

煤制丙二醇生产工艺的绿色化设计及碳排放分析

王 帅¹, 朱 磊¹, 吴 乐², 康丽霞³, 刘永忠³

(1.中煤能源研究院有限责任公司, 陕西 西安 710054; 2.西北大学 化工学院, 陕西 西安 710127; 3.西安交通大学 化工学院, 陕西 西安 710049)

摘要:在“双碳”目标背景下,煤制 1,3-丙二醇(PDO)生产工艺的绿色化改造对推动煤化工行业低碳转型具有重要意义。构建了一种基于煤制 PDO 的绿色生产工艺,研究了采用可再生原料(如电解水制氢、CO₂ 变换制 CO、CO₂ 加氢制甲醇)与传统煤制 PDO 生产工艺的差异,重点分析了绿色工艺、绿氢、绿电和绿色蒸汽等低碳技术对 PDO 生产过程碳排放的影响。通过对不同情景下碳排放的对比分析,结果表明,传统煤制 PDO 生产工艺的碳排放量为 527.34 kt/a,而采用绿色合成工艺后,碳排放显著降低至 382.14 kt/a,仅为传统工艺的 72.5%,表明绿色工艺本身具有良好的减排效果。当进一步引入绿电后,碳排放降至 307.73 kt/a,较绿色合成工艺减少了 74.41 kt/a,体现出绿电在碳减排方面的积极作用。最显著的碳减排效果发生在绿电与绿色蒸汽的结合情景下,此时碳排放降至 114.49 kt/a,较传统生产工艺减少了 412.85 kt/a,仅为传统工艺的 21.7%。此外,在各个生产装置中,3-羟基丙酸甲酯合成装置的碳排放占比最大,主要来源于蒸汽消耗,而在绿色工艺情景下,引入绿色蒸汽可大幅降低该装置的碳排放。最后,PDO 绿色工艺过程中的原料乙烯消耗是主要碳排放贡献因素,其贡献率超过 88.6%,因此,未来可在原料乙烯的绿色低碳方面进一步探索,以降低整个 PDO 生产的碳排放水平。

关键词:煤制丙二醇;可再生资源;可再生原料;低碳工艺;碳排放分析

中图分类号:TQ028.1 文献标志码:A 文章编号:1006-6772(2025)03-0094-09

Greenization of a coal-to-propylene glycol production process and assesment of carbon emissions

WANG Shuai¹, ZHU Lei¹, WU Le², KANG Lixia³, LIU Yongzhong³

(1. China Coal Energy Research Institute Co. Ltd., Xi'an 710054, China; 2. School of Chemical Engineering, Northwest University, Xi'an 710127, China; 3. Department of Chemical Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049 China)

Abstract: Aiming at the "Dual Carbon" goals, the greization of a coal to 1,3-propylene glycol (PDO) production process is of great significance for promoting the low-carbon transition of the coal chemical industry. This study establishes a green production process based on coal-based PDO and investigates the differences between the use of renewable raw materials-such as hydrogen production via water electrolysis, CO₂ conversion to CO, and CO₂ hydrogenation to methanol-and the traditional coal-based PDO production process. The study focuses on analyzing the impact of green technologies, including green hydrogen, green electricity, and green steam, on the carbon emissions of the PDO production process. A comparative analysis of carbon emissions under different scenarios indicates that the carbon emissions of the traditional coal-based PDO production process amount to 527.34 kt/a. By adopting the green synthesis process, emissions are significantly reduced to 382.14 kt/a, accounting for only 72.5% of the traditional process, demonstrating the inherent emission reduction benefits of the green process. The introduction of green electricity further reduces emissions to 307.73 kt/a achieving an additional reduction of 74.41 kt/a compared to the green synthesis process, highlighting the positive role of green electricity in carbon reduction. The most significant reduction is observed in the scenario combining green electricity and green steam, where emissions drop to 114.49 kt/a - only 21.7% of the emissions from the traditional production process - representing a total reduction of 412.85 kt/a. Among all production units, the methyl 3-hydroxypropionate synthesis unit contributes the highest proportion of carbon emissions, primarily due

收稿日期:2024-12-02;策划编辑:白娅娜;责任编辑:王晓珍 DOI: 10.13226/j.issn.1006-6772.BB24120201

基金项目:国家自然科学基金联合基金项目(U24B6016);国家自然科学基金联合重点项目(22238006)

作者简介:王 帅(1987—),男,山东德州人,高级工程师,多能互补。E-mail: wangshuai@chinacoal.com

通讯作者:刘永忠(1968—),男,浙江宁波人,教授,化工系统工程和传递过程。E-mail: yzliu@mail.xjtu.edu.cn

引用格式:王帅,朱磊,吴乐,等.煤制丙二醇生产工艺的绿色化设计及碳排放分析[J].洁净煤技术,2025,31(3):94-102.

WANG Shuai, ZHU Lei, WU Le, et al. Greenization of a coal-to-propylene glycol production process and assesment of carbon emissions[J].Clean Coal Technology, 2025, 31(3): 94-102.



to steam consumption. However, in the green process scenario, the introduction of green steam can significantly reduce emissions from this unit. Additionally, ethylene consumption in the PDO green production process is the major contributor to carbon emissions, accounting for more than 88.6%. Therefore, future efforts should focus on exploring low-carbon alternatives for ethylene feedstock to further reduce the overall carbon footprint of PDO production.

