研究论文

DOI：10.11949/0438-1157.20261176

可再生能源波动下绿色甲醇制DMC多周期设计优化

张如馨[1]，王帅[2]，唐建平[1]，吴乐[1]，康丽霞[3]

（[1]西北大学化工学院 西安市绿色氢能制储用一体化技术重点实验室，陕西 西安 710127；[2]中煤能源研究院有限责任公司，陕西 西安 710054；[3]西安交通大学化工学院，陕西 西安 710049）

摘要： 针对传统煤基碳酸二甲酯（DMC）工艺碳排放高、可再生能源波动性与化工生产连续性之间的矛盾，提出一种耦合绿氢、CO_2捕集与太阳能供能的绿色DMC制备工艺，并构建多周期设计与优化方法。基于Aspen模拟年产2万吨绿色DMC流程，利用K-means聚类算法将太阳辐射划分为四个周期，通过MATLAB、Python计算各周期下的产量、原料用量与投资成本。以最大投资成本为约束反向迭代，得出可再生能源波动条件下最大年产量为2.60×10^4吨。研究量化了从辐射强度到氢气、甲醇再到DMC产量的链式传递关系，显著提升了多周期经济评价的效率与可复现性，有效破解了高碳排放与间歇供能之间的矛盾。

关键词： 碳酸二甲酯；可再生能源；过程模拟；过程优化；多周期优化；聚类分析

中图分类号： TQ 021.8　　**文献标志码：** A

文章编号： 0438-1157（XXXX）XX-0001-09

Multi-period optimization of green methanol-to-DMC under renewable energy fluctuations

ZHANG Ruxin[1], WANG Shuai[2], TANG Jianping[1], WU Le[1], KANG Lixia[3]

([1]*School of Chemical Engineering, Xi'an Key Laboratory of Green Hydrogen Integration Technology, Northwest University, Xi'an* 710127, *Shaanxi, China*; [2] *China Coal Energy Research Institute Co., Ltd., Xi'an* 710054, *Shaanxi, China*; [3] *School of Chemical Engineering and Technology, Xi'an Jiaotong University, Xi'an* 710049, *Shaanxi, China*)

Abstract: To address the high carbon emissions of the traditional coal-based dimethyl carbonate (DMC) process and the contradiction between the volatility of renewable energy and the continuity of chemical production, a green DMC production process coupled with green hydrogen, CO_2 capture and solar energy supply is proposed, and a multi-period design and optimization method is established. Based on Aspen simulations of a green DMC process with an annual output of 20,000 tons, the K-means clustering algorithm is adopted to classify solar radiation into four periods. MATLAB and Python are used to calculate the production capacity, raw material consumption and capital investment cost for each period. With the maximum capital investment cost as a constraint, reverse iteration is performed, and the maximum annual production capacity under fluctuating renewable energy supply is determined to be 2.60×10^4 tons. This study quantifies the chain transfer relationship from solar radiation intensity to hydrogen and methanol yields, and further to DMC production, which markedly improves the efficiency and reproducibility of multi-period economic evaluation, and effectively resolves the conflict between high carbon emissions and intermittent energy supply.

收稿日期： 2026-09-09　　**修回日期：** 2026-10-21

通信作者： 吴乐（1990—），男，博士，教授，lewu@nwu.edu.cn

第一作者： 张如馨（2003—），女，硕士研究生，2606626291@qq.com

引用本文： 张如馨, 王帅, 唐建平, 吴乐, 康丽霞. 可再生能源波动下绿色甲醇制DMC多周期设计优化[J]. 化工学报, XXXX, XX(XX): 1-9

Citation: ZHANG Ruxin, WANG Shuai, TANG Jianping, WU Le, KANG Lixia. Multi-period optimization of green methanol-to-DMC under renewable energy fluctuations[J]. CIESC Journal, XXXX, XX(XX): 1-9

Keywords: dimethyl carbonate; renewable energy; process simulation; process optimization; multi-cycle optimization; cluster analysis

引 言

煤炭、石油、天然气等碳基能源的持续燃烧，使得大气中温室气体浓度的不断攀升从而引发了一系列的环境问题[1]，所以如何将温室气体二氧化碳（CO_2）转化为可利用的物质，受到各界的广泛关注[2-5]，欧盟提出2030年碳排放较1990年减少40%、2050年减少80%-95%的目标[6]，中国则承诺2030年前碳达峰、2060年前碳中和[7]。当前，CO_2资源化利用不仅被视为缓解温室效应的有效途径之一，也有望在循环经济与碳中和进程中发挥关键作用。从能源结构转型来看，我国可再生能源发电装机在2023年实现历史性超越火电[8]。伴随重大工程项目的落地推进与国际能源合作的持续突破，绿色低碳转型的中国方案在全球范围内的影响力不断扩大[9]。

