

第 3 章

化学工业排放

作者

3.1 节

Jochen Harnisch (德国)

3.2 -3.8 节

Charles Jubb (澳大利亚)

Alexander Nakhutin (俄罗斯) 和 Virginia Carla Sena Cianci (乌拉圭)

3.9 节

Robert Lanza (美国)

Thomas Martinsen (挪威)、Abdul Karim W. Mohammad (伊拉克) 和 Maruo M. O. Santos (巴西)

3.10 节

Archie McCulloch (英国) 和 Brian T. Mader (美国)

参加作者

3.2 -3.8 节

Javier Pérez-Ramírez (西班牙)

3.9 节

Maarten Neelis (荷兰) 和 Martin Patel (德国)

目录

3	化学工业排放.....	3.10
3.1	导言.....	3.10
3.2	氨气生产.....	3.11
3.2.1	导言.....	3.11
3.2.2	方法学问题.....	3.11
3.2.2.1	方法选择.....	3.12
3.2.2.2	选择排放因子.....	3.14
3.2.2.3	选择活动数据.....	3.15
3.2.2.4	完整性.....	3.16
3.2.2.5	建立一致的时间序列.....	3.17
3.2.3	不确定性评估.....	3.17
3.2.3.1	排放因子不确定性.....	3.17
3.2.3.2	活动数据不确定性.....	3.17
3.2.4	质量保证/质量控制（QA/QC）、报告和归档.....	3.17
3.2.4.1	质量保证/质量控制.....	3.17
3.2.4.2	报告和归档.....	3.18
3.3	硝酸生产.....	3.19
3.3.1	导言.....	3.19
3.3.2	方法学问题.....	3.19
3.3.2.1	方法选择.....	3.20
3.3.2.2	选择排放因子.....	3.22
3.3.2.3	选择活动数据.....	3.23
3.3.2.4	完整性.....	3.23
3.3.2.5	建立一致的时间序列.....	3.24
3.3.3	不确定性评估.....	3.24
3.3.3.1	排放因子不确定性.....	3.24
3.3.3.2	活动数据不确定性.....	3.24
3.3.4	质量保证/质量控制（QA/QC）、报告和归档.....	3.24
3.3.4.1	质量保证/质量控制.....	3.24
3.3.4.2	报告和归档.....	3.25
3.4	己二酸生产.....	3.26
3.4.1	导言.....	3.26
3.4.2	方法学问题.....	3.26
3.4.2.1	方法选择.....	3.26

3.4.2.2	选择排放因子	3.27
3.4.2.3	选择活动数据	3.29
3.4.2.4	完整性	3.30
3.4.2.5	建立一致的时间序列	3.30
3.4.3	不确定性评估.....	3.30
3.4.3.1	排放因子不确定性	3.30
3.4.3.2	活动数据不确定性	3.30
3.4.4	质量保证/质量控制 (QA/QC)、报告和归档	3.30
3.4.4.1	质量保证/质量控制	3.30
3.4.4.2	报告和归档	3.31
3.5	己内酰胺、乙二醛和乙醛酸生产	3.32
3.5.1	导言	3.32
3.5.2	己内酰胺	3.32
3.5.2.1	方法学问题	3.32
3.5.2.2	不确定性评估	3.36
3.5.2.3	质量保证/质量控制 (QA/QC)、报告和归档	3.37
3.5.3	乙二醛和乙醛酸生产.....	3.38
3.6	电石生产	3.39
3.6.1	导言	3.39
3.6.2	方法学问题.....	3.39
3.6.2.1	方法选择	3.40
3.6.2.2	选择排放因子	3.42
3.6.2.3	选择活动数据	3.43
3.6.2.4	完整性	3.44
3.6.2.5	建立一致的时间序列	3.44
3.6.3	不确定性评估.....	3.44
3.6.3.1	排放因子不确定性	3.44
3.6.3.2	活动数据不确定性	3.44
3.6.4	质量保证/质量控制 (QA/QC)、报告和归档	3.45
3.6.4.1	质量保证/质量控制	3.45
3.6.4.2	报告和归档	3.45
3.7	二氧化钛生产	3.46
3.7.1	导言	3.46
3.7.2	方法学问题.....	3.46
3.7.2.1	方法选择	3.46
3.7.2.2	选择排放因子	3.47
3.7.2.3	选择活动数据	3.49
3.7.2.4	完整性	3.49

3.7.2.5	建立一致的时间序列	3.49
3.7.3	不确定性评估	3.49
3.7.3.1	排放因子不确定性	3.49
3.7.3.2	活动数据不确定性	3.49
3.7.4	质量保证/质量控制 (QA/QC)、报告和归档	3.50
3.7.4.1	质量保证/质量控制	3.50
3.7.4.2	报告和归档	3.50
3.8	纯碱生产	3.51
3.8.1	导言	3.51
3.8.2	天然纯碱生产	3.51
3.8.2.1	方法学问题	3.51
3.8.2.2	不确定性评估	3.53
3.8.2.3	质量保证/质量控制 (QA/QC)、报告和归档	3.54
3.8.3	索尔伟纯碱生产	3.54
3.8.3.1	质量保证/质量控制 (QA/QC)、报告和归档	3.55
3.9	石油化工和碳黑生产	3.56
3.9.1	导言	3.56
3.9.2	方法学问题	3.62
3.9.2.1	方法选择	3.62
3.9.2.2	选择排放因子	3.71
3.9.2.3	选择活动数据	3.80
3.9.2.4	完整性	3.82
3.9.2.5	建立一致的时间序列	3.82
3.9.3	不确定性评估	3.83
3.9.4	质量保证/质量控制 (QA/QC)、报告和归档	3.86
3.9.4.1	质量保证/质量控制	3.86
3.9.4.2	报告和归档	3.87
附件 3.9A	原料产品流程图	3.89
3.10	氟化物生产	3.91
3.10.1	来自HCFC-22 生产的HFC-23 排放	3.91
3.10.1.1	导言	3.91
3.10.1.2	方法学问题	3.91
3.10.1.3	不确定性评估	3.100
3.10.1.4	质量保证/质量控制 (QA/QC)、报告和归档	3.100
3.10.2	来自其它氟化合物生产的排放	3.101
3.10.2.1	导言	3.101
3.10.2.2	方法学问题	3.102
3.10.2.3	不确定性评估	3.105