Key words: coal to propylene glycol; renewable energy; renewable feedstocks; low carbon technology; carbon emissions

0 引 言

为积极应对气候变化,我国于 2020 年 9 月提出“双碳”目标,承诺在 2030 年实现碳达峰、2060 年实现碳中和^[1]。作为全球主要 CO₂ 排放国之一,我国面临气候变化带来的环境和能源安全双重挑战,影响着社会和经济的可持续发展^[2]。推动国内经济结构优化,提升清洁能源比重,特别是逐步降低煤炭在能源结构中的比例^[3],加快风能、太阳能、核能等新能源的开发,全面优化能源结构^[3],是推动高碳产业转型升级^[4]和实现“双碳”目标的必然路径^[5]。

1,3-丙二醇(PDO)是一种重要的二元醇化合物,广泛应用于化工、医药和日用化工等领域^[6]。PDO 是生产聚对苯二甲酸丙二醇酯(PTT)的关键原料,PTT 作为一种优良的工程塑料和纤维材料,常用于纺织品、地毯和工业塑料中。此外, PDO 还可用作化妆品和个人护理品中的溶剂、保湿剂、润湿剂,其还是生物基材料和可降解塑料等绿色环保产品的基础材料。

目前, PDO 的生产工艺主要包括丙烯醛水合加氢法和环氧乙烷氢甲酯化法^[7]。丙烯醛水合加氢法以丙烯醛为原料,先将丙烯醛水合生成 3-羟基丙醛,随后通过加氢反应生成 PDO^[8]。该工艺主要存在自聚、缩聚等副反应,导致产物的分离过程非常困难。此外,原料丙烯酸和中间产物 3-羟基丙醛不稳定,造成存储和运输困难等问题。而环氧乙烷氢甲酯化法^[9]首先是环氧乙烷与 CO 与甲醇反应,生成 3-羟基丙酸甲酯,再与氢气加氢反应最终生成目标产物 PDO。该方法具有转化率、选择性高等优势,是当前 PDO 的主要生产方式之一。在“双碳”目标背景下, PDO 的生产和应用迎来了新的发展契机^[10]。

为了降低碳排放,绿电、绿氢等可再生能源在煤化工过程中应用潜力巨大^[11]。针对绿电在煤化工中的应用, MENG 等^[12]研究分析了传统煤制甲醇和全绿电煤制甲醇的碳排放和单价甲醇价格,结果表明全绿电煤制甲醇过程碳排放仅为传统煤制甲醇的 12.1%,但是甲醇价格却为传统甲醇的 2.25 倍。DING 等^[13]研究了通过可再生能源驱动的直接采用

CO₂ 与氨合成尿素的方法,结果表明该技术拥有巨大的 CO₂ 减排潜力,且具有巨大的应用前景。绿电的广泛应用可为甲醇和尿素生产过程提供显著的降碳潜力。针对绿氢、绿氧在煤化工中的应用, XIE 等^[14]将绿氧耦合到煤气化装置中,同时利用绿氢调节合成气中 H₂/CO 的比例,结果表明可有效避免合成气中 CO 的损失及传统煤化工中的高 CO₂ 排放。GUO 等^[15]探讨了在我国煤化工行业中采用绿氢和绿氧的温室气体减排潜力,由于我国内蒙古、陕西、宁夏和新疆等地区煤化工产业庞大且可再生能源丰富,如果在上述地区的煤化工产业中完全采用绿氢和绿氧,将为我国煤化工行业的减碳贡献 52%。针对绿电、绿氢、绿氧在综合应用, YANG 等^[16]开发了一个风能制氢与煤基甲醇生产的耦合系统,并优化了该系统的配置,结果表明在减排方面,耦合风电系统相比于传统煤制甲醇系统一年可减少约 112t CO₂ 排放。YE 和 TSANG^[17]总结了绿氢的转化路径,提出了耦合可再生能源电解水生产绿氢进而进行氨生产的路径,结果表明耦合可再生能源,尤其是在氨生产等工业领域,展现出巨大的能源转化潜力。SHEN 等^[18]建议将可再生能源耦合入大规模煤气化工艺中,可再生能源生产的绿氢可作为后续原料,绿氧、绿氢及绿色甲醇等可作为可再生能源的存储介质,在减少化石燃料消耗与 CO₂ 排放具有较大潜力。以上研究均表明,将可再生能源、绿氢、绿氧等引入煤化工行业可显著减少总体碳排放^[19]。

通过引入绿电和绿氢降低 PDO 生产工艺的碳排放,进而实现清洁能源的高效利用,对于实现“双碳”目标具有重要意义^[20]。因此,如何高效利用电解水产生的绿氢和绿氧,进而设计 PDO 的绿色生产工艺,并定量分析绿电和绿氢降低 PDO 生产系统碳排放的效能,是构建 PDO 绿色生产工艺的关键。

笔者以构建绿色化和低碳化 PDO 生产过程为目标,着重探讨通过引入绿色生产工艺、结合绿氢、绿氧和绿电等低碳化策略,构建一种高效、清洁、可持续的 PDO 生产工艺,以期 PDO 及其产业链的低碳转型提供技术路径。

1 PDO 生产工艺流程

1.1 传统煤制 PDO 生产工艺

传统的煤制 PDO 生产过程主要涉及从煤炭气

化到最终产品的合成,其核心工艺包括空分、煤气化、甲醇合成、环氧乙烷(EO)合成、3-羟基丙酸甲酯(3-HPM)合成及 PDO 合成等多个复杂的装置和工艺单元,具体工艺过程如图 1 所示。