作为CO_2资源化利用的重要下游产品之一，碳酸二甲酯是一种分子式为$C_3H_6O_3$的有机化合物[10-11]，因其低毒性、可生物降解性以及分子中同时含有甲基、甲氧基和羰基等多种活性官能团，被誉为有机合成领域的绿色反应物，在有机合成及精细化工等领域扮演着至关重要的角色，应用价值独特且不可替代[12-14]。甲醇（CH_3OH）与CO_2直接合成DMC是近年来研究最受关注的绿色路线之一[15]，该方法以温室气体CO_2为原料，在催化剂的作用下合成DMC是原子经济性较高的绿色工艺路线。该工艺原料来源广泛，副产物仅为水，无有毒有害物质排放，在常温下保持液态以及更易操作[15]。段俊名等[16]研究表明，在催化剂作用下CO_2与CH_3OH可反应生成碳酸二甲酯。Mota 等[12]综述了直接合成法中使用CeO_2基非均相催化剂的研究进展，并探讨了通过策略性手段平衡反应平衡以提高产率的途径。该路线被纳入多项技术经济评估中，作为最具可持续发展潜力的候选工艺。基于CH_3OH直接合成法生产DMC包括五个单元，分别是电解水制氢（PEM）[17]、碳捕集[18]、CH_3OH合成[19]与精制以及DMC合成与精制[20-21]。利用可再生能源来合成绿色DMC依赖于自然光的能量输入，但利用可再生能源发电面临着可再生能源会有波动的问题。CH_3OH氧化羰基化对进料中CO、O_2与CH_3OH的精确摩尔比有高度敏感[22]，当光伏的间歇性出力导致电力波动时，引起CO和O_2的流量脉动，从而影响反应的稳定性，同时当温度升高到150 ℃后，DMC的选择性会急剧下降[23-24]。可见可再生能源波动对CH_3OH直接合成法的影响是巨大的，给工业放大与连续生产带来了巨大的挑战[25]。目前尚无研究系统考察户外实际环境中周期变化的辐照强度对DMC产率与选择性的影响。缺乏考虑连续运行中光照中断与恢复的周期响应研究。崔乐乐等[26]研究指出光辅助CO_2转化技术从实验向工艺开发仍面临路径探索的挑战。

本文采用Aspen Plus流程模拟软件建立CH_3OH氧化羰基制DMC的稳态模型，为后续优化提供定量的工艺基础数据。K-means无监督聚类算法对太阳能辐射强度的时间序列数据进行周期划分，将波动性强的时间序列压缩为有限数量的代表性时段，为随机规划中的场景生成提供有效支撑。确定了典型辐照周期后，将若干个周期视为独立的优化问题分别求解，得到各周期下的DMC产量、原料用量以及投资成本，确定最优的资本成本，迭代反推出可再生能源波动条件下DMC的最大产量，该模型的建立更贴合实际生产。

1 年产2万吨绿色DMC的流程模拟

1.1 年产2万吨DMC工艺概述

针对太阳能波动对DMC的影响，本文以年产2万吨碳酸二甲酯（DMC）装置为研究对象，采用CO_2与CH_3OH直接合成工艺路线。该工艺以CO_2和CH_3OH为原料，在催化剂作用下发生直接酯化反应生成DMC和水，反应方程式为：

$$CO_2 + 3H_2 \rightleftharpoons CH_3OH + H_2O \quad (1)$$

$$CO_2 + 2CH_3OH \rightleftharpoons (CH_3O)_2CO + H_2O \quad (2)$$

该路线具有原料廉价易得、原子经济性高、可直接固定温室气体CO_2等突出优点。装置设计规模为年产2万吨DMC（纯度≥99.9%），年运行时间8000小时，折算为小时产量2.5吨。

图1是CO_2与CH_3OH直接合成DMC的工艺流程简图，该工艺以可再生太阳能为主要能源输入，集成电解水、CO_2捕集、CH_3OH合成及DMC合成五个核心单元，形成一条绿色化学品联产路径。

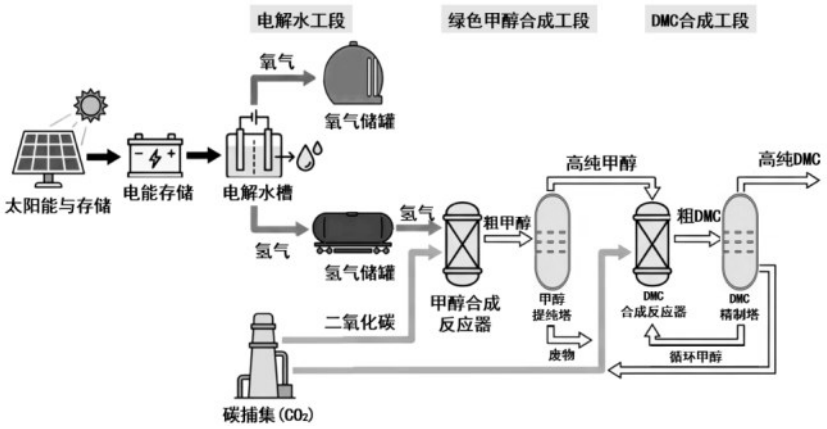

图1 DMC合成工艺流程简图

Fig1 Flowchart of the DMC synthesis process

1.2 Aspen流程稳态模拟

选取美国 Aspen Tech 公司研发的大型通用流程模拟平台 Aspen Plus,对目标生产工艺进行稳态模拟,同时完成配套工艺物料流程图的绘制。模拟选用的物性方法为NRTL-RK,本研究以电解水单元为原料制备单元,Carmo等[27]对PEM电解水的材料、膜电极组件和系统工程进行了综述,证明其在高纯氢制备和可再生能源耦合方面具有明确产业前景。该过程可年产氧气(O_2)2.31×10^4 t、氢气(H_2)2.89×10^3 t。将电解水产出的H_2与碳捕集系统所捕获的3.44×10^4 t·a^{-1}的CO_2进行催化反应,可制得CH_3OH产品,CH_3OH年产量为1.54×10^4 t。随后,合成的CH_3OH进一步与CO_2发生反应,最终生成DMC,年产量达2.00×10^4 t。整体及主要中间体合成工段物料流程图如图2所示。

