低温甲醇洗工艺主要分为酸性气体吸收和溶 剂再生 2 个过程。合成气预冷至-20 ℃ 后从吸收

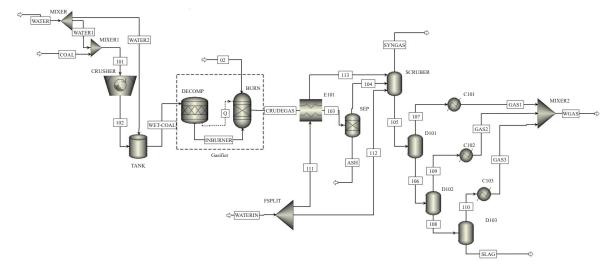


图 4 煤气化单元模拟流程图

Fig. 4 Simulation flow diagram of the coal gasification unit

表 1 煤气化单元模拟结果及验证

Table 1 Simulation results and validation of the coal gasification unit

组别	温度/℃	压力/MPa				摩尔组	且成/%			
组別	価度/ G	/E/J/WIFa	H ₂	СО	CO ₂	CH ₄	H ₂ O	H_2S	N ₂	COS
模拟数据	240	6.4	14.10	21.85	5.24	0	58.27	0.27	0.25	0.02
文献数据[18]	240	6.5	14.01	21.37	6.15	0	57.31	0.14	0.46	0.02
相对误差/%	0	1.54	0.64	2.25	14.80	0	1.68	92.86	45.65	0

注:数据由合作企业提供,经授权使用。

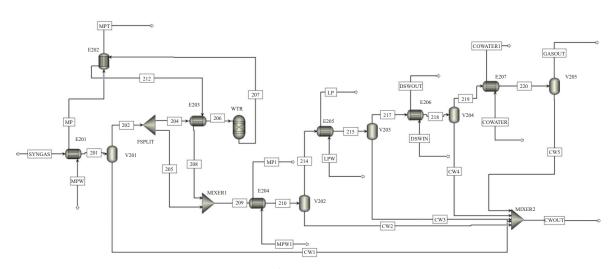


图 5 水煤气变换单元模拟流程图

Fig. 5 Simulation flow diagram of the water-gas shift unit

塔底部进入,与从塔顶送入的-50 ℃ 低温甲醇溶液逆流接触,去除 CO_2 和 H_2S 后的混合气进入下一单元。甲醇溶液进入 H_2S 浓缩塔解吸出 CO_2 ,再进入甲醇热再生塔得到甲醇溶液循环使用。带有碳捕集系统的低温甲醇洗工艺主要在吸收塔与

 H_2S 浓缩塔处增加了回收 CO_2 的解吸塔, 如图 6 所示。

为使捕集的 CO₂ 便于运输与利用, 需将其压缩至液态。参考化工企业 10 万 t/a CCUS 示范项目, 通过 3 级压缩, 采用氨冷冻循环系统将 CO₂

表 2 水煤气变换单元模拟结果及验证

Table 2 Simulation results and validation of the water-gas shift unit

数据来源	温度/℃	压力/MPa				摩尔组	成/%			
XI/h / N/////////////////////////////////	価及/ C	压力/MIFa	H ₂	СО	CO ₂	CH ₄	H ₂ O	H ₂ S	N ₂	COS
模拟数据	40	6.28	47.90	19.60	31.28	0	0.15	0.22	0.47	0.01
工业数据	40	6.10	44.50	21.10	32.80	_	_	_	0.40	0.02
相对误差/%	0	2.95	7.64	7.11	4.63	_	_	_	17.5	50.00

注:数据由合作企业提供,经授权使用。

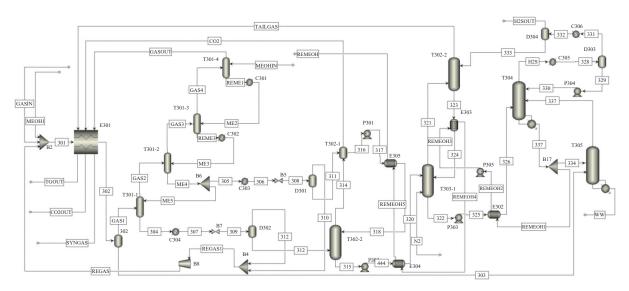


图 6 带有碳捕集系统的酸性气体脱除单元模拟流程图

Fig. 6 Simulation flow diagram of the acid gas removal unit with carbon capture system