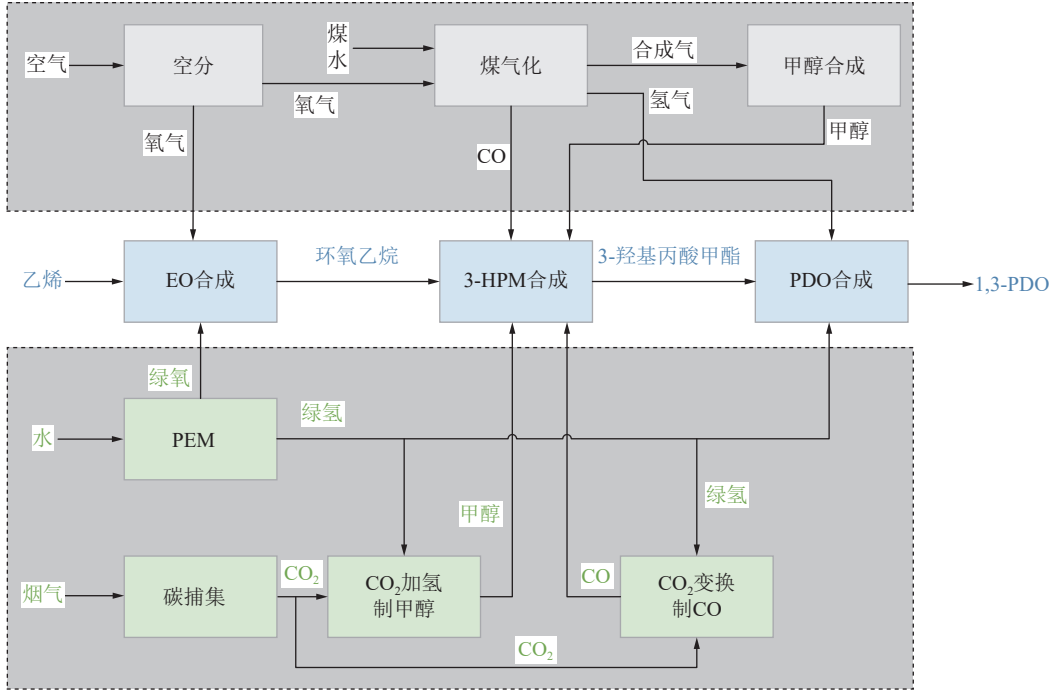


图 1 不同 PDO 的生产工艺流程比较

Fig. 1 Comparison of different production process flow of PDO

在煤气化装置中,煤炭与水蒸气和氧气反应生成合成气(主要成分为 CO、H₂)。空分装置提供氧气作为关键原料,供给煤气化装置和环氧乙烷合成装置。合成气经变换装置通过水煤气变换反应提升氢气含量,并副产 CO,这一合成气和 CO 将作为后续多个反应的原料。

合成气引入环氧乙烷合成装置合成中间体环氧乙烷。环氧乙烷在与煤气化装置生成的 CO 和甲醇合成装置合成的甲醇混合后,反应生成 3-羟基丙酸甲酯。3-羟基丙酸甲酯作为下一步反应的关键原料,与由煤气化装置产生的氢气在加氢装置中反应,最终生成 PDO。

虽然传统煤制 PDO 工艺经过多年的工业化应用具有较为稳定的生产流程和一定的经济优势,但其最大问题在于依赖于煤炭等化石能源且过程消耗了大量公用工程,导致整个生产过程伴随大量碳排放。这一工艺过程能源消耗大且排放量高,尤其是在煤气化阶段,其中碳排放主要来源于煤炭的气化和化学反应。因此,上述工艺过程的减碳降耗面临巨大挑战。

1.2 绿色 PDO 生产工艺

为降低传统 PDO 合成过程的碳排放,需采用

清洁能源和低碳技术改进 PDO 合成过程。传统工艺的绿色化策略主要包括电解水制氢、CO₂加绿氢制甲醇和变换等策略,为后续的环氧乙烷合成、3-羟基丙酸甲酯合成及 PDO 合成提供必要的绿色原料。其工艺流程如图 1 所示,核心的绿色工艺包括:

采用聚合物电解质膜电解水装置(PEM)将水分解为绿氢和绿氧。其中,绿氢作为主要原料,供给 CO₂加氢制甲醇装置、CO₂变换装置和 PDO 合成装置,用于加氢反应。绿氧则被引入环氧乙烷合成装置,用于乙烯部分氧化反应制备环氧乙烷,这一中间体为后续过程提供原料。

电解水的绿氢与 CO₂加氢制甲醇装置中的 CO₂反应,通过加氢转化过程生产甲醇。与此并行,CO₂变换装置通过水煤气变换反应,调整合成气的比例并生成 CO。甲醇和 CO 将与来自环氧乙烷合成装置的环氧乙烷混合,继续反应生成 3-羟基丙酸甲酯。最后,3-羟基丙酸甲酯与绿氢在 PDO 合成装置中进行加氢反应,最终合成 PDO。

该绿色 PDO 生产工艺的最大特点在于充分利用了绿氢和绿氧等清洁能源,减少了对传统化石能源的依赖,并且通过直接消耗 CO₂,不仅降低了生

产过程的碳排放, 而且使得 CO₂ 循环利用。此外, 绿氢和绿电的引入确保了整个生产过程的低碳化。

虽然绿色 PDO 的合成工艺与传统煤制 PDO 的工艺相似, 但由于其依赖绿氢和绿电, 在碳排放方面具有显著优势。整个过程可显著降低环境影响, 这一创新路径可为化工行业绿色低碳转型提供技术支持。

2 PDO 生产工艺过程的碳排放分析

2.1 系统边界和目标

研究的主要目的是针对传统煤制 PDO 和绿色 PDO 生产过程进行碳排放分析, 同时对比分析二者的差异, 为后续 PDO 的低碳工艺过程提供基础。为了全面分析 PDO 生产过程的碳排放, 拟采用全生命周期分析对 PDO 生产过程中直接或间接碳排放进行核算。因此, 除了考虑过程的 CO₂ 直接排放外, 还要考虑过程中原料消耗, 如煤和乙烯, 以及公用工程消耗如电、蒸汽和循环水等所引起的间接 CO₂ 排放。分析的系统边界如图 1 所示。