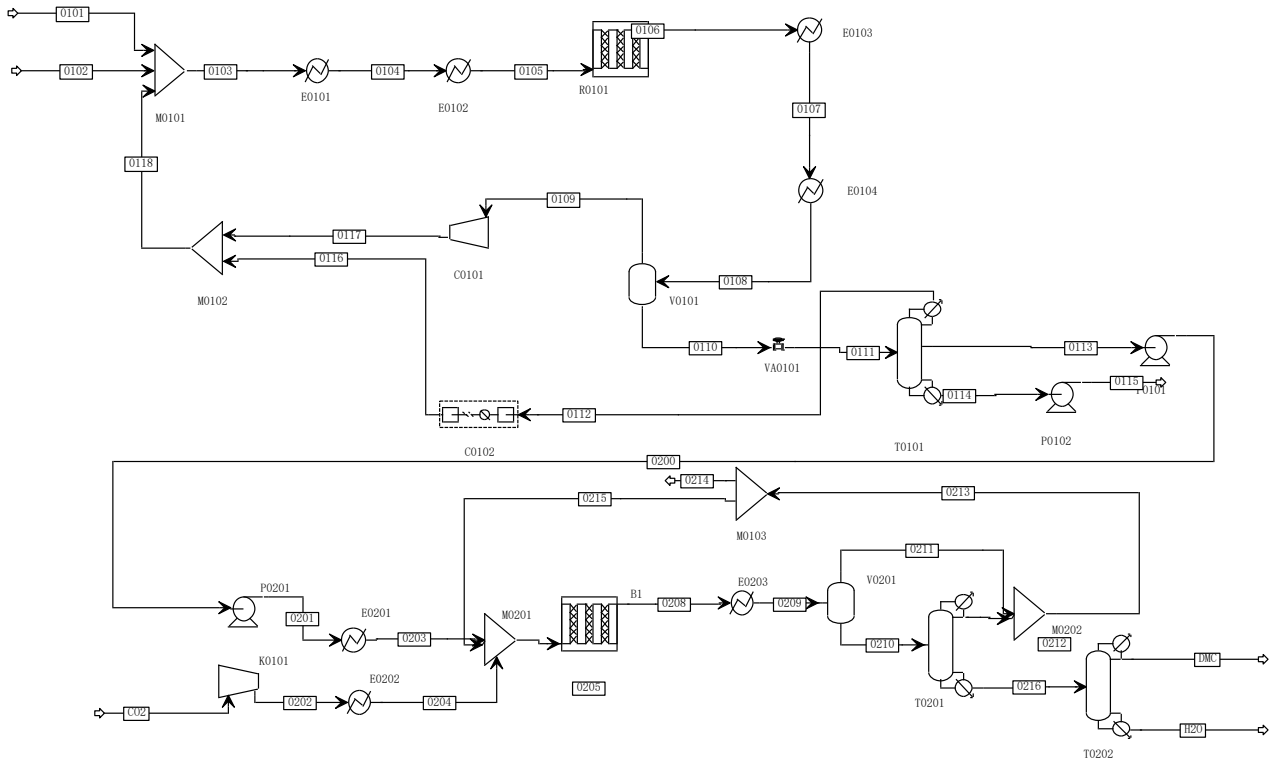

图2 耦合绿氢绿氧的绿色碳酸二甲酯工艺全流程模拟

Fig.2 Process simulation of green DMC process coupled with green H_2 and O_2

该工艺的主要物流参数值见表1，每生产1吨DMC消耗0.49吨CO_2和0.71吨CH_3OH。碳捕集单元系统的效率为90%，精制单元为主要损失环节，CH_3OH精制与DMC精制收率分别为92.4%和83.2%，精制后产品DMC的纯度为99.98%。

表1　各工段主要物流参数

Table 1　Main stream parameters of each section

单元	原料	用量(t·a^{-1})	产物	产量(t·a^{-1})
碳捕集	烟气	3.44×10^4	CO_2	3.10×10^4
电解水	H_2O	2.60×10^4	O_2	2.31×10^4
			H_2	2.89×10^3
CH_3OH合成	CO_2	2.12×10^4	CH_3OH	1.54×10^4
	H_2	2.89×10^3	H_2O	8.67×10^3
CH_3OH精制	CH_3OH	1.54×10^4	CH_3OH	1.42×10^4
DMC合成	CH_3OH	1.42×10^4	DMC	2.41×10^4
	CO_2	9.80×10^3		
DMC精制	DMC	2.41×10^4	DMC	2.00×10^4
			H_2O	4.01×10^3

2　多周期设计和优化模型

为实现年产2万吨DMC全流程的经济环境综合优化，模型以太阳辐射驱动的电解水制氢为核心，量化从辐射强度到H_2产量、CH_3OH产量以及DMC产量的链式传递关系。

2.1　目标函数

本模型以全生命周期总费用最小化为优化目标。总费用包括各周期的固定资本投入(仅第一年计入)、运营成本以及可能的碳排放成本。目标函数表达式如下：

$$\min \quad C_{\text{total}} = \sum_{t=1}^{T}\left(C_{\text{fix},t} + C_{\text{op},t}\right) + C_{\text{carbon}} \tag{3}$$

式中，t为时间周期，T为总周期数，$C_{fix,t}$周期t内的固定资本分摊额，$C_{op,t}$周期t内的运营成本，主要包括外购电费、原料费(H_2O、CO_2补充等)、蒸汽费及维护费，C_{carbon}全生命周期碳排放成本。

$$C_{\text{op},t} = p_{\text{elec}} \cdot P_{\text{grid},t} + p_{\text{H2O}} \cdot m_{\text{H2O},t} + p_{\text{steam}} \cdot m_{\text{steam},t} + \sum_j p_{\text{raw},j} \cdot m_{\text{raw},j,t} \tag{4}$$

式中，P_{elec}为电网购电单价，元·kWh^{-1}；$P_{grid,t}$周期t内从电网购入电力的功率，kW；p_{H_2O}，p_{steam}工业水、蒸汽单价；$m_{steam,t}$蒸汽消耗量，kg·h^{-1}；$P_{raw,j}$，$m_{raw,j,t}$其他原料的单价与消耗率。

$$C_{\text{fix}} = C_{\text{base}} \cdot \left(\frac{S}{S_{\text{base}}}\right)^{\alpha} \tag{5}$$