3.10.2.4 质量保证/质量控制 (QA/QC)、报告和归档	3.105
参考文献	3.106

公式

公式 3.1 氨气生产中的 CO ₂ 排放量 – 方法 1	3.12
公式 3.2 氨气生产的总燃料需求 – 方法 2	3.13
公式 3.3 氨气生产中的 CO ₂ 排放量 – 方法 2 和方法 3	3.13
公式 3.4 氨气生产的总燃料需求 – 方法 3	3.13
公式 3.5 硝酸生产中的 N ₂ O 排放 – 方法 1	3.21
公式 3.6 硝酸生产中的 N ₂ O 排放 – 方法 2	3.21
公式 3.7 己二酸生产的 N ₂ O 排放 – 方法 1	3.26
公式 3.8 己二酸生产的 N ₂ O 排放 – 方法 2	3.27
公式 3.9 己内酰胺生产中的 N ₂ O 排放 – 方法 1	3.33
公式 3.10 己内酰胺生产中的 N ₂ O 排放 – 方法 2	3.33
公式 3.11 电石生产中的排放	3.40
公式 3.12 钛渣、合成金红石和金红石 TiO ₂ 生产中的 CO ₂ 排放 – 方法 1	3.47
公式 3.13 来自钛矿渣、合成金红石和金红石 TiO ₂ 生产中的 CO ₂ 排放 – 方法 2	3.47
公式 3.14 天然纯碱生产中 CO ₂ 排放 – 方法 1	3.51
公式 3.15 方法 1 CO ₂ 排放计算	3.64
公式 3.16 初级产品产量估算	3.64
公式 3.17 总合方法 2 质量平衡公式	3.66
公式 3.18 由初级产品 [乙烯] 产量估算次级产品产量	3.66
公式 3.19 由初级产品 [丙烯腈] 产量估算次级产品产量	3.66
公式 3.20 方法 3 CO ₂ 排放计算公式	3.67
公式 3.21 燃料燃烧方法 3 CO ₂ 排放计算	3.67
公式 3.22 火炬气方法 3 CO ₂ 排放计算	3.67
公式 3.23 方法 1 CH ₄ 逃逸排放计算	3.68
公式 3.24 方法 1 CH ₄ 过程泄放排放计算	3.69
公式 3.25 方法 1 CH ₄ 总排放量计算	3.69
公式 3.26 基于大气测量数据的方法 3 CH ₄ 排放计算	3.70
公式 3.27 方法 3 CH ₄ 排放计算公式	3.70
公式 3.28 燃料燃烧方法 3 CH ₄ 排放计算	3.70
公式 3.29 火炬气方法 3 CH ₄ 排放计算	3.71
公式 3.30 方法 1 计算使用缺省因子 (生产的) HCFC-22 中的 HFC-23	3.93
公式 3.31 方法 2 计算使用过程效率中计算的因子 (生产的) HCFC-22 中的 HFC-23	3.93

公式 3.32 计算碳平衡效率中的HFC-23 排放因子	3.93
公式 3.33 计算氟平衡效率中的HFC-23 排放因子	3.94
公式 3.34 方法 3a 计算单个过程流中的 HFC-23 排放（直接方式）	3.94
公式 3.35 方法 3b 计算单个过程流中的 HFC-23 排放（替代方法）	3.94
公式 3.36 方法 3c 计算单个过程流中的 HFC-23 排放（通过监控反应器产品）	3.95
公式 3.37 方法 3a 计算单个过程流中的瞬间 HFC-23 排放（直接方式）	3.95
公式 3.38 方法 3b 计算单个过程流量中的 HFC-23 排放（替代方法）	3.95
公式 3.39 方法 3b 计算替代方式的标准排放	3.96
公式 3.40 方法 3c 通过过程中测量计算单个设施中的HFC-23 排放	3.96
公式 3.41 方法 1 计算生产相关的排放	3.102
公式 3.42 方法 3 直接计算生产相关的排放	3.103
公式 3.43 方法 3 替代计算生产相关的排放	3.103

图

图3.1 估算氨气生产中 CO ₂ 排放量的决策树	3.14
图 3.2 估算硝酸生产中N ₂ O排放的决策树	3.22
图 3.3 估算己二酸生产中 N ₂ O排放的决策树	3.28
图 3.4 估算己内酰胺、乙二醛和乙醛酸生产中N ₂ O排放的决策树	3.35
图 3.5 电石生产中 CO ₂ 和 CH ₄ 排放的估算决策树	3.42
图 3.6 估算二氧化钛生产中 CO ₂ 排放的决策树	3.48
图 3.7 估算天然纯碱生产中 CO ₂ 排放的决策树	3.52
图 3.8 石化工业和碳黑工业中CO ₂ 排放估算的决策树	3.62
图 3.9 石化工业和碳黑工业中CH ₄ 排放估算的决策树	3.63
图 3.10 方法 2 碳质量平衡流程图	3.65
图 3.11 甲醇生产原料-产品流程图	3.89
图 3.12 二氯乙烷生产原料-产品流程图	3.89
图 3.13 环氧乙烷生产原料-产品流程图	3.90
图 3.14 丙烯腈生产原料-产品流程图	3.90
图 3.15 碳黑生产原料-产品流程图	3.91
图 3.16 HCFC-22 生产中 HFC-23 排放的决策树（或氟化物生产中的其它类似副产品排放）	3.98
图 3.17 生产过程中氟化温室气体排放的决策树（适用于逃逸排放和副产品排放）	3.104