从 20.6 $^{\circ}$ $^{\circ}$ $^{\circ}$ 0.1 MPa 的状态压缩液化至 $^{\circ}$ 2.0 MPa, 流程如图 7 所示。

该单元的模拟结果见表 3,模拟结果与参考数据吻合良好,验证了模型的可靠性。N₂由于浓度

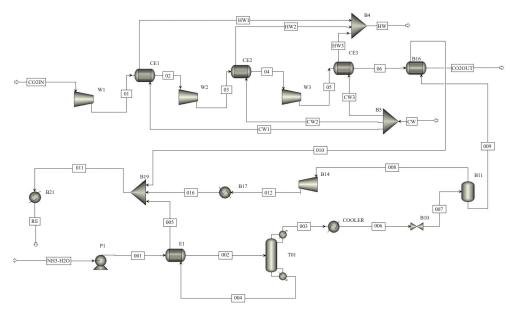


图 7 CO₂ 压缩及液氨循环冷却过程模拟流程图

Fig. 7 Simulation flow diagram of CO₂ compression and liquid ammonia cooling process

表 3 酸性气体脱除单元净合成气模拟结果及验证

Table 3 Simulation results and validation of net synthesis gas from the acid gas removal unit

数据来源	温度/℃	压力/MPa				体积分	数/%			
奴 /店木/你	価/支/ C	压力/MPa	H ₂	СО	CO ₂	CH ₄	H ₂ O	H ₂ S	N ₂	COS
模拟数据	20.60	3.0	66.84	27.50	4.78	0.33	0	0	0.55	0
工业数据	27.00	2.8	70.33	27.56	_	_	0	0	0.37	0
相对误差/%	23.70	7.14	4.96	0.22	_	_	0	0	48.65	0

注:数据由合作企业提供,经授权使用。

较低,其绝对误差可接受,而温度偏差值在工业生产过程的控制范围内。

2.4 甲醇合成及精馏单元模拟

净合成气先将混合气压缩至 8.84 MPa, 再预 热到 235 ℃ 左右, 在催化剂的作用下合成甲醇。 得到的粗甲醇减压至 0.5 MPa 进行闪蒸后送入预精馏塔, 塔顶气体经过二级冷凝后得到甲醇溶液, 预热至 125 ℃ 左右送入加压塔, 最后输送到常压塔得到精甲醇产品, 流程如图 8 所示。

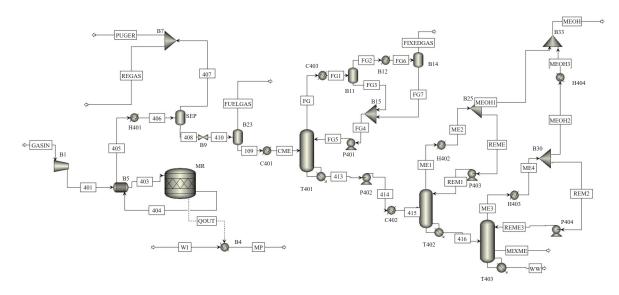


图 8 甲醇合成及精馏单元模拟流程图

Fig. 8 Simulation flow diagram of the methanol synthesis and distillation unit

模拟物料结果及模型验证结果见表 4,模拟结果与参考数据吻合良好,验证了模型的可靠性。粗甲醇中除 CH₃OH 外的其他组分由于浓度较低,其绝对误差在工业生产过程的控制范围内。