为了便于对比分析传统煤制 PDO 与绿色 PDO 生产工艺碳排放的差别, 以 10 万 t/a 的 PDO 为功能单元, 最终计算并对比 10 万 t/a 煤制 PDO 和 10 万 t/a 绿色 PDO 的碳排放特性。

2.2 清单分析

传统煤制 PDO 的主要原料包含煤、乙烯等原料, 主要产品为 PDO 及其他副产品; 而绿色 PDO 主要原料为乙烯、CO₂ 等, 由于后续的 PDO 合成过程与煤制 PDO 类似, 因此主要产品也是 PDO 及其他副产品。为了方便对比二者生产过程的碳排放区别, 主要考虑的清单包含关键原料煤和乙烯消耗所引起的间接碳排放, 以及生产过程的直接排放和间接排放。因此, 煤制 PDO 的清单主要考虑合成气变换过程的直接 CO₂ 排放, 以及消耗原料煤、乙烯、公用工程消耗所引起的间接 CO₂ 排放; 绿色 PDO 的清单主要包含 CO₂ 作为原料的直接消碳, 以及公用工程消耗所引起的间接 CO₂ 排放。

2.3 碳排放因子

为了获得更为准确且符合我国国情的碳排放数据, 以生态环境部环境规划院等部门发布的《中国产品全生命周期温室气体排放系数集(2022)》^[22] 为依据, 以获得公用工程所引起的间接碳排放因子。

2.4 碳排放分析

碳排放一般可分为直接排放和间接排放, 研究对象的直接排放主要是指煤制甲醇单元中变换工段中的 CO₂ 直接排放, 而间接排放则是指由原料和公

用工程消耗所引起的, 可表示为

$$E = E_d + \sum_u m_u f_u \quad (1)$$

式中: E 为碳排放, t/a; E_d 为直接排放, t/a; m_u 为原料和公用工程消耗量, t/a 或 kW·h/a; f_u 为碳排放因子, tCO₂/t 或 tCO₂/(kW·h)。

3 结果与讨论

3.1 基础数据

为了获得煤制 PDO 和绿色 PDO 工艺的碳排放数据, 首先需要获得过程的质量平衡和能量平衡, 质量平衡和能量平衡可采用 Aspen 软件模拟获得, 通过在 Aspen 模拟中指定公用工程可获得相关流程的公用工程消耗量及 CO₂ 排放数据。为了获得原料和公用工程引起的间接碳排放, 还需要碳排放因子, 根据文献 [22], 相关原料和公用工程的碳排放因子见表 1。

表 1 原料和公用工程的碳排放因子

Table 1 Carbon emission factors of raw materials and utilities

消耗	碳排放因子
煤/(tCO ₂ ·t ⁻¹)	0.217 8
乙烯/(tCO ₂ ·t ⁻¹)	2.14
煤电/[tCO ₂ ·(kW·h) ⁻¹]	0.000 93
绿电[tCO ₂ ·(kW·h) ⁻¹]	0.000 019
灰色蒸汽/(tCO ₂ ·t ⁻¹)	0.24
绿色蒸汽/(tCO ₂ ·t ⁻¹)	0.043
循环水/(tCO ₂ ·t ⁻¹)	0.000 375

3.2 煤制 PDO 工艺的碳排放

3.2.1 物料平衡及公用工程消耗

煤制 PDO 的物料平衡如图 2 所示。由图可知, 15 623.35 Nm³/h 的空气经过空分装置获得氮气和氧气, 其中 909.75 Nm³/h 的氧气进入煤气化装置, 剩余 4 539.24 Nm³/h 的氧气与 5.92 t/h 的乙烯混合进入环氧乙烷合成装置, 获得 7.76 t/h 的环氧乙烷。煤气化装置通过消耗 3.31 t/h 的煤和氧气及蒸汽最终获得了 CO 5.28 t/h、CO₂ 1.4 t/h、H₂ 0.69 t/h 及合成气 1 428.57 Nm³/h。合成气进入甲醇合成装置获得甲醇 0.62 t/h。环氧乙烷与来自煤气化装置的 CO 以及甲醇装置的甲醇共同反应生成 3-羟基丙酸甲酯 17.78 t/h, 这些 3-HPM 与来自及煤气化装置的氢气反应最终获得 PDO 12.5 t/h。

各个装置公共工程消耗量见表 2。3-HPM 合成

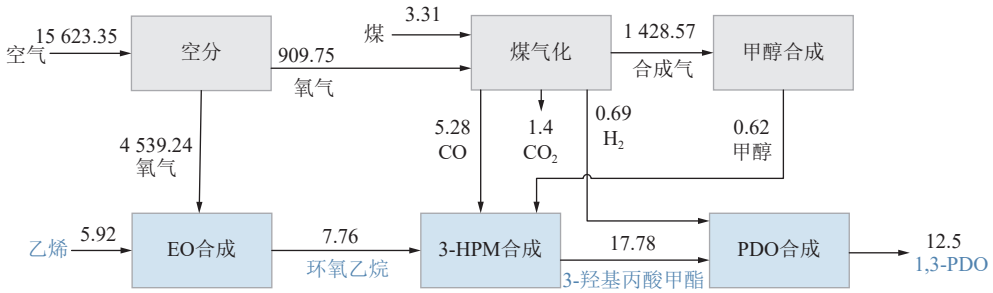


图2 煤制 PDO 的主要物料平衡

Fig. 2 Mass balance of coal-based PDO

装置因其较大的精馏负荷造成蒸汽和循环水消耗量最大。此外，由于合成气变换装置的自身放热特性，该装置会副产蒸汽 2.77 t/h；电耗方面，为了保证 3-HPM 的完全加氢，PDO 装置的氢分压较高，因此，循环氢压缩机的功率较大，造成 PDO 装置的电耗最大。