其中，S为关键设备(如电解槽、DMC反应器)的设计容量，α为规模指数。

2.2　多周期划分

本文利用K-means聚类算法进行多周期划分。K-means聚类算法作为一种经典的无监督划分式聚类方法，以最小化簇内误差平方和为目标，通过迭代优化实现样本的自动分组[28]。本文通过肘部法则确定最优聚类数，实现对全年太阳能波动模式的精准划分。

该算法以最小化簇内误差平方和(J)为目标函数，通过迭代优化实现样本的自动分组：

$$J = \sum_{i=1}^{k}\sum_{x \in C_i}\left\| x - \mu_i \right\|^2 \tag{6}$$

式中，k为聚类数，C_i为第i个簇，x为样本向量，μ_i为第i个簇的中心向量。

2.3　约束条件

质量平衡是确保各工段物料守恒的基础。对于每个工段(电解水、碳捕集、甲醇合成、DMC合成、精馏等)，在周期t内满足：

$$\sum_{\text{in}} m_{\text{in},k,t} = \sum_{\text{out}} m_{\text{out},k,t} \tag{7}$$

式中，$m_{in,k,j}$为不同周期原料的进料量，$m_{out,k,j}$为不同周期出料量。

能量平衡主要考虑电力供需平衡及各工段的能耗约束，模型可表示为：

$$P_{\text{demand}}(t) = P_{\text{solar}}(t) + P_{\text{grid}}(t) - P_{\text{storage}}(t) \tag{8}$$

式中，$P_{demand}(t)$为总耗电量，$P_{solar}(t)$为光伏发电功率，$P_{grid}(t)$为电网购入电力的功率，$P_{storage}(t)$为储能系统充放电功率。

为完成多工况周期下的协同优化调度，需结合电力市场分时电价机制与可再生能源出力波动规律，对生产运行负荷及储能调控方案进行周期适配与灵活调整。

2.4　数据预处理

绿色碳酸二甲酯生产链条涉及“光伏发电-电解水制氢-CO_2捕集-甲醇合成-DMC直接合成”五个核心工段，太阳能波动会对整个产业链产生影响。太阳辐射的变化在冬夏两季波动尤为明显，全国的基准数据显示夏季辐射均值可达冬季的两倍[29]。针对太阳辐射的波动，对全年的太阳辐射进行划分。首先对数据进行清洗、时间对齐、异常值修正及缺失值填补[30]，其次采用3σ准则开展异常值检测，将超出正常数据波动区间的离群样本予以识别剔除，针对短时数据缺失问题，采用线性插值法完成序列

补全，保证数据的连续与完整性；然后，对辐照度、用电负荷等不同量级、不同量纲的特征指标实施标准化归一化处理，消除变量间数量级差异带来的权重偏差，降低数据噪声干扰。经多步骤预处理后，进而采用K-means聚类算法提取辐射强度的周期规律与突变点，将全年划分为若干典型时段，从而为绿色DMC生产工艺的储能配置与电网调度提供多周期优化依据。

3 绿色DMC生产工艺的多周期优化结果

3.1 基础数据

本研究所采用的太阳辐射数据来源于香港天文台权威开放数据库。2024年部分典型太阳辐射波动如图3所示。

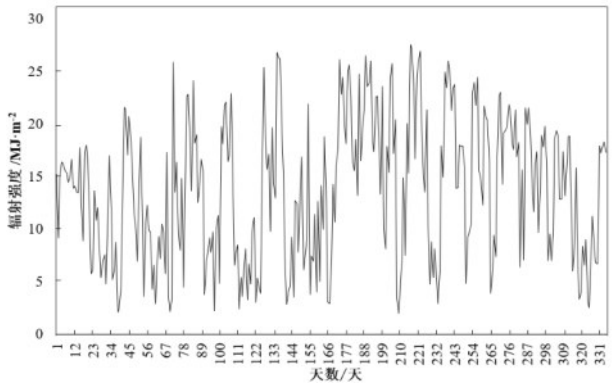

图3 2024年太阳辐射波动

Fig.3 2024 solar radiation fluctuation

获取原始观测数据后，为规避闰年特殊日期造成的时序错位与周期偏差，本文按照格里高利历法规范，剔除长时间序列内所有2月29日的辐射观测样本。在此基础上，以自然年为统一尺度，对各年度同日辐射数据进行逐年平均处理，整合生成全年365日连续的日均辐射基准时序序列，实现多源时序数据的标准化统一。

3.2 多周期划分结果

本研究采用了MATLAB软件平台对太阳能辐射的时空分布特性进行建模与分析。进一步地，基于K-means聚类算法对日辐射强度数据进行模式识别，得到可视化结果。

由图4 K-means聚类算法结果可见，当子周期数进一步增加时，该提升效果会逐渐减弱。增加子周期数虽能提升划分效果，却可能导致优化模型的规模扩大。因此，合理子周期数的选择，是在子周期划分质量与优化模型规模之间的权衡取舍。在本文的研究中，将簇内距离与簇间距离的变化上限分别设定为0.1和1，据此确定多周期数应取4。将全年的太阳辐射分类后得到表2。将全年划分为四个周期，分别为低辐射区、过渡辐射区、中辐射区以及高辐射区。