2.5 模拟结果

模拟的工艺流程为年产 118 万 t 精甲醇, 符合 预期设计指标, 整体的物料衡算结果见表 5。

3 结果与讨论

3.1 碳排放核算分析讨论

3.1.1 煤制甲醇碳排放核算结果

对未耦合 CCUS 的传统煤制甲醇工艺进行碳排放核算时,热力消耗部分未计入 CO₂ 压缩及低

温液化产生的能耗,核算结果见表6。

结果显示, 煤制甲醇工艺碳排放约为 3.0 t CO₂/t 甲醇。相关研究表明^[19], 煤化工行业生命周期碳足迹在 2.661~3.555 t CO₂/t 甲醇范围内。因此, 核算结果与现有研究相符, 在合理范围内。

3.1.2 CO₂-EOR 碳排放核算结果

我国现有的 CCUS 示范项目的运输距离大部分未超过 $100 \text{ km}^{[20]}$, 故本研究的运输距离取 100 km, 单辆车单程载重 25 t 的平均耗油量约为 0.294 kg/km。研究表明 CO_2 -EOR 项目的封存率约为 $60\%\sim70\%^{[21]}$, 本研究暂取 70%, 核算结果见表 7。 彭松水等 [22] 研究中指出 CO_2 -EOR 项目的封存能 耗为 $10 \text{ kW·h/t } CO_2$, 根据捕集的 CO_2 量即可计算

表 4 甲醇合成及精馏单元模拟物料结果及模型验证

Table 4 Simulated material results and model validation for the methanol synthesis and distillation unit

组分/参数	粗甲醇模拟结果	粗甲醇工业数据	相对误差/%	精甲醇模拟结果	精甲醇工业数据	相对误差/%
H_2	9.00 ppm	11.00 ppm	18.20	0	0	0
CO	21.00 ppm	28.00 ppm	25.00	0	0	0
CO_2	2.50	2.20	13.60	0	0	0
$\mathrm{CH_4}$	242.00 ppm	139.00 ppm	74.10	0	0	0
C_2H_6	29.00 ppm	50.00 ppm	42.00	0	0	0
N_2	44.00 ppm	105.00 ppm	58.10	0	0	0
CH ₃ OH	89.10	87.90	1.37	99.90	99.90	0
C_2H_5OH	0.26	0.20	30.00	0.10	0.10	0
CH ₃ OCH ₃	558.00 ppm	400.00 ppm	39.50	0	0	0
CH₃COOH	403.00 ppm	280.00 ppm	43.90	0	0	0
H_2O	6.90	9.50	27.40	0	0	0
温度/℃	40.00	40.00	0	40.00	40.00	0
压力/MPa	0.50	0.50	0	0.13	0.10	30
			-			

注:数据由合作企业提供,经授权使用;表中ppm为10⁻⁶。

表 5 带有碳捕集系统的煤制甲醇工艺关键物料模拟结果

 $\textbf{Table 5} \quad \textbf{Simulation results of key materials in the coal-to-methanol process with carbon capture system} \qquad \qquad t/h$

組分 組合成气 変換合成气 净合成气 精甲醇 H ₂ 14.71 23.72 23.52 0 CO 267.16 140.50 134.47 0 CO ₂ 205.28 400.02 36.61 0 CH ₄ 1.05 1.04 0.93 0 H ₂ S 2.77 2.60 0 0 0 H ₂ O 129.68 0.71 0 0 N ₂ 2.79 2.79 2.68 0 COS 0.26 0.12 0 0 CH ₃ OH 0 0 0 163.77 总计 623.96 571.70 198.25 163.85					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	组分	粗合成气	变换合成气	净合成气	精甲醇
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	H ₂	14.71	23.72	23.52	0
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	CO	267.16	140.50	134.47	0
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	CO_2	205.28	400.02	36.61	0
H_2O 129.68 0.71 0 0 N_2 2.79 2.79 2.68 0 COS 0.26 0.12 0 0 CH_3OH 0 0 163.77	$\mathrm{CH_4}$	1.05	1.04	0.93	0
$egin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	H_2S	2.77	2.60	0	0
COS 0.26 0.12 0 0 CH ₃ OH 0 0 0 163.77	$\mathrm{H_{2}O}$	129.68	0.71	0	0
CH ₃ OH 0 0 163.77	N_2	2.79	2.79	2.68	0
	COS	0.26	0.12	0	0
总计 623.96 571.70 198.25 163.85	CH₃OH	0	0	0	163.77
	总计	623.96	571.70	198.25	163.85