3.2.2 碳排放分析

煤制 PDO 中各个装置的碳排放如图 3 所示。相较于其他装置，煤气化装置和甲醇合成装置因其较小的原料和公用工程消耗量造成装置的整体碳排放较小，仅为 8.70、1.00 kt/a；合成气变换装置的碳排放量为 6.88 kt/a，由于较高的转换温度和较好的热量回收技术，该装置副产蒸汽可降低碳排放

5.31 kt/a，然而由于变换反应会直接排放 CO₂，该装置的直接碳排放为 11.23 kt/a，其他公用工程如循环水和电所引起的碳排放可忽略；环氧乙烷装置由于消耗了大量的原料乙烯，原料排放量为 101.44 kt/a，占装置总排放量的 71.9%；而 PDO 装置由于其较高的电耗，电耗引起的 CO₂ 排放占比最大，达到 58%，装置总排放量 87.64 kt/a。碳排放最大的装置是 3-羟基丙酸甲酯合成过程，其中蒸汽排放量最大，为 200.15 kt/a，占比超过 91.4%，总排放为 218.87 kt/a。煤制 PDO 过程的总排放为 527.34 kt/a，3-羟基丙酸甲酯装置占比最大，达到 41.5%，后续可通过引入热泵精馏和多效精馏等方式，降低精馏过程的蒸汽消耗量同时降低碳排放量。

表2 煤制 PDO 的公用工程消耗

Table 2 Utility consumption of coal-based PDO

单元	空分	气化	变换	甲醇	EO	3-HPM	PDO
蒸汽/(t·h ⁻¹)	31.7	0.92	-2.77	0.32	3.94	104.24	16.33
循环水/(t·h ⁻¹)	583.82	215.54	34.25	17.29	3 473.4	5 569.15	1 823.94
电/kW	71.62	69.64	115.21	45.31	2 917.75	272.77	6 830.77

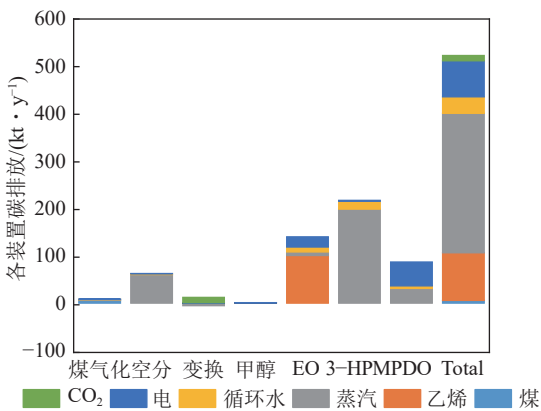


图3 煤制 PDO 的各装置碳排放

Fig. 3 Carbon emission of coal-derived PDO

不同原料和公用工程对煤制 PDO 碳排放的贡献见图 4。煤制 PDO 总碳排放为 527.34 kt/a，其中

蒸汽排放量最大，为 296.99 kt/a；其次为原料所引起的碳排放，煤和乙烯共计 107.2 kt/a；循环水和蒸汽引起的间接排放分别为 35.11、76.8 kt/a；合成气变换装置的 CO₂ 直接排放仅为 11.23 kt/a。因此，对于煤制 PDO 过程而言，过程中公用工程消耗所引起的间接排放才是造成碳排放的关键，而公用工程中蒸汽的影响最大。因此，如何降低蒸汽消耗量是降低煤制 PDO 过程碳排放的关键途径之一。

3.3 绿色 PDO 工艺的碳排放

3.3.1 物料平衡及公用工程消耗

绿色 PDO 与传统煤制 PDO 的主要区别在甲醇、CO 和 H₂ 的获取方式。图 5 给出绿色 PDO 的主要物料平衡。氢气主要来自电解水装置，22.69 t/h 的水通过消耗 66 880.33 kW 的绿电最终获得了 1.19 t/h 的绿氢和 4 539.24 Nm³/h 的绿氧。绿色 PDO 的甲醇