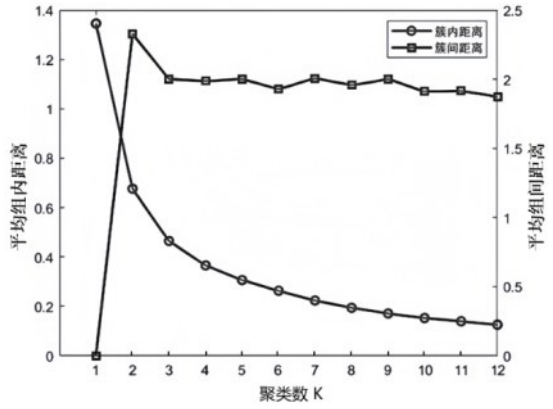

图4 簇内与簇间距离同子周期数的关联关系

Fig. 4 Intra- and inter-cluster distances vs. number of sub-periods

表2 全年太阳辐射周期划分

Table 2 Annual solar radiation period division

周期	平均辐射（MJ·m^{-2}）	月份	对应发电量（kWh·m^{-2}）
1	10.24	2、3、11、12	2.84
2	10.97	1、4	3.05
3	12.36	5、6、9、10	3.43
4	13.33	7、8	3.70

3.3 各周期的物料和能量平衡

本工艺构建了“烟气CO_2捕集-绿氢制备-甲醇合成与精制-DMC合成与精制”的全流程稳态物料平衡体系，实现了碳资源的梯级利用与物料的高效循环。为了保证在最小太阳辐射强度下，即在辐射强度最小的月份12月，对应辐射强度为9.65 MJ·m^{-2}也能年产2万吨DMC，所以假定光伏板面积为250公顷，光伏的效率取16%。并且依据稳态下不同周期太阳辐射的不同对产品产量的影响，对整个工艺流程进行物料平衡衡算，稳态即指全年均处于某一固定周期。

以第1周期为例进行物料平衡和能量平衡计算，结果如图5和图6所示。

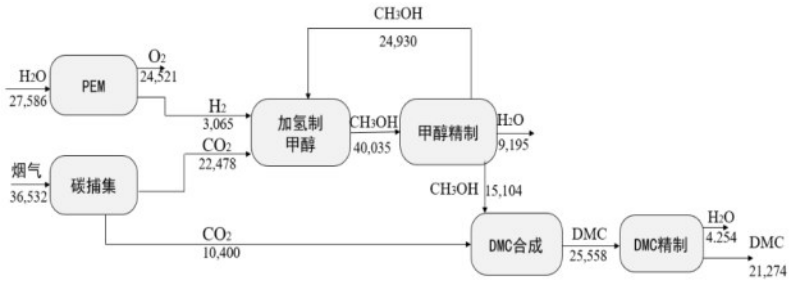

图5　工艺流程物料平衡图(全年处于低辐射区,单位:t·a^{-1})

Fig. 5　Process material balance (annual low-radiation zone, unit: t·a^{-1})

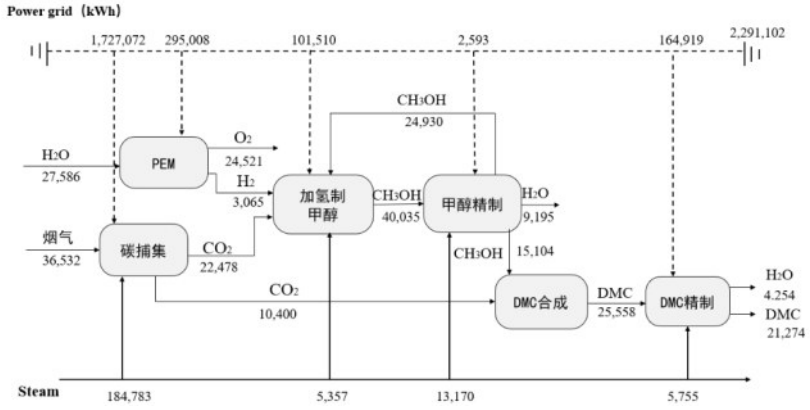

图6　工艺流程能量平衡图(全年处于低辐射区,单位:t·a^{-1})

Fig. 6　Process energy balance (annual low-radiation zone, unit: t·a^{-1})

图5和图6分别展示了该太阳辐射强度工况下全流程的物料平衡和能量平衡结果。水通过电解水工段被转化为H_2和O_2。H_2作为关键原料,进入后续的甲醇合成工段。在该工段,H_2与从碳捕集单元回收的CO_2反应,生成CH_3OH。随后,CH_3OH被输送至DMC合成工段,与补充的CO_2反应,最终生成目标产品DMC。

在第1周期时,DMC的年产量为2.13×10^4吨,此时的原料用量等刚好能实现年产2万吨的目标,耗电量为2.29×10^6 kWh,光伏发电量也只足够整个工艺流程刚好达到生成目标。经过计算后得到在第2周期时,DMC年产量为2.28×10^4吨,总耗电量为2.45×10^6 kWh。在第3周期时,DMC年产量为2.57×10^4吨,总耗电量为2.76×10^6 kWh。在第4周期时,DMC年产量为2.77×10^4吨,总耗电量为2.98×10^6 kWh。同时整个工艺的碳捕集率为90%,工艺流程达到平衡。

综合物料平衡以及能量平衡图可知,太阳辐射强度是制约本工艺产能的核心因素,辐射的提升通过增加电解水制氢的可用电力,直接放大了下游产物的生成速率,同时随着辐射强度提升,全流程电力与蒸汽消耗均呈阶梯式增长。

3.4　总费用

3.4.1　投资费用　从Aspen中获得能源经济数据后,利用Python计算不同周期下投资费用的变动,灵活构建非线性成本模型并且能够自动整合工艺数据。由于在不同辐射强度下,各类原料的用量也会随之变化,从而导致投资费用的变动,不同周期下的计算结果见表3。