表

表3.1 氨气生产的缺省总燃料需求（燃料和原料）以及排放因子（每吨NH ₃ ）	3.15
表 3.2 N ₂ O 减排方法和减排措施.....	3.20
表 3.3 硝酸生产的缺省因子.....	3.23
表 3.4 己二酸生产的缺省因子.....	3.29
表 3.5 己内酰胺生产的缺省因子.....	3.34
表 3.6 乙二醛和乙二醛酸生产的缺省因子.....	3.38
表 3.7 碳化硅生产中 CO ₂ 和 CH ₄ 排放的缺省因子	3.43
表 3.8 碳化钙生产和使用中 CO ₂ 排放的排放因子	3.43
表 3.9 二氧化钛生产的缺省因子（吨CO ₂ /吨产品）	3.48
表 3.10 石化原料和产品的特定碳含量.....	3.68
表 3.11 石化生产方法 1 缺省原料和过程.....	3.71
表 3.12 甲醇生产CO ₂ 排放因子	3.72
表 3.13 甲醇生产原料消耗因子.....	3.73
表 3.14 蒸汽裂解乙烯生产方法 1 CO ₂ 排放因子.....	3.74
表 3.15 缺省地理调整因子，用于方法 1 蒸汽裂解乙烯生产的 CO ₂ 排放因子	3.74
表 3.16 乙烯生产的缺省甲烷排放因子.....	3.75
表 3.17 二氯乙烷/氯乙烯生产过程方法 1 CO ₂ 排放因子	3.76
表 3.18 二氯乙烷/氯乙烯单体过程方法 1 CO ₂ 原料消耗因子	3.76
表 3.19 二氯乙烷/氯乙烯过程方法 1 缺省 CH ₄ 排放因子	3.77
表 3.20 环氧乙烷生产原料消耗与 CO ₂ 排放因子	3.77
表 3.21 环氧乙烷生产方法 1 CH ₄ 排放因子	3.78
表 3.22 丙烯腈生产CO ₂ 排放因子	3.78
表 3.23 碳黑生产方法 1 CO ₂ 排放因子.....	3.79
表 3.24 碳黑生产方法 1 CH ₄ 排放因子	3.79
表 3.25 乙烯蒸汽裂解原料-产品矩阵	3.81
表 3.26 丙烯腈生产过程的次级产品生产因子.....	3.81
表 3.27 排放因子和活动数据的不确定性范围.....	3.85
表 3.27（续）排放因子和活动数据的不确定性范围.....	3.85
表 3.28 HFC-23 缺省排放因子.....	3.99

框

框 3.1 为工业煤气回收的CO ₂	3.14
框 3.2 重复计算.....	3.16
框 3.3 尿素生产.....	3.16
框 3.4 重复计算.....	3.39
框 3.5 CaO 生产中的排放分配	3.40
框 3.6 重复计算.....	3.47
框 3.7 重复计算.....	3.55
框 3.8 甲醇过程说明.....	3.57
框 3.9 乙烯过程说明.....	3.58
框 3.10 二氯乙烷和氯乙烯单体过程说明.....	3.58
框 3.10（续）二氯乙烷和氯乙烯单体过程说明.....	3.59
框 3.11 环氧乙烷过程说明.....	3.59
框 3.12 丙烯腈过程说明.....	3.60
框 3.13 碳黑生产过程说明.....	3.61
框 3.14 工厂测量频率.....	3.99

3 化学工业排放

3.1 引言

以下 3.2-3.10 节给出了估算温室气体排放的指导，这些气体产生于各种无机和有机化学物质生产，很多国家的有关经验证实对全球或个别国家温室气体排放水平具有重大贡献。

- 3.2 节论述氨气生产的排放；
- 3.3 节论述了硝酸生产的排放；
- 3.4 节论述了己二酸生产的排放；
- 3.5 节论述了己内酰胺、乙二醛和乙醛酸生产的排放；
- 3.6 节论述了电石生产的排放；
- 3.7 节研究了二氧化钛生产的排放；
- 3.8 节研究了从纯碱生产中的排放；
- 3.9 节论述了石化和黑炭生产中关键过程的排放，即甲醇、乙烯和丙烯、二氯乙烷、环氧乙烷、丙烯腈和黑炭；
- 3.10 节研究了氟化物生产的排放，即源于 HCFC-22 生产的 HFC-23，其它氟化合物生产的逃逸排放和副产品排放，包括氢氟碳化物（HFC）、六氟化硫（SF₆）和六氟化铀（UF₆）。

应当注意避免，重复计算在本章和关于能源部门的第 2 卷中二氧化碳（CO₂）排放量，或遗漏 CO₂ 排放量，因为黑炭作为过程反应物生成的 CO₂ 排放量与作为驱动化学过程涉及的化学反应的热源生成的 CO₂ 排放量是紧密相关的。如果化工厂安装 CO₂ 捕获技术，捕获的 CO₂ 在高层排放计算中应当扣除。有关捕获、随后去除或使用 HFC-23 或其它氟化物的各项指南见 3.10 节。任何计算 CO₂ 捕获的方法均应考虑，过程中捕获的 CO₂ 排放可能是燃烧造成的，亦可能与过程有关。如果需要单独报告燃烧和过程排放（例如石油化工），则清单编制者应确保同一数量的 CO₂ 没有重复计算。在这些情况下，捕获的 CO₂ 总量应最好报告在，相应的能源燃烧中以及与这些源类别生成的 CO₂ 量成比例的 IPPU 源类别中。缺省假设是没有出现 CO₂ 捕获和储存（CCS）。有关 CO₂ 捕获和储存的附加信息，请参见第 3 卷 1.2.2 节；有关更多详细信息，请参见第 2 卷 2.3.4 节。