表 6 煤制甲醇碳排放核算结果

Table 6 Carbon emission accounting results for coal-to-methanol

核算类别	碳排放量/(万 t CO $_2$ · a^{-1})	比例/%
生产过程排放	281.90	79.28
电力排放	7.70	2.18
热力排放	65.90	18.54
总计	355.50	100.00

表 7 CO₂-EOR 碳排放核算结果

Table 7 Carbon emission accounting results for CO₂-EOR

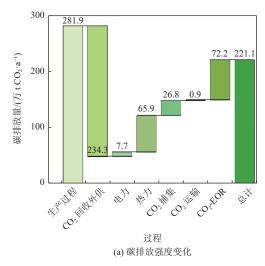
核算类别	碳排放量(万t CO ₂ ·a ⁻¹)	比例/%
CO₂捕集	26.80	26.84
CO2运输	0.90	0.85
CO ₂ -EOR	72.20	72.31
总计	99.90	100.00

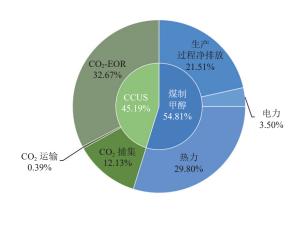
得到驱油能耗引起的碳排放量。

数据显示,采用 CCUS 技术的净减排量为 $134.4 \, \mathrm{D} \, \mathrm{t} \, \mathrm{CO}_2/\mathrm{a}$,最终煤制甲醇耦合 CCUS 技术全过程碳排放量从 $3.00 \, \mathrm{t} \, \mathrm{CO}_2/\mathrm{t} \, \mathrm{PP}$ 甲醇,净减排率为 37.8%。根据 CO₂ 捕集部分的

能耗统计计算得到捕集能耗为 $1.7~GJ/t~CO_2$, 处于 我国 CO_2 -EOR 示范项目的范围 $0.7~2.5~GJ/t~CO_2^{[23]}$ 内, 进一步支持了核算结果的可靠性。

图 9 展示了煤制甲醇耦合 CCUS 技术的全过程的碳排放结构和强度。





(b) 碳排放结构

图 9 煤制甲醇耦合 CCUS 全过程碳排放结构及强度

Fig. 9 Carbon emission structure and intensity of the whole process coupled with CCUS in coal-to-methanol

从全过程来看,煤制甲醇与 CCUS 技术耦合 后可以降低整体碳排放水平,主要在生产过程中起到减排作用,对热力和电力消耗无减排效果。这表明控制热力消耗是降低煤制甲醇碳排放的一个关键环节。值得注意的是,从碳排放结构来看,CCUS 部分的碳排放占比 45.19%,相当于煤制甲醇工艺占比 54.81% 的 0.83。因此,CCUS 在实现煤制甲醇工艺的碳减排的过程中,其产生的碳排放对整体碳排放的影响不能忽略,凸显了全面评估 CCUS 的减排效果的必要性。

3.2 CCUS 技术减排效果评估

为了更好地评估 CCUS 技术的减排效果,本研究从 CCUS 技术本身的减排能力、对煤制甲醇生产过程的减排能力及对煤制甲醇工艺的减排能力3 个角度分别进行分析,同时定义以下评价指标。

CCUS 技术本身的净减排效率 (η) :

$$\eta = \frac{E_{\text{cap}} - E_{\text{CCUS}}}{E_{\text{cap}}} \tag{15}$$

CCUS 技术对煤制甲醇生产过程的减排效率 (ε) 及净减排效率 (ε_{net}) :

$$\varepsilon = \frac{E_{\text{cap}}}{E_{\text{d}}}, \ \varepsilon_{\text{net}} = \frac{E_{\text{cap}} - E_{\text{CCUS}}}{E_{\text{d}}}$$
 (16)

CCUS 技术对煤制甲醇工艺的减排效率(φ) 及净减排效率(φ_{net}):

$$\varphi = \frac{E_{\text{cap}}}{E_{\text{CTM}}}, \quad \varphi_{\text{net}} = \frac{E_{\text{cap}} - E_{\text{CCUS}}}{E_{\text{CTM}}}$$
 (17)