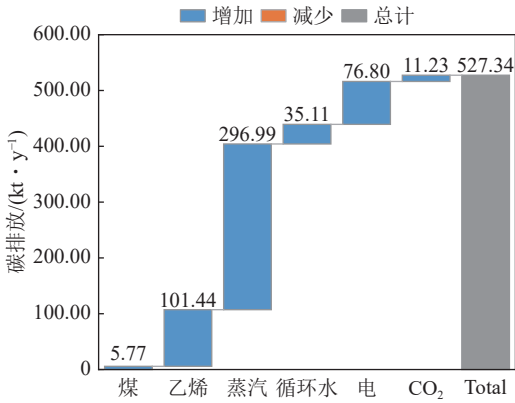


图 4 煤制 PDO 的原料和公用工程碳排放

Fig. 4 Carbon emission of raw material and utility in coal-derived PDO

来自于 CO₂ 加氢制甲醇装置, 0.91 t/h 的 CO₂ 与来

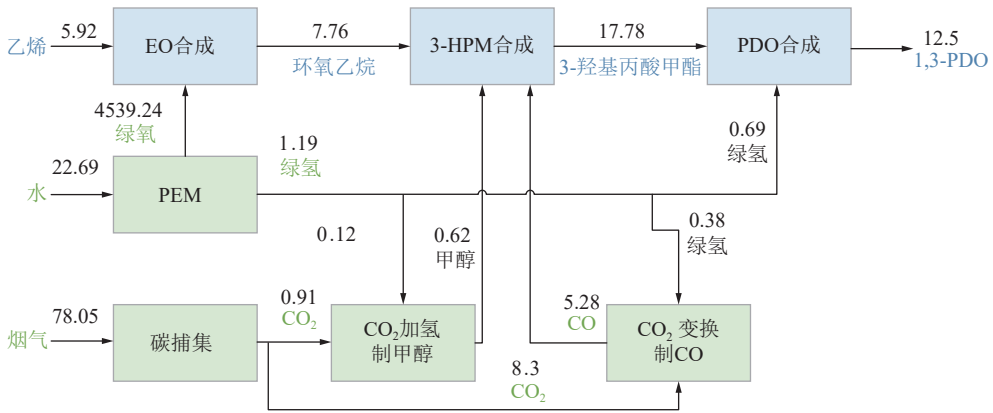


图 5 绿色 PDO 的主要物料平衡

Fig. 5 Mass balance of green PDO

表 3 绿色 PDO 的公用工程消耗

Table 3 Utility consumption of green PDO

单元	碳捕集	PEM	变换	甲醇	EO	3-HPM	PDO
蒸汽/(t·h ⁻¹)	10.31	—	-2.07	0.16	3.94	104.24	16.33
循环水/(t·h ⁻¹)	1 196.42	—	25.59	12.79	3 473.4	5 569.15	1 823.94
电/kW	874.3	66 880.33	86.09	104.97	2 917.75	272.77	6 830.77

3.3.2 碳排放分析

图 6 给出了绿色工艺的碳排放, 与煤制 PDO 相对比, 绿色 PDO 的总碳排放仅为 314.74 kt/a, 仅为煤制 PDO 的 59.7%, 无论是制氢装置还是变换装置、甲醇装置, 碳排放均大幅度降低, PEM 制氢装置因为采用绿电的缘故, 尽管电耗量是所有装置中最大的, 但碳排放仅为 10.28 kt/a; 由于碳捕集装置为变换装置和甲醇装置提供 CO₂ 原料, 尽管该装置也消耗了一定的公用工程, 但整体碳排放为 66.36 kt/a; 而由于变换装置副产了蒸汽, 该装置碳

自 PEM 装置的 0.12 t/h 绿氢反应获得 0.62 t/h 的甲醇。3-羟基丙酸甲酯装置的 5.28 t/h 的 CO 来自变换装置, 通过消耗 8.3 t/h 的 CO₂ 和 0.38 t/h 的绿氢获得。来自电解水装置的 4 539.24 Nm³/h 绿氧与 5.92 t/h 的乙烯混合获得 7.76 t/h 的环氧乙烷, 这些环氧乙烷与来自甲醇装置的 0.62 t/h 甲醇、5.28 t/h 的 CO 反应生成 17.78 t/h 的 3-羟基丙酸甲酯, 并与来自电解水装置的 0.69 t/h 的绿氢混合最终获得 12.5 t/h 的 PDO。

绿色 PDO 中各个单元公共工程消耗量见表 3。与煤制 PDO 类似, 蒸汽消耗量和循环水消耗量最大的装置还是 3-HPM 装置, 分别达到了 104.24、5 569.15 t/h, 耗电最高的装置为 PEM, 为 66 880.33 kW。此外, CO₂ 变换装置可副产 2.07 t/h 的蒸汽。

排放也为负值, 为 -3.88 kt/a; 甲醇装置引起较低的公用工程消耗, 总碳排放仅为 0.11 kt/a; 环氧乙烷装置因采用了绿电, 电耗引起的碳排放降低至 0.45 kt/a, 仅为煤制 PDO 中环氧乙烷装置的 2.1%, 由于乙烯原料的消耗, 原料乙烯的碳排放为 101.44 kt/a, 最终环氧乙烷装置总碳排放仅为 119.85 kt/a。与煤制 PDO 类似, 3-羟基丙酸甲酯仍是碳排放贡献率最大的装置, 因为其精馏塔较大的负荷和分离要求, 造成蒸汽消耗量高达 104.24 t/h, 进而引起碳排放为 200.15 kt/a, 因此, 如何降低 3-羟基丙酸甲酯装

置的蒸汽消耗量是整个 PDO 过程绿色化的关键；PDO 合成装置的碳排放也降低至 37.87 kt/a，与 3 羧基丙酸甲酯装置类似，蒸汽占比也最大，为 82.8%。

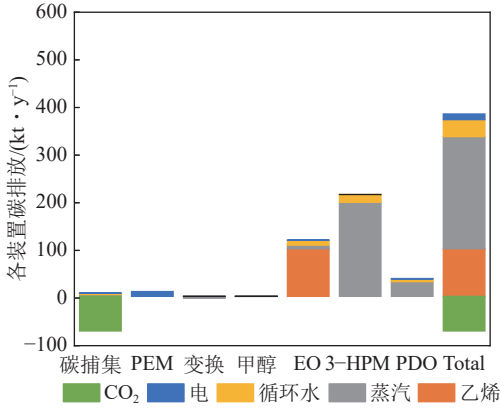


图6 绿色 PDO 各装置的碳排放

Fig. 6 Carbon emission of green PDO

当采用绿色 PDO 合成工艺和绿电时，可大幅度降低整个过程的碳排放，对于 PDO 合成过程减碳具有重要意义。

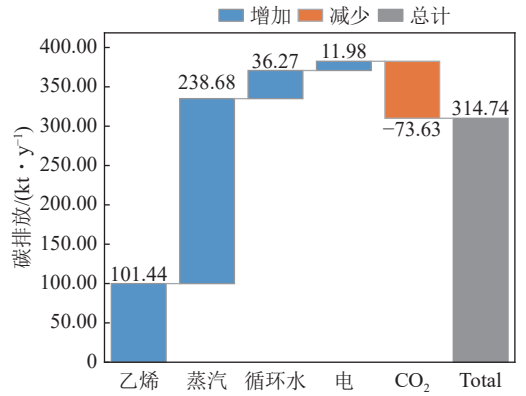


图7 绿色 PDO 的原料和公用工程碳排放

Fig. 7 Carbon emission of raw material and utility in green PDO

不同公用工程对绿色 PDO 碳排放的贡献如图7所示。蒸汽消耗所引起的碳排放最大，达到 238.68 kt/y，因绿色 PDO 以 CO₂ 为原料，直接降低碳排放 73.63 kt/a，进而整个过程的碳排放仅为 314.74 kt/a，蒸汽所引起的碳排放已远远超过了整个过程的碳排放。循环水的碳排放贡献为 36.27 kt/y，由于采用绿电的缘故，电耗所引起的碳排放仅为 11.98 kt/y。因此，