随着生产规模扩大,固定资本、运营成本及总成本均呈阶梯式上升,总成本由5.76×10^8元增至7.40×10^8元,涨幅为28.3%。对比产量与成本增幅可知,总成本增速略低于产量增速,表明生产规模扩大带来了一定的成本摊薄效应,单位DMC产品的生产成本随辐射强度提升呈下降趋势,体现了高资源条件下的规模经济性优势。同时,各周期下运营成本均占总成本的主导地位,占比超85%,是成本控制的核心环节。

3.4.2　多周期对DMC产量的影响　由表3可知,最大投资成本为7.40亿元,最小投资成本为5.76亿元,不同的投资成本对应不同生产规模下的设备配置。基于Python编写了固定投资反推DMC产量的经济分析模型。模型进行自动计算得到四个周期下的投资费用,而后通过固定最大投资成本7.40亿

表3 不同周期原料用量及总成本

Table 3 Raw material consumption and total cost for different periods

周期	DMC 产量(t)	CH_3OH 用量(t)	CO_2 用量(t)	H_2O 用量(t)	固定 资本(元)	运营 成本(元)	总 成本(元)
1	2.13×10^4	4.01×10^4	2.08×10^4	2.56×10^4	7.47×10^7	5.01×10^8	5.76×10^8
2	2.28×10^4	4.30×10^4	2.23×10^4	2.74×10^4	7.81×10^7	5.37×10^8	6.15×10^8
3	2.57×10^4	4.84×10^4	2.51×10^4	3.08×10^4	8.44×10^7	6.05×10^8	6.89×10^8
4	2.77×10^4	5.22×10^4	2.71×10^4	3.32×10^4	8.86×10^7	6.51×10^8	7.40×10^8

元,迭代反推出全年处于不同周期变化下的DMC产量,然后按辐射区(低、过渡、中、高)计算物料消耗、运营成本、固定资本及折旧,最后得到最大投资约束下DMC等原料的消耗量,用于全生命周期经济评价,结果见表4、5。

表4 单周期产量

Table 4 Output per cycle

全年辐射($MJ\cdot m^{-2}$)	单周期DMC产量(t)
11.73	2.44×10^4

从整体来看多周期时DMC的产量要高于单周期时DMC的产量,由于动态涉及全年辐射的波动研究,所以动态更加符合实际。

表5 多周期产量

Table 5 Multi-cycle production

周期(月份)	多周期辐射($MJ\cdot m^{-2}$)	多周期DMC产量(t)
低辐射区	10.24	7.67×10^3
过渡区	10.97	4.11×10^3
中辐射区	12.36	9.25×10^3
高辐射区	13.33	4.98×10^3
全年	波动	2.60×10^4

投资成本是由固定成本和运营成本组成,由图7不同辐射强度下的总投资成本组成中可以看出运营成本占总投资成本的87%以上,随DMC产量的增加而增加。

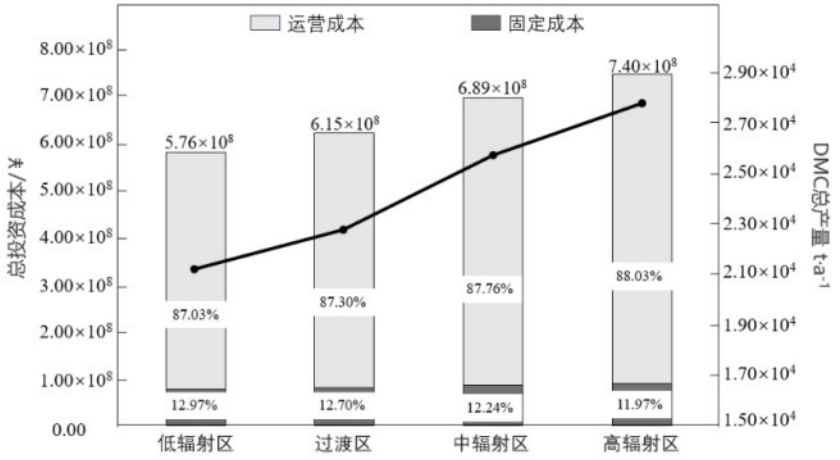

图7 不同辐射强度下的总投资成本组成(元)

Fig.7 Composition of total investment cost under different radiation intensities (yuan)

4 结 论

(1)基于Aspen Plus建立了绿色DMC合成的全流程稳态模型,并对低、过渡、中、高四个典型辐射强度区间分别进行计算,获得了各工段的物料平衡与能量平衡数据,验证了模型的可靠性,DMC产品纯度达99.98%,每生产1吨DMC能够消耗1.54吨CO_2,捕集1吨CO_2需要消耗47.27 kWh电力,实现低碳生产。

(2)利用K-means聚类算法进行周期划分,得到四个典型的辐照周期,随着全年平均辐射强度从10.24 $MJ\cdot m^{-2}$增至13.33 $MJ\cdot m^{-2}$,DMC年产量从2.13×10^4吨提升至2.77×10^4吨。

(3)在动态情况下,利用Python等软件计算不同周期下原料用量、DMC产量以及投资成本,通过固定最大投资成本7.40亿元,迭代反推出可再生能

源波动条件下的DMC产量，实际DMC年产量为2.60×10^4吨高于稳态时DMC的产量2.44×10^4吨。相较于稳态模型，由于考虑了全年太阳辐射的波动，多周期模型更加符合实际生产流程，实现了固定投资反推DMC产量、逐年成本折旧及多投资约束场景对比，显著提高了多周期经济评价的效率与可复现性，破解了传统煤基工艺高碳排放与可再生能源间歇性供给之间的矛盾。