3.2 氨气生产

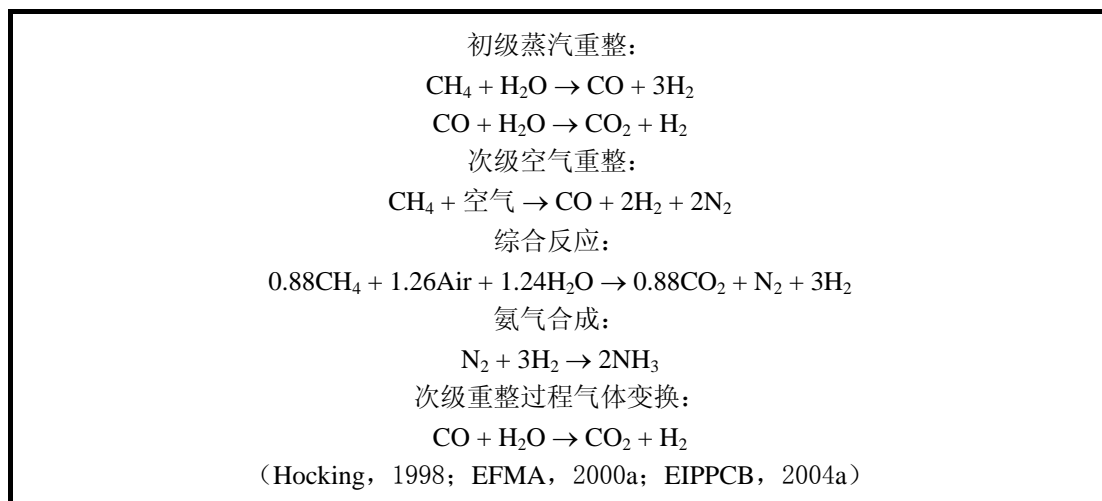
3.2.1 引言

氨气 (NH₃) 是主要的化工物质，且是生产的最重要含氮材料。氨气直接用于：肥料、热处理、造纸制浆、硝酸及硝酸盐生产、硝酸酯及硝基化合物生产、各类炸药和冷冻剂。胺类、酰胺和其它杂类有机化合物（如尿素）均是由氨气制成的 (Austin, 1984; 第 303 页)。

氨气生产需要氮 (N) 和氢 (H) 的来源。通过液态空气分馏或燃烧气体和回收残留氮的氧化过程，从空气中获得氮。大多数氨气产生于天然气（主要是甲烷 (CH₄)），不过 H 可以从其它碳氢化合物（煤（间接）、油）和水中获得 (Hocking, 1998; 第 317 页)。少量工厂在部分氧化过程中仍然将燃料油用作燃料给料和 H 来源。在初级蒸汽重整阶段和通过转换为二氧化碳的转换阶段的过程中，碳氢化合物的碳 (C) 含量被清除，其中二氧化碳转换是主要潜在的直接温室气体排放。使用氢而不使用天然气生产氨气的工厂不会从合成过程中释放 CO₂。

3.2.2 方法学问题

获得氨气给料的化学过程都很类似，不论使用的碳氢化合物 - CH₄ 或其它化石燃料 (Hocking, 1998; 第 319 页)。因为工业主要使用天然气，关于过程和温室气体 (CO₂) 来源的以下概述便是基于使用天然气的生产。天然气（主要是 CH₄）的催化蒸汽重整产生的无水氨气包含以下反应，产生的二氧化碳为副产品。



影响与氨气生产关联的 CO₂ 排放的过程为：

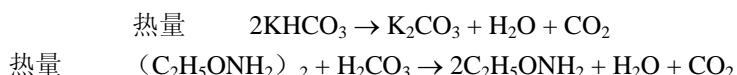
- 在两种温度下，用氧化铁、氧化铜和/或氧化铬催化剂将一氧化碳转换为二氧化碳；
- 用热碳酸钾、乙醇胺 (MEA)、砒胺法 (醇氨和二氧化四氢噻吩) 或其它的洗刷溶液，吸收二氧化碳；
- 用镍催化剂将残留的 CO₂ 变成甲烷的醇化反应，提纯合成气。

氨气生产是 CO₂ 排放的重要非能源工业来源。工厂使用天然气催化蒸汽重整过程时的 CO₂ 主要释放，发生在重新生成 CO₂ 洗刷溶液期间，脱甲烷亦产生少量排放。

如果工厂中安装和采用了 CO₂ 捕获技术，*优良作法*是在高层方法排放计算中扣除捕获的 CO₂。缺省假设是没有出现 CO₂ 捕获和储存 (CCS)。在大多数情况下，任何计算 CO₂ 捕获的方法均应考虑在燃烧和过程相关过程中捕获的 CO₂ 排放。然而，在氨气生产中，燃料和原料排放之间是没有区别的，所有排放均算入 IPPU 部门。同样，捕获的所有 CO₂ 均应算入 IPPU 部门。有关 CO₂ 捕获和储存的更多信息，请参见第 3 卷第 1.2.2 节；有关捕获和储存的更多详细信息，请参见第 2 卷第 2.3.4 节。

二氧化碳再生器

从过程煤气中吸收 CO₂ 后，再生（即重用）饱和洗刷溶液（例如碳酸钾、MEA 等），根据以下反应此溶液具有蒸汽汽提和/或沸腾时从重碳酸盐中释放 CO₂：



汽提的气体包含 CO₂ 和其它杂质，可以直接送往尿素工厂（开工时）、液态碳酸工厂或排放到大气中（加拿大环境，1987）。

浓缩汽提

低温变换之后冷却合成气形成浓缩物，含有少量 CO₂ 和其它过程杂质。浓缩物通过蒸汽提取，由此组成部分可以排到大气中，但是通常与过程蒸汽一起回收到过程中（美国环境署，1985）。

3.2.2.1 方法选择

方法选择将取决于国家情况，如图 3.1 决策树所示。从总燃料需求或从总燃料需求（用于 NH₃ 生产）估算得出的值中估算排放。燃料能源需求不单独计算。注意，在估算排放时，以能源单位（或体积单位）报告的值需要转换成质量单位。

根据可用的工厂级数据范围，将方法分类。方法 1 基于缺省值和国家统计资料；方法 2 基于完整的工厂级输出数据（按燃料输入类型和过程类型区分）和缺省值；而方法 3 完全基于工厂级输入数据。

方法 3 使用工厂级产出数据和每单位产出的工厂级燃料输入得出总燃料需求。同样，方法 3 还可以使用每单位产出的工厂级排放因子，前提是这些因子的来源是与每单位产出的燃料输入有关的工厂级详细数据。

方法 1

方法 1 使用氨气生产得出排放量如下：

$$\begin{array}{c} \text{公式 3.1} \\ \text{氨气生产中的 CO}_2 \text{ 排放量 - 方法 1} \\ E_{\text{CO}_2} = AP \cdot FR \cdot CCF \cdot COF \cdot 44/12 - R_{\text{CO}_2} \end{array}$$