3.4 PDO 工艺碳减策略及碳排放特性对比

为了进一步降低 PDO 合成过程的碳排放，除传统煤制 PDO 和绿色 PDO 以外，还计算分析了传统煤制 PDO、绿色 PDO 无绿电、绿色 PDO 有绿电、绿色 PDO 有绿电和绿蒸汽 4 种情景下的碳排放特性，计算结果如图8所示。

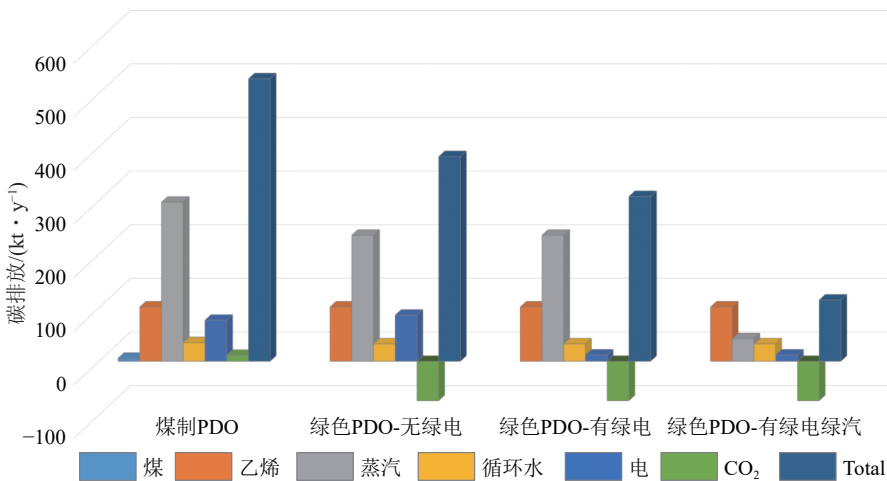


图8 不同 PDO 生产情景的碳排放对比

Fig. 8 Emission comparisons of different PDO production scenarios

由图可见，4 种情景下 PDO 生产工业的碳排放特性显著不同，反映了不同绿色生产方式的实际影响。在传统生产工艺下，碳排放为 527.34 kt/a。而在采用绿色合成工艺的情景下，碳排放显著降低至 382.14 kt/a，降低了 145.21 kt/a。进一步引入绿电后，碳排放降至 307.73 kt/a，较绿色合成工艺降低了 74.41 kt/a。最为显著的变化发生在结合绿电和绿色蒸汽时，碳排放降至 114.49 kt/a，较传统生产工

艺降低 193.24 kt/a，仅为传统工艺蒸汽排放的 17.91%。这些结果表明，绿色合成工艺的应用可显著降低的碳排放，且使用绿电能够进一步减少碳足迹。而结合绿色蒸汽的生产过程（即绿电与绿汽的耦合）则能够实现最优的碳排放减少效果，仅为传统生产方式碳排放的 21.7%，且其中原料乙烯消耗贡献超过 88.6%。

由此可见，绿色生产工艺在降低碳排放方面具

有关键意义。随着我国可再生能源的大力发展,绿电和绿色蒸汽的全面推广和应用,不仅能在PDO合成过程中发挥重要作用,对整个能源化工行业,尤其是高耗能领域,如化工、钢铁、水泥等,也能够大幅度降低碳排放。这不仅有助于实现“双碳”目标,还能够为全球应对气候变化提供中国方案。因此,开发和广泛采用绿色生产工艺,结合绿电和绿色蒸汽,是推进产业低碳转型的重要步骤,对于提升产业竞争力、改善环境质量、促进绿色发展具有长远的战略意义。

4 结 论

1) 相比传统煤制PDO生产工艺,采用绿色合成工艺能够大幅度减少碳排放。绿色生产工艺通过使用可再生原料(如电解水制氢、CO₂转化制CO和CO₂加氢制甲醇)有效地减少了整体碳足迹;

2) 引入绿电后,碳排放得到进一步降低。使用绿电替代传统能源,减少了电力生产过程中的CO₂排放,进一步优化了绿色PDO生产工艺的环境效益;

3) 同时采用绿电与绿色蒸汽时,碳排放降至传统生产方式的21.7%,减排幅度可达到412.85 kt/a,显示出该组合在减少碳足迹方面的最佳效果;

4) 尽管绿色合成工艺和绿电的引入已显著降低碳排放,但在3-HPM合成过程中,蒸汽消耗仍然是主要的碳排放源。因此,降低蒸汽消耗,优化蒸汽使用效率,是进一步减排的关键。

研究提出了绿色化工工艺与绿色能源的结合煤化工产业降碳减排的巨大潜力,可为煤化工行业低碳绿色转型提供重要的可行技术路径和实践指导。

参考文献 (References):

[1] 王双明,刘浪,朱梦博,等.“双碳”目标下煤炭绿色低碳发展新思路[J].煤炭学报,2024,49(1):152-171.
WANG Shuangming, LIU Lang, ZHU Mengbo, et al. New way for green and low-carbon development of coal industry under the target of “dual-carbon” [J]. Journal of China Coal Society, 2024, 49(1): 152-171 (in Chinese).

[2] JING L, EL-HOUJEIRI H M, MONFORT J C, et al. Carbon intensity of global crude oil refining and mitigation potential[J]. *Nature Climate Change*, 2020, 10: 526-532.