CCUS 技术的额外碳排放负荷(ω)和净负荷(ω_{net}):

$$\omega = \frac{E_{\text{CCUS}}}{E_{\text{CTM}}}, \quad \omega_{\text{net}} = \frac{E_{\text{CCUS}}}{E_{\text{CTM}} + E_{\text{CCUS}} - E_{\text{cap}}}$$
 (18)

式中: E_{CTM} 、 E_{CCUS} 、 E_{d} 、 E_{cap} 分别为煤制甲醇工艺碳排放量、CCUS 技术的碳排放量、煤制甲醇工艺生产过程碳排放量和 CCUS 技术捕集的 CO_2 量。计算指标结果见表 8。

表 8 CCUS 技术减排效果评估指标结果

Table 8 Results of evaluation indicators for CCUS technology's emission reduction effect

指标	符号	数值/%
本身的净减排效率	η	57.0
对煤制甲醇生产过程的减排效率	ε	83.1
对煤制甲醇生产过程的净减排效率	$oldsymbol{arepsilon}_{ ext{net}}$	47.7
对煤制甲醇工艺的减排效率	φ	65.9
对煤制甲醇工艺的净减排效率	$arphi_{ m net}$	37.8
额外碳排放负荷	ω	28.1
额外碳排放净负荷	$\omega_{ m net}$	45.2

可以看出,评估指标反映的系统边界影响:从 CCUS 技术本身,到包含煤制甲醇生产过程,再到 全过程范围, CCUS 技术自身的碳排放和泄漏问题导致净减排效率递减, 即 η (57.0%)> ε _{net}(47.7%)> φ _{net}(37.8%)。这一结果指出, CCUS 技术具有强大的负碳能力, 但是实施过程中产生的碳排放严重影响其实际减排效果, 应进行整体性的评估。

3.3 敏感性分析

煤制甲醇工艺耦合 CCUS 技术全过程涉及众多技术环节, 其碳排放核算会由于参数取值的不同受不确定因素的影响。为了评估不确定因素对碳排放核算结果的影响, 评价核算结果的可靠性和稳健性, 根据全过程碳排放核算的过程及结果, 选取 CO₂ 的封存率与电力碳排放因子为主要的不确定性因素进行敏感性分析。

敏感因子定义为碳排放变化量与不确定因素 变化量的比值,用以衡量不确定性因素对碳排放 核算结果的影响程度。

3.3.1 CO2 封存率

在 CO₂-EOR 的利用过程中,注入岩层的 CO₂ 并不能完全封存在油藏中,部分会因为注入过程的技术问题或随时间的推移泄漏到大气中。本研究选取了 60%~70% 共 6 种封存率进行敏感性分析,结果如图 10 所示。随着封存率的提高,全过程碳排放量从 244.6 万 t CO₂/a 减少至 221.1 万 t CO₂/a,降幅 9.6%,敏感因子为 244.79, CCUS 的净减排效率由 31.0%增加至 37.8%。可见 CO₂ 的封存率会极大地影响碳排放核算结果,是全流程碳排放核算的主要影响因素。

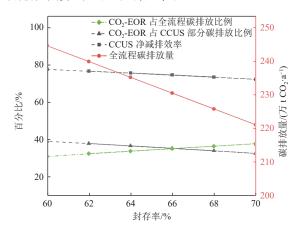


图 10 CO₂ 封存率的敏感性分析

Fig. 10 Sensitivity analysis of CO₂ sequestration rate

3.3.2 电力碳排放因子

电力碳排放因子与外购电力的上游生产活动相关,其取值会对碳排放核算的结果造成一定的影响。一般情况下,电力碳排放因子应取生产企

业所属地区电网的平均供电碳排放因子,但不同 区域或生产企业采用供电方式的不同都会导致电 力碳排放因子存在差异。表9列出了部分电力碳 排放因子的缺省值。

表 9 部分电力碳排放因子缺省值

Table 9 Default values of some power carbon emission factors

类型	电力碳排放因子 (kg CO ₂ ·(kW·h) ⁻¹)
全国电力平均碳排放因子。	0.556 8
华北区域电力平均碳排放因子 [®]	0.712 0
华东区域电力平均碳排放因子°	0.599 2
西北区域电力平均碳排放因子。	0.595 1
西南区域电力平均碳排放因子。	0.211 3
全国化石能源电力碳排放因子。	0.842 6
全国30个省份电力碳排放因子 ^b	0.266~1.096