（4）本文对波动工况采用稳态分段简化处理，未量化物料滞后及设备热惯性的影响。后续将引入非稳态动态仿真，重点考察辐射切换时的系统响应延迟，并设计光照中断/恢复时的储氢调度策略，完善储电/储氢容量配置与充放电模型，以提高低辐射时段运行稳定性；甲醇合成与DMC合成均为强放热反应，尚未详细设计热交换网络，后续将引入夹点分析以进一步降低外购蒸汽量、提升全厂能效；模拟与优化结果有待与中试或工业数据进行对比验证，获取实际转化率与能耗数据以校正模型参数。

符号说明

C_{carbon}——全生命周期碳排放成本，元

$C_{fix,t}$——周期t内的固定资本分摊额，元

C_i——第i个簇

$C_{op,t}$——周期t内的运营成本，元

k——聚类数

$m_{in,k,j}$——不同周期原料的进料量，t/y

$m_{out,k,j}$——不同周期出料量，t/y

$m_{raw,j,t}$——其他原料的消耗量，元

$m_{steam,t}$——蒸汽消耗量，$kg\cdot h^{-1}$

$P_{demand}(t)$——总耗电量，kW

P_{elec}——电网购电单价，元/kWh

$P_{grid,t}$——从电网购入电力的功率，kW

$P_{raw,j}$——其他原料的单价，元

$P_{solar}(t)$——光伏发电功率，kW

$P_{storage}(t)$——储能系统充放电功率，kW

p_{H_2O}——工业水单价，元

p_{steam}——工业蒸汽单价，元

S——关键设备的设计容量

T——总周期数

t——时间周期

x——样本向量

参考文献

[1] Niu W J, Wang Y P, He J Z, et al. Highly stable nitrogen-doped carbon nanotubes derived from carbon dots and metal-organic frameworks toward excellent efficient electrocatalyst for oxygen reduction reaction[J]. Nano Energy, 2019, **63**: 103788.

[2] Arakawa H, Aresta M, Armor J N, et al. Catalysis research of relevance to carbon management: progress, challenges, and opportunities[J]. Chemical Reviews, 2001, **101**(4): 953-996.

[3] Han X F, Jiao J L, Liu L C, et al. China's energy demand and carbon dioxide emissions: do carbon emission reduction paths matter?[J]. Natural Hazards, 2017, **86**(3): 1333-1345.

[4] Shen Y, Cheng A, Ay E, et al. Workshop Review: Advancing carbon capture, utilization, and storage: East Asia perspective[J]. The Leading Edge, 2025, **44**(4): 310-311.

[5] Song C S. Global challenges and strategies for control, conversion and utilization of CO_2 for sustainable development involving energy, catalysis, adsorption and chemical processing[J]. Catalysis Today, 2006, **115**(1/2/3/4): 2-32.

[6] Nieto J, Carpintero Ó, Lobejón L F, et al. An ecological macroeconomics model: The energy transition in the EU[J]. Energy Policy, 2020, **145**: 111726.

[7] 刘晓龙, 崔磊磊, 李彬, 等. 碳中和目标下中国能源高质量发展路径研究[J]. 北京理工大学学报(社会科学版), 2021, **23**(3): 1-8.
Liu X L, Cui L L, Li B, et al. Research on the high-quality development path of China's energy industry under the target of carbon neutralization[J]. Journal of Beijing Institute of Technology (Social Sciences Edition), 2021, **23**(3): 1-8.

[8] 李洪力. 可再生能源总装机历史性超越火电SVG、变频器产业迎来黄金发展期[J]. 证券市场周刊. 2024, (4): 46-49.
Li H L. Renewable energy installed capacity historically surpasses thermal power: SVG and frequency converter industries usher in a golden development period [J]. Securities Market Weekly, 2024, (4): 46-49.

[9] Lovmar L, Ahlford A, Jonsson M, et al. Silhouette scores for assessment of SNP genotype clusters[J]. BMC Genomics, 2005, **6**(1): 35.

[10] Chai J C, Liu Z H, Ma J, et al. *In situ* generation of poly (vinylene carbonate) based solid electrolyte with interfacial stability for $LiCoO_2$ lithium batteries[J]. Advanced Science, 2017, **4**(2): 1600377.

[11] Shaik M R, Park Y, Jung Y K, et al. Interfacial modulation of bifunctional electrolyte additive engineering for dendrite-free and robust lithium metal anode[J]. Journal of Energy Chemistry, 2024, **97**: 120-127.

[12] Gao G, Liu B T, Ge X L, et al. Optimal design and energy intensity comparison of industrialized routes for electronic-grade dimethyl carbonate synthesis: Toward sustainable strategies[J]. Separation and Purification Technology, 2026, **382**: 135983.

[13] Ono Y. Catalysis in the production and reactions of dimethyl carbonate, an environmentally benign building block[J]. Applied Catalysis A: General, 1997, **155**(2): 133-166.

[14] 张阳光, 王顺, 刘杨, 等. 碳酸二甲酯-甲醇共沸体系的节能分离技术研究进展[J]. 化工学报, 2026, **77**(7): 3675-3690.
Zhang Y G, Wang S, Liu Y, et al. Research progress on energy-saving separation of dimethyl carbonate/methanol azeotropic mixture[J]. CIESC Journal, 2026, **77**(7): 3675-3690.

[15] Rouwenhorst K H R, Van der Ham A G J, Mul G, et al. Islanded ammonia power systems: Technology review & conceptual process

design[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2019, **114**: 109339.

[16] 段俊名, 黄杰林, 古芳娜, 等. CeO_2晶面调控光热协同催化CO_2和甲醇合成碳酸二甲酯[J/OL]. 化工学报, 2026-07-22. https://link.cnki.net/urlid/11.1946.TQ.20260722.1016.002.
Duan J M, Huang J L, Gu F N, et al. Facet regulation of CeO_2 in photo-thermal synergistic catalysis for DMC synthesis from CO_2 and methanol[J/OL]. CIESC Journal, 2026-07-22. https://link.cnki.net/urlid/11.1946.TQ.20260722.1016.002.