其中：

E_{CO_2} = CO₂ 的排放量，单位为 kg

AP = 氨气产量，单位为吨

FR = 每单位产出的燃料需求，GJ/吨生产的氨气

CCF = 燃料的碳含量因子，kg C/GJ

COF = 燃料的碳氧化因子，比例形式

R_{CO_2} = 为下游使用回收的 CO₂（尿素生产），单位为 kg

氨气生产和排放因子可以从国家统计资料中获得，而排放因子可以由表 3.1 所示的缺省值确定。当没有燃料类型和/或过程类型的信息时，*优良作法*是使用表 3.1 所示的最高排放因子。为下游使用回收的 CO₂ 可以从生产的尿素数量中估算，其中 CO₂ 的估算通过以 CO₂ 对尿素的化学计量比 44/60 乘以尿素产量。当扣除尿素生产中使用的 CO₂ 时，*优良作法*是确保尿素使用中的排放量包括在清单的其它地方。如果没有有关尿素生产的数据，则*优良作法*是假定回收的 CO₂ 为零。

方法 2

最初步骤是确定总燃料需求。对于方法 2，每种燃料类型的总燃料需求按以下方式估算：

公式 3.2
氨气生产的总燃料需求 – 方法 2

$$TFR_i = \sum_j (AP_{ij} \cdot FR_{ij})$$

其中：

TFR_i = 燃料类型 i 的总燃料需求，GJ

AP_{ij} = 过程类型 j 中使用燃料类型 i 的氨气产量，单位为吨

FR_{ij} = 针对过程类型 j 中的燃料类型 i ，每单位产出的燃料需求，GJ/吨生产的氨气

氨气产量、燃料类型和过程类型可以从生产工厂获得，而每单位产出（FR）的燃料需求可以由表 3.1 所示的缺省值确定。根据公式 3.3 得出排放量：

公式 3.3
氨气生产中的 CO₂ 排放量 – 方法 2 和方法 3

$$E_{CO_2} = \sum_i (TFR_i \cdot CCF_i \cdot COF_i \cdot 44/12) - R_{CO_2}$$

其中：

E_{CO_2} = CO₂ 的排放量，单位为 kg

TFR_i = 燃料类型 i 的总燃料需求，GJ

CCF_i = 燃料类型 i 的碳含量因子，kg C/GJ

COF_i = 燃料类型 i 的碳氧化因子，比例形式

R_{CO_2} = 为下游使用回收的 CO₂（尿素产量、CO₂ 捕获和存储（CCS）），单位为 kg

当使用方法 2 时，燃料（CCF）的 C 含量和 C 氧化因子（COF）的获得，可用表 3.1 所示的缺省值或国家特定能源部门信息。有关尿素产量和 CCS 回收的 CO₂ 数据应从生产工厂获得。

方法 3

方法 3 要求燃料需求从生产工厂获得。总燃料需求是每个 NH₃ 生产工厂报告的总燃料需求之和。即：

公式 3.4
氨气生产的总燃料需求 – 方法 3

$$TFR_i = \sum_n TFR_{in}$$

其中：

TFR_i = 燃料类型 i 的总燃料需求，GJ

TFR_{in} = 工厂 n 使用的燃料类型 i 的总燃料需求，GJ

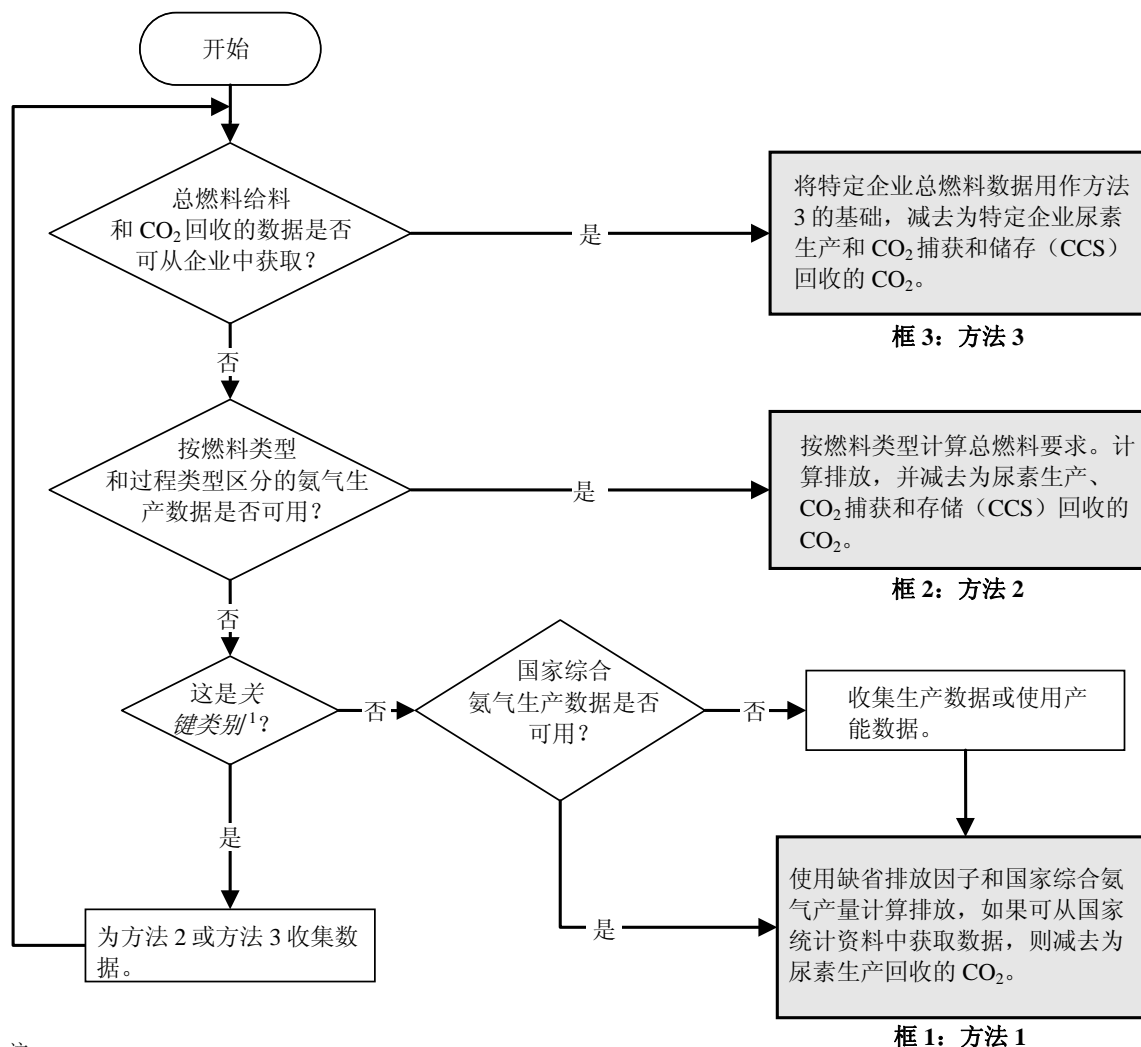
一旦收集和汇编了有关总燃料需求的数据，就可以使用公式 3.3 估算 CO₂ 排放量。当使用方法 3 时，优良作法是从生产工厂中获得有关 CCF 和 COF 的信息或使用国家特定能源部门的信息。对于方法 2，有关尿素生产（如果有）和 CCS（如果实施）回收的 CO₂ 数据应从生产工厂获得。