注: a数据源于中华人民共和国生态环境部于2024年发布的《2021年二氧化碳排放因子》; b数据源于文献[24]。

取电力碳排放因子最低值 0.211 3 kg CO₂/(kW·h)和最高值 1.096 kg CO₂/(kW·h),分别得到全流程各部分碳排放分布和碳排放比例。全流程的碳排放量由 203.9 万 t CO₂/a 升高至 229.2 万 t CO₂/a,增幅 12.4%,敏感因子为 28.6,因此电力碳排放因子对全过程的碳核算影响不显著,不是主要敏感性因素。

图 11 显示全过程中存在电力消耗的部分随着电力碳排放因子的增加,碳排放量会增加;而其他环节不受影响。其中,煤制甲醇的电力部分增幅最大,增长率达到 80.7%,说明该部分对电力碳

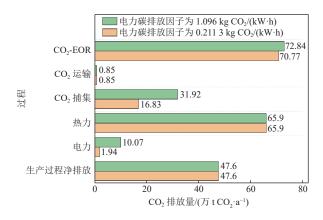


图 11 全过程在不同电力排放因子下的各部分碳排放分布 Fig. 11 Distribution of carbon emissions in different parts under varying power emission Factors

排放因子的变动非常敏感。

图 12 表明电力碳排放因子的增加会导致 CO₂ 捕集部分的碳排放比例增加,提高了碳排放负荷。因此,需要对煤制甲醇工艺的电力和 CO₂ 捕集 2 个环节采取节电措施或改变供电方式,以降低碳排放量。

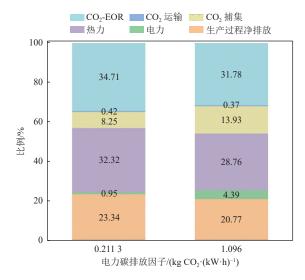


图 12 全过程在不同电力排放因子下的各部分碳排放比例 Fig. 12 Proportion of carbon emissions in different parts under varying power emission factors

4 结 论

本文以煤制甲醇耦合 CCUS 技术的全过程为研究对象,系统开展了碳排放核算与减排优化策略的研究。

与多数仅聚焦单一环节的研究不同,本研究将 CCUS 技术与煤制甲醇过程耦合,构建了全过程碳排放核算体系,弥补了现有研究对具体工艺环节碳排放核算和分析的不足,有利于揭示碳排放热点和潜在减排空间。同时得到 CCUS 技术应用于煤制甲醇领域的实际减排效果,为煤制甲醇行业的碳减排措施和 CCUS 技术的应用提供科学依据和参考价值。

借助化工模拟软件的精准模拟,提高了核算精度,结合敏感性分析方法精准识别减少碳排放的关键参数,为煤制甲醇工艺优化减排提供数据支撑。

对于某带有碳捕集系统的年产 120 万 t 煤制 甲醇的代表性案例,应用本研究所构建的核算体系分析表明,全过程的碳排放强度为 $3.0 \text{ t CO}_2/\text{t}$ 甲醇,在耦合 CCUS 技术后降至 $1.88 \text{ t CO}_2/\text{t}$ 甲醇;尽管 CO_2 捕集率达 83.1%, 但 CCUS 技术本身的碳

排放导致净减排率仅为 37.8%。敏感性分析结果 进一步表明, CO₂ 封存率对核算结果影响显著, 在 未来 CCUS 项目减排核证中需要重点关注。

综上所述,本文构建的核算体系为煤制甲醇 及类似的高碳工业过程的碳排放核算提供了科学 有效的方法、明确碳排放特征并正确评估 CCUS 技术的实际减排效果,为减排优化提供理论依据。