[17] 陶智能, 邱彤, 王保国. 阴离子交换膜电解水制氢稳态建模[J]. 化工学报, 2025, **76**(4): 1711-1721.
Tao Z N, Qiu T, Wang B G. Steady-state modeling on hydrogen production by anion exchange membrane water electrolysis[J]. CIESC Journal, 2025, **76**(4): 1711-1721.

[18] 曹现昊, 郑蓉蓉, 喻治坤, 等. 直接空气碳捕集吸附剂结构工程与可再生能源耦合工艺的研究进展[J/OL]. 化工学报, 2026-09-02. https://link.cnki.net/urlid/11.1946.tq.20260901.1424.012.
Cao X H, Zheng R R, Yu Z K, et al. Progress in direct air capture structured adsorbents and renewable energy coupled regeneration strategies[J/OL]. CIESC Journal, 2026-09-02. https://link.cnki.net/urlid/11.1946.tq.20260901.1424.012.

[19] 岳岩, 张守玉, 肖红亮, 等. Cu基催化剂在气/液相CO_2加氢制绿色甲醇中的研究进展[J]. 化工学报, 2026, **77**(6): 2957-2986.
Yue Y, Zhang S Y, Xiao H L, et al. Research progresses of Cu-based catalysts in gas/liquid phase CO_2 hydrogenation to methanol [J]. CIESC Journal, 2026, **77**(6): 2957-2986.

[20] 易伟, 赵文强, 李晨, 等. CO_2直接合成碳酸二甲酯非均相催化剂研究进展[J]. 现代化工, 2026, **46**(4): 33-39.
Yi W, Zhao W Q, Li C, et al. Research progress of heterogeneous catalysts for the direct synthesis of dimethyl carbonate from CO_2 [J]. Modern Chemical Industry, 2026, **46**(4): 33-39.

[21] 李璟, 刘宋然, 张井峰, 等. 隔壁塔精馏分离碳酸二甲酯-甲醇的模拟分析[J]. 石油化工技术与经济, 2026, **42**(2): 20-24, 29.
Li J, Liu S R, Zhang J F, et al. Simulation analysis of the separation process of dimethyl carbonate-methanol binary azeotrope by extractive dividing wall column[J]. Techno-Economics in Petrochemicals, 2026, **42**(2): 20-24, 29.

[22] 李忠. 甲醇氧化羰基化洁净合成DMC催化反应研究[D]. 太原: 太原理工大学, 2004.
Li Z. Study on catalytic reaction for clean synthesis of dmc via oxidative carbonylation of methanol [D]. Taiyuan: Taiyuan University of Technology, 2004.

[23] 陈兴权, 王丽琼, 赵天生, 等. 甲醇气相氧化羰化合成DMC Ⅱ. 工艺条件的研究[J]. 石油化工, 2003, **32**(9): 752-755.
Chen X Q, Wang L Q, Zhao T S, et al. DMC synthesis by gas-phase oxidative carbonylation of methanol Ⅱ. influence of reaction parameters[J]. Petrochemical Technology, 2003, **32**(9): 752-755.

[24] 刘婷婷, 刘冬妹, 张欣, 等. 考虑流量波动的绿氨反应器随机规划优化设计[J]. 工程科学与技术, 2025, **57**(5): 101-113.
Liu T T, Liu D M, Zhang X, et al. Stochastic planning optimizations design of power-to-ammonia synthesis reactor with inlet flow rate fluctuations[J]. Advanced Engineering Sciences, 2025, **57**(5): 101-113.

[25] 丁晓墅, 董香茉, 刘浩, 等. 环氧氯丙烷、甲醇和二氧化碳一步直接催化合成碳酸二甲酯的研究[J]. 高校化学工程学报, 2015, **29**(1): 164-169.
Ding X S, Dong X M, Liu H, et al. One-pot synthesis of dimethyl carbonate from epichlorohydrin, methanol and carbon dioxide[J]. Journal of Chemical Engineering of Chinese Universities, 2015, **29**(1): 164-169.

[26] 崔乐乐, 陆姗姗, 王欢. 二氧化碳与甲醇直接合成碳酸二甲酯的催化剂研究[J]. 化纤与纺织技术, 2025, **54**(2): 10-12.
Cui L L, Lu S S, Wang H. Study on catalyst for direct synthesis of dimethyl carbonate from carbon dioxide and methanol[J]. Chemical Fiber & Textile Technology, 2025, **54**(2): 10-12.

[27] Carmo M, Fritz D L, Mergel J, et al. A comprehensive review on PEM water electrolysis[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2013, **38**(12): 4901-4934.

[28] Ikotun A M, Ezugwu A E, Abualigah L, et al. K-means clustering algorithms: a comprehensive review, variants analysis, and advances in the era of big data[J]. Information Sciences, 2023, **622**: 178-210.

[29] 张玮睿, 胡琦, 和骅芸, 等. 不同时间尺度中国大陆区域辐射资源时空变化特征分析[J]. 中国农业资源与区划, 2024, **45**(10): 97-108.
Zhang W R, Hu Q, He H Y, et al. Characterization of spatial and temporal changes in regional radiation resources in China′s mainland at different time scales[J]. Chinese Journal of Agricultural Resources and Regional Planning, 2024, **45**(10): 97-108.

[30] 朱绣峰. 基于智能算法的光伏发电系统设计与性能评估[J]. 光源与照明, 2025(1): 156-158.
Zhu X F. Design and performance evaluation of photovoltaic power generation system based on intelligent algorithm[J]. Lamps & Lighting, 2025(1): 156-158.