尽管方法 3 有关氨气生产的数据未用于计算，但是出于报告目的也需要从生产工厂收集。

框 3.1
为工业煤气回收的 CO₂

为工业煤气应用回收的 CO₂ 未单独计算，因为此量相对较少且属于短期使用，假定生产国家将所有工业煤气碳排放到大气中。例如，冷冻应用中使用的工业 CO₂ 假定在生产国释放。

图 3.1 估算氨气生产中 CO₂ 排放量的决策树



注:

1 有关关键类别和决策树使用的讨论，请参见第 1 卷第 4 章“方法选择和类别识别”（参见 4.1.2 节有关有限资源部分）。

3.2.2.2 选择排放因子

方法 1

如果没有工厂级信息，则优良作法是采用缺省因子。这些缺省值通常表示数据集的中点或平均值（如专家分析确定）。表示特定工厂排放率的范围未知。生产过程的缺省因子见表 3.1，应仅用在没有特定工厂数据时。缺省因子是以能源单位表示的每单位产出的总燃料需求的估算值。根据燃料的 C 含量和第 2 卷中的 C 氧化因子，可以将其转换为质量单位：这些指南的能源。这些值以及使用这些值得出的每吨 NH₃ 的 CO₂ 排放因子还包括在表 3.1 中。

对于方法 1，优良作法是使用每吨氨气的最高总燃料需求。如果没有相关燃料类型的信息，则优良作法是使用表 3.1 所示的平均值，用于部分氧化过程。

表 3.1
氨气生产的缺省总燃料需求（燃料和原料）以及排放因子（每吨 NH₃）

生产过程	总燃料需求 (GJ (NCV) /吨 NH ₃) ± 不确定性 (%)	碳含量因子 [CCF] ¹ (kg/GJ)	碳氧化因子 [COF] ¹ (比例形式)	CO ₂ 排放因子 (吨 CO ₂ /吨 NH ₃)
现代工厂 – 欧洲 常规重整 – 天然气	30.2 (± 6%)	15.3	1	1.694
过量空气重整 – 天然气	29.7 (± 6%)	15.3	1	1.666
自热重整 – 天然气	30.2 (± 6%)	15.3	1	1.694
部分氧化	36.0 (± 6%)	21.0	1	2.772
从特定能源消耗量（现代和传统工厂混合）的欧洲平均值得出 平均值 – 天然气	37.5 (± 7%)	15.3	1	2.104
平均值 – 部分氧化	42.5 (± 7%)	21.0	1	3.273

NCV – 净发热值。
¹ 第 2 卷第 1 章表 1.3 和 1.4 能源中的值。
 来源：改编自 EFMA（2000b；第 21 页）；de Beer、Phylipsen 和 Bates（2001；第 21 页）；根据天然气（干燥质）使用 C 含量可以得出现代工厂缺省因子，根据残留燃料油使用 C 含量可以得出部分氧化缺省因子。

方法 2

表 3.1 中每单位产出的总燃料需求值，可以与按燃料类型和过程类型有关 NH₃ 生产的数据一起使用，还可以结合与燃料的 C 含量因子和碳氧化因子有关的缺省数据或特定国家数据使用。

方法 3

有关总燃料需求的工厂级数据提供了计算氨气生产中 CO₂ 排放量最严格的数据。优良作法是从生产工厂获得有关 CCF 和 COF 的信息，或使用各国能源部门的数据。CCF 是得出 CO₂ 排放量的关键排放因子变量。使用工厂级氨气生产的排放量推导取决于每单位产出燃料需求的准确估算，以及其它变量的信息。

3.2.2.3 选择活动数据

方法 1

方法 1 需要有关国家 NH₃ 产量的数据。如果没有国家级活动数据，则可以使用有关产能的信息。如果清单编制者可以以文件证明一年的使用率低于产能，则优良作法是全国总产能乘以产能使用率因子的 80%±10%（即，70-90%的范围）。应当对时间序列的每一年适用相同的产能使用率因子。

方法 2

方法 2 需要按燃料类型和生产过程分类的有关氨气生产的工厂级数据。此外，需要下游使用或其它应用场合回收的 CO₂ 工厂级数据。

方法 3

方法 3 需要的工厂级活动数据是，按燃料类型分类的总燃料需求、下游使用或其它应用回收的 CO₂ 量以及氨气产量。尽管氨气产量未用于方法 3 计算，但是收集影响排放估算的所有活动数据可允许识别长期变化以及活动数据的任何误报。如果采用每单位产出的工厂级燃料需求，则需要收集工厂级生产数据。

框 3.2 重复计算

为了避免重复计算，氨气生产中使用的油或气（燃料和原料）总量必须从能源部门能源使用报告的数量中减去。

此外，尿素生产中为下游使用回收的 CO₂ 量必须从 CO₂ 总量中减去，推导出排放的 CO₂ 量。尿素使用中 CO₂ 的排放量应算入相应部门。尤其，用作肥料的**尿素使用**排放应纳入**农业、林业和其他土地使用 (AFOLU) 部门**（参见第 4 卷）。汽车催化变换器中尿素使用的排放应算入能源部门（第 2 卷）。本节中建议的方法涵盖了使用过程（例如碳酸使用中的排放）中回收的 CO₂ 生产的任何其它化学产品的排放，这些排放不应计算在其它 IPPU 部分或其它部门。