[3] 相宏伟,杨勇,李永旺.碳中和目标下的煤化工变革与发展[J].化工进展,2022,41(3):1399-1408.
XIANG Hongwei, YANG Yong, LI Yongwang. Transformation and development of coal chemical industry under the goal of carbon neutralization[J]. *Chemical Industry and Engineering Progress*, 2022, 41(3): 1399-1408 (in Chinese).

[4] 柯彦,陶怡,易学睿,等.典型煤化工项目低碳发展路径的技术

经济评价[J]. *洁净煤技术*, 2022, 28(6): 127-134.

KE Yan, TAO Yi, YI Xuerui, et al. Technical and economic evaluation of low carbon development path of typical coal chemical projects[J]. *Clean Coal Technology*, 2022, 28(6): 127-134 (in Chinese).

[5] ZHU Y F, TAYLOR D, WANG Z L. The role of environmental taxes on carbon emissions in countries aiming for net-zero carbon emissions: Does renewable energy consumption matter?[J]. *Renewable Energy*, 2023, 218: 119239.

[6] 程超,高丹,张衡,等.煤炭与新能源融合发展场景与关键技术[J]. *中国工程科学*, 2024, 26(4): 52-62.
CHENG Chao, GAO Dan, ZHANG Heng, et al. Integrated development of coal and new energy sources: scenarios and key technologies[J]. *Strategic Study of CAE*, 2024, 26(4): 52-62 (in Chinese).

[7] 黄新焯,张冶,张书源,等.贝叶斯优化方法在需钠弧菌生产1,3-丙二醇中的应用[J]. *化工学报*, 2022, 73(11): 5039-5046.
HUANG Xinye, ZHANG Ye, ZHANG Shuyuan, et al. Application of Bayesian optimization method in the production of 1, 3-propanediol by *Vibrio natriegens*[J]. *CIESC Journal*, 2022, 73(11): 5039-5046 (in Chinese).

[8] 陈宇晴,齐随涛,杨伯伦. Pt-WO_x系催化剂上甘油氢解制1,3-丙二醇的研究进展[J]. *化工进展*, 2023, 42(12): 6301-6309.
CHEN Yuqing, QI Suitao, YANG Bolun. Research progress of hydrogenolysis of glycerol to 1, 3-propanediol over supported Pt-WO_x catalysts[J]. *Chemical Industry and Engineering Progress*, 2023, 42(12): 6301-6309 (in Chinese).

[9] 贾瑞龙,秦晓瑶,华其灼,等.丙烯醇反马氏水合制备1,3-丙二醇[J]. *化学通报*, 2022, 85(8): 976-980.
JIA Ruilong, QIN Xiaoyao, HUA Qizhuozhuo, et al. Preparation of 1, 3-propanediol by anti-Markovnikov hydration of allyl alcohol[J]. *Chemistry*, 2022, 85(8): 976-980 (in Chinese).

[10] 曾宏,朱毓,方柏山.环氧乙烷氢甲酯化法生产1,3-丙二醇过程放大与技术经济分析[J]. *浙江大学学报(工学版)*, 2013, 47(3): 540-548.
ZENG Hong, ZHU Yu, FANG Baishan. Process scaleup and techno-economic analysis on hydroesterification of ethylene oxide technology for 1, 3-propanediol production[J]. *Journal of Zhejiang University (Engineering Science)*, 2013, 47(3): 540-548 (in Chinese).

[11] YI Qun, LI Wenying, FENG Jie, et al. Carbon cycle in advanced coal chemical engineering[J]. *Chemical Society Re-views*, 2015, 44(15): 5409-5445.

[12] DING J, YE R P, FU Y H, et al. Direct synthesis of urea from carbon dioxide and ammonia[J]. *Nature Communications*, 2023, 14(1): 4586.

[13] XIE J P, WU B, LIAO Z W, et al. Reconfiguration of acid gas removal process matching the integration of coal chemical industry with green hydrogen[J]. *Separation and Purification Technology*, 2025, 357: 130207.

[14] GUO Y, PENG L Q, TIAN J P, et al. Deploying green hydrogen to decarbonize China's coal chemical sector[J]. *Nature Communications*, 2023, 14(1): 8104.

- [15] YANG S X, PENG S J, LING X Z. Discussion on the feasibility of the integration of wind power and coal chemical industries for hydrogen production[J]. *Sustainability*, 2021, 13(21): 11628.
- [16] YE D P, TSANG S C E. Prospects and challenges of green ammonia synthesis[J]. *Nature Synthesis*, 2023, 2: 612–623.
- [17] SHEN Z J, LI J G, LIU H F. Outlook of energy storage *via* large-scale entrained-flow coal gasification[J]. *Engineering*, 2023, 29: 50–54.
- [18] 甄广利, 鄢凯. 煤化工和绿氢耦合的进展研究 [J]. 山西化工, 2024, 44(10): 288–290.
ZHEN Guangli, YAN Kai. Research on the progress of coal chemical industry and green hydrogen coupling[J]. *Shanxi Chemical Industry*, 2024, 44(10): 288–290 (in Chinese).
- [19] 杨曼, 焦榆翔, 任煜京. 双金属催化剂选择氢解甘油定向制备 1, 3-丙二醇: 活性位、构效关系及机理 [J]. 化学进展, 2024, 36(2): 256–270.
YANG Man, JIAO Yuxiang, REN Yujing. Directed preparation of 1, 3-propanediol from glycerol *via* chemoselective hydrogenolysis over bimetallic catalyst: active sites, structure-functional relationship and mechanism[J]. *Progress in Chemistry*, 2024, 36(2): 256–270 (in Chinese).
- [20] 生态环境部环境规划院, 北京师范大学, 中山大学, 等. 中国产品全生命周期温室气体排放系数集(2022)[R]. 北京: 生态环境部环境规划院, 2022.