参考文献 (References):

- [1] Energy Institute. Statistical review of world energy 2023[EB/OL]. (2023-06-26) [2025-10-29]. https://www. energyinst.org/statistical-review/energy-transition-tracker.
- [2] 张君宇,宋猛,刘伯恩.中国二氧化碳排放现状与减排建议 [J].中国国土资源经济,2022,35(4):38-44+50. ZHANG Junyu, SONG Meng, LIU Boen. Current situation of carbon dioxide emission and suggestions for emission reduction in China[J]. Natural Resource Economics of China, 2022, 35(4):38-44+50.
- [3] JIA Zhijie, LIN Boqiang. How to achieve the first step of the carbon-neutrality 2060 target in China: The coal substitution perspective[J]. Energy, 2021, 233: 121179.
- [4] LIU Yigang, LI Guoxuan, CHEN Zhengrun, et al. Comprehensive analysis of environmental impacts and energy consumption of biomass-to-methanol and coal-to-methanol via life cycle assessment[J]. Energy, 2020, 204: 117961.
- [5] PANDEY S, SRIVASTAVA V C, KUMAR V. Comparative assessment of different grades of coal for methanol production: Simulation, optimization, environmental and economic analysis[J]. Energy, 2023, 284: 129146.
- [6] 姚星, 温心, 吴佳豪, 等. 面向碳中和的 CCUS 政策研究 [J]. 能源环境保护, 2024, 38(3): 135-144.

 YAO Xing, WEN Xin, WU Jiahao, et al. CCUS policy research for carbon neutrality[J]. Energy Environmental Protection, 2024, 38(3): 135-144.
- [7] 廖振良,沈一帆,姚强,基于项目的跨区域合作碳交易灵活机制 [J]. 能源环境保护,2023,37(2):98-105. LIAO Zhenliang, SHEN Yifan, YAO Qiang. Project-based carbon trading: A flexible mechanism to promote transregional cooperation[J]. Energy Environmental Protection,2023,37(2):98-105.
- [8] 顾宗勤: 氮肥、甲醇行业应勇于扛起碳减排重任 [EB/OL]. (2021-08-25) [2025-10-29]. http://m.ccin.com.cn:8080/detail/1dec088f3da4d72b7f5fe6 dc79ebc013/news. GU Zongqin: Nitrogen fertilizer and methanol industries should take the lead in carbon reduction efforts[EB/OL]. (2021-08-25) [2025-10-29].
 - http://m.ccin.com.cn:8080/detail/1dec088f3da4d72b7f5fe6dc79ebc013/news.
- [9] IEA. World energy outlook 2017[R]. Shanghai: International Energy Agency, 2017.

- [10] IPCC (Intergovernmental Panel on Climate Change). Global Warming of 1.5 °C. An IPCC Special Report on the impacts of global warming of 1.5 °C above pre-industrial levels and related global greenhouse gas emission pathways, in the context of strengthening the global response to the threat of climate change, sustainable development, and efforts to eradicate poverty[M]. Geneva: World Meteorological Organization, 2018.
- [11] GCCSI. The Global Status of CCS: 2019[R]. Australia: Global CCS Institute, 2019.
- [12] 魏静,邓敏,银登国,等."双碳"背景下钢铁行业 CO_2 捕集研究进展 [J]. 能源环境保护, 2025, 39(4): 1-13.
 - WEI Jing, DENG Min, YIN Dengguo, et al. Research progress on CO_2 capture in the steel industry under the dual carbon background[J]. Energy Environmental Protection, 2025, 39(4): 1–13.
- [13] 赵震宇,姚舜,杨朔鹏,等."双碳"目标下:中国 CCUS 发展现状、存在问题及建议 [J]. 环境科学, 2023, 44(2): 1128-1138. ZHAO Zhenyu, YAO Shun, YANG Shuopeng, et al. Under goals of carbon peaking and carbon neutrality: Status, problems, and suggestions of CCUS in China[J].

Environmental Science, 2023, 44(2): 1128-1138.