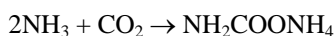
框 3.3 尿素生产

尿素 (CO (NH₂)₂)（氨基化合物或尿素）是重要的氮肥，在固体肥料中可用氮含量最高。尿素还用作反刍动物的蛋白质饲料补充剂，在三聚氰胺生产中用作树脂、熟料、粘合剂、涂料、纺织品抗皱剂和离子交换树脂生产的配料 (Austin, 1984; 第 311-312 页)。开发中使用是作为 NO_x 的选择性催化还原中的还原剂，NO_x 存在于来自柴油机或直喷式汽油机的废气。尿素使用中的排放应算入适当的应用部门。

尿素生产是与氨气生产工厂相关的下游过程。此过程使用来自氨气合成工厂中的氨气和副产品 CO₂ 流。

尿素生产是通过 NH₃ 和 CO₂ 进行化学反应产生氨基甲酸铵，然后根据以下反应脱水为尿素：

氨基甲酸铵生产：



氨基甲酸铵脱水为尿素：



假定 NH₃ 和 CO₂ 完全转化为尿素，则生产每吨尿素需要 0.733 吨 CO₂。现代工厂的温室气体排放可能较少。过量的 NH₃ 和 CO₂ 包含在反应期间形成的过程水份内。设计水处理，从过程水份中回收这些物质，使得回收的气体能够用于合成 (EIPPCB, 2004a; 第 118 页)。根据现代工厂的典型输入 (EIPPCB, 2004a; 第 121 页)，输入值意味着每吨尿素 CO₂ 的排放量范围从 2kg 到 7kg 不等。对于每天生产 1000 吨尿素的工厂，假定产能使用率为 90% 左右，这就意味着每年 CO₂ 排放量略超过 2Gg。

尽管尿素生产的排放在良好管理的现代工厂可能量不大，但**优良作法**是获得有关尿素生产的工厂级信息并计算任何重要的排放。

3.2.2.4 完整性

在针对方法 3 只有工厂报告数据子集的国家或方法 2 到方法 3 的过渡国家，过渡期间，使用方法 3 报告所有设施的排放可能是行不通的。其中方法 3 的数据不可用于所有工厂，方法 2 可用于剩余的工厂。另外，方法 2 的数据仅通告工厂的一个子集报告，或者方法 1 到方法 2 有个过渡时，可以确定非报告工厂表示的生产份额，并使用方法 1 及此信息估算剩余的排放，以确保过渡期间的完整性。

氨气生产的完整范围需要计算一切来源的所有排放。CO₂ 排放是显而易见的。确保从 CO₂ 过程的初级重整阶段或催化醇化反应产生的任何逃逸 CH₄ 排放均被纳入其中，可以改善完整性。为了纳入初级重整阶段的 NO_x、CO 和 SO₂ 排放，请参见第 1 卷第 7 章提供的指南：一般指南及报告。

3.2.2.5 建立一致的时间序列

每当排放量计算方法改变时，应重新计算所有年份的 CO₂ 排放量（例如，如果清单编制者从使用缺省值改为工厂级确定的实测值）。如果不能获得时间序列中所有年份的工厂级数据（包括特定工厂生产数据和下游使用数据），则必须考虑可以如何用目前的工厂数据重新计算以往年份的排放。如果工厂运行情况没有大的变化，可以把工厂目前的排放因子应用于往年的产量数据。重新计算是为了保证排放趋势的任何变化是真实的，而非程序性的人为改变。*优良作法*是按照第 1 卷第 5 章中提供的指南，对整个时间序列进行重新计算。

3.2.3 不确定性评估

3.2.3.1 排放因子不确定性

表 3.1 所示缺省值不确定性的估算根据：欧洲肥料制造商协会（2000a；第 21 页）和 de Beer、Phylipsen 及 Bates（2001；第 21 页）的数据。总之，气态输入和输出的缺省排放因子的不确定性高于固态或液态输入和输出的不确定性。气态物质的质量值受温度和压力变化的影响，气体通过过程泄漏更易损耗。*优良作法*是获得工厂级的不确定性估算，估算的值应小于与缺省值相关的不确定性值。缺省排放因子不确定性反应了不同地点工厂之间的差异。

3.2.3.2 活动数据不确定性

若从工厂获得活动数据，则不确定性估算可从生产工厂获得。这些活动数据可能是高度准确的（即，不确定性低至 ±2%）。这将包括燃料使用、氨气生产和回收的 CO₂ 的不确定性估算。从国家统计局获得的数据通常不包括不确定性估算。*优良作法*是咨询国家统计局，以获得有关任何抽样错误的信息。如果国家统计局从氨气生产设施群收集数据，预期国家统计资料中的不确定性与咨询工厂确定的不确定性没有差异。如果没有其它来源的不确定性值，则可以使用缺省值 ±5%。

3.2.4 质量保证/质量控制（QA/QC）、报告和归档

3.2.4.1 质量保证/质量控制

*优良作法*是按照第 1 卷第 6 章的概述实施质量控制检查。如果使用高层方法确定排放，则可以使用更加广泛的质量控制检查和质量保证程序。对于第 1 卷第 4 章确定的*关键类别*，鼓励清单编制者采用较高质量保证和质量控制方法。

排放因子比较

清单编制者应当检查排放因子估算值是否在方法 1 提供的缺省排放因子范围之内，还要确保此排放因子与过程化学分析得出的值一致。例如，生产每吨氨气，基于天然气的 CO₂ 生成率不应低于 1.14 吨 CO₂。如果排放因子在估算的范围之外，则*优良作法*是评估和记录说明差异的特定工厂条件。

工厂数据审核

排放量估算值的充分审计需要以下工厂数据：

- 由输入和输出数据组成的活动数据（输入数据应是总燃料需求 - 燃料能源输入数据加上原料输入数据）；
- 计算和估算方法；
- 假定列表；
- 任何特定工厂测量方法和测量结果的文档记录。