- [14] 张贤,杨晓亮,鲁玺.中国二氧化碳捕集利用与封存(CCUS)年度报告(2023)[R].北京:中国 21 世纪议程管理中心,全球碳捕集与封存研究院,清华大学,2023.

 ZHANG Xian, YANG Xiaoliang, LU Xi. CCUS progress in China—a status report (2023)[R]. Beijing: The Administrative Center for China's Agenda 21, Global CCS Institute, Tsinghua University, 2023.
- 术的研究进展 [J]. 安全与环境工程, 2020, 27(2): 23-34.

 WANG Xiaoqiao, MA Denglong, XIA Fengshe, et al. Research progress on leakage monitoring technology for CO₂ storage[J]. Safety and Environmental Engineering, 2020, 27(2): 23-34.

[15] 王晓桥,马登龙,夏锋社,等.封储二氧化碳泄漏监测技

- [16] LU Yanjun, FAN Qianbo, YANG Manping, et al. Research and prospect of CCUS-EOR technology and carbon emission reduction accounting evaluation[J]. Greenhouse Gases: Science and Technology, 2025, 15(1): 79–97.
- [17] 张志升,吴向阳,林千果,等. CO₂ 驱油封存泄漏的环境 风险评估和预警体系研究 [J]. 环境工程,2023,41(S2):

- 762-766.
- ZHANG Zhisheng, WU Xiangyang, LIN Qianguo, et al. Study on environmental risk assessment and warning system of CO₂ leakage during CO₂-eor and storage[J]. Environmental Engineering, 2023, 41(S2): 762–766.
- [18] 刘霞. 煤制甲醇过程的低温余热利用与碳减排工艺研究 [D]. 广州: 华南理工大学, 2016: 36-37.

 LIU Xia. The study on low temperature waste heat utilization and carbobn reduuction of coal-based methanol process[D]. Guangzhou: South China University of Technology, 2016: 36-37.
- [19] ZHU Bing, ZHOU Wenji, HU Shanying, et al. CO₂ emissions and reduction potential in China's chemical industry[J]. Energy, 2010, 35(12): 4663–4670.
- [20] 蔡博峰,李琦,林千果,等.中国二氧化碳捕集、利用与 封存(CCUS)报告(2019)[R]. 北京:生态环境部环境规划 院气候变化与环境政策研究中心,2020. CAI Bofeng, LI Qi, LIN Qianguo. China status of CO₂ Capture, Utilization and Storage (CCUS) 2019[J]. Beijing: Center for Climate Change and Environmental Policy, Chinese Academy of Environmental Planning, 2020.
- [21] 袁士义,马德胜,李军诗,等.二氧化碳捕集、驱油与埋存产业化进展及前景展望 [J]. 石油勘探与开发,2022,49(4):828-834.

 YUAN Shiyi, MA Desheng, LI Junshi, et al. Progress and prospects of carbon dioxide capture, EOR-utilization and storage industrialization[J]. Petroleum Exploration and Development, 2022,49(4):828-834.
- [22] 彭松水, 陆诗建. CCS—EOR 项目碳净减排量方法学模型 [J]. 油气田地面工程, 2015, 34(4): 9–11.

 PENG Songshui, LU Shijian. CCS-EOR Project net carbon emission reduction methodology model[J]. Oil-Gas Field Surface Engineering, 2015, 34(4): 9-11.
- [23] 张贤,李凯,马乔,等.碳中和目标下 CCUS 技术发展定位与展望 [J]. 中国人口·资源与环境,2021,31(9):29-33. ZHANG Xian, LI Kai, MA Qiao, et al. Orientation and prospect of CCUS development under carbon neutrality target[J]. China Population, Resources and Environment, 2021,31(9):29-33.
- [24] 马翠梅,李士成,葛全胜.省级电网温室气体排放因子研究 [J]. 资源科学,2014,36(5):1005-1012.

 MA Cuimei, LI Shicheng, GE Quansheng. Greenhouse gas emission factors for grid electricity for Chinese provinces[J]. Resources Science, 2014, 36(5): 1005-1012.