如果收集各工厂的排放量测量数据，清单编制者应确保该测量符合国家或国际认可的标准。现场所用的质量控制程序也应直接参考并纳入质量控制计划。如果测量做法同质量控制标准不一致，则清单编制者应重新考虑这些数据的使用。

3.2.4.2 报告和归档

*优良作法*是按照第1卷6.11节的概述，记录和归档生产国家排放清单估算需要的所有信息。不可能在国家清单报告中纳入所有文档记录。然而，清单应包括使用的方法汇总以及源数据参考，以使报告的排放估算保持透明，且计算步骤可具有可追溯性。

大多数生产数据和过程数据被厂家视为专有，特别是一个国家内仅有少量工厂时。*优良作法*是运用适当技术（包括数据集）以确保对保密数据的保护。第1卷第2.2节提供了有关管理机密数据的指南。

3.3 硝酸生产

3.3.1 引言

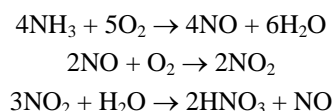
硝酸主要用作含氮化肥生产的原材料。硝酸还可用于己二酸和爆炸物（例如炸药）生产、金属腐蚀和黑色金属加工。

生产硝酸（ HNO_3 ）时，作为氨气（ NH_3 ）高温催化氧化的意外副产品，会生成氧化亚氮（ N_2O ）。形成的 N_2O 量取决于：特别是燃烧条件（压力、温度）、催化成分和年代以及火炉设计（EFMA, 2000b; 第 15 页）。此外，还生成某些 NO_x 。当过程极不稳定时，启动和关闭时形成的 NO_x 最明显（EFMA, 2000b; 第 15 页）。 N_2O 还生成在使用氮氧化物或硝酸作为原料的其他工业过程中（例如己内酰胺、乙二醛的制造和核燃料的再处理）。如果未减排，则硝酸将是大气中 N_2O 的重要来源，并是化学工业中 N_2O 排放的主要来源。然而，与硝酸生产中的其它排放不同，没有专门设计的成熟技术可去除 N_2O （Perez-Ramirez 等, 2003），近年来已经开发了对硝酸生产期间 N_2O 减排的大量技术。例如可以同时减少 N_2O 和 NO 排放的尾气过程（需要将氨气添加到尾气），涉及铂丝网后直接催化分解的过程气体选项，以及全面的催化剂分解选项。

有两类硝酸工厂：单段压力工厂和双段压力工厂。对于单段压力工厂，氧化过程和吸收过程基本上在相同的压力下进行；而对于双段压力工厂，吸收过程要在比氧化阶段更高的压力下进行。

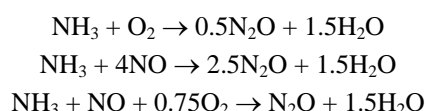
3.3.2 方法学问题

硝酸生产涉及三个不同的化学反应，可以概述如下：



硝酸生产期间的氧化亚氮生成没有很好地记录下来。总体减排条件下的氮类氧化步骤视为 N_2O 的潜在来源。氧化氮（ NO ）是硝酸生产的中间产品，按照记录易于在高压和温度范围 30°C 到 50°C 内分解为 N_2O 和二氧化氮（ NO_2 ）（Cotton 和 Wilkinson, 1988）。

Perez-Ramirez 等（2003; 第 123 页）具体说明在氨气氧化期间会导致形成 N_2O 的三种中间反应：



导致形成 N_2O 或 N_2 的反应是非预期的，因为这降低了 NH_3 的转换效率，减少了预期产品 NO 的产量（Perez-Ramirez 等, 2003; 第 124 页）。定义 NH_3 给料和 N_2O 形成之间的精确关系是不可能的，因为一般来说，“形成的 N_2O 量取决于燃烧条件、催化剂成分和状态（年代）以及火炉设计”（Perez-Ramirez 等, 2003; 第 123 页）。 N_2O 排放量取决于生产过程产生的量以及任何后续减排过程中去除的量。 N_2O 减排可能是有意识的，例如通过安装消除 N_2O 的专门设备；也有可能是在减排其它排放物如氮氧化物（ NO_x ）的系统中被无意识地减排。

Perez-Ramirez 等（2003; 第 126 页）按表 3.2 中概述分类以下减排方法和与每种方法关联的减排措施：

- 初级减排措施旨在避免在氨气炉中形成 N_2O 。这涉及到氨气氧化过程和/或催化剂的调整。
- 次级减排措施从宝贵的中间流量中，即从氨气转化器与吸收栏之间的 NO_x 气体中，去除 N_2O 。通常这意味着最高温度下的干预氨气氧化过程催化剂的直接下游。
- 三级减排措施涉及尾气处理，留待吸收塔去除 N_2O 。 N_2O 减排最可能的位置是尾气膨胀式涡轮机的上游。

- 四级减排措施是纯粹的管端解决方案，其中按照扩展装置下游沿着堆垛的路径处理尾气。

减排方法	减排措施
初级减排	<ul style="list-style-type: none"> • 优化氧化过程 • 调整铂-铑丝网 • 基于氧化物的燃烧催化剂
次级减排	<ul style="list-style-type: none"> • 火炉中同类物分解 • 火炉中催化分解（过程气体催化分解） • 火炉的催化分解下游（吸收塔之前）
三级减排	<ul style="list-style-type: none"> • 热分解 • 非选择性催化还原（NSCR） • 尾气催化分解 • 选择性催化还原（SCR）
四级减排	<ul style="list-style-type: none"> • 非选择性催化还原（NSCR） • 催化分解 • 选择性催化还原（SCR）
来源：改编自 Perez-Ramirez 等（2003）。	

实现的减排取决于用三级措施实现的技术，陈述为‘促成获得高的 N₂O 去除水平 (>99%)’（Perez-Ramirez 等，2003；第 136 页）。此外，要注意，尽管 NSCR 经证实为 N₂O 还原技术，对于 NO_x 还原用 SCR 替代 NSCR 系统对于 N₂O 还原应用场合具有负面副作用。此外，“由于高燃料消费水平和高次级排放，NSCR 很可能不再是可行选择”（Perez-Ramirez 等，2003；第 137 页）。

未来采用技术将取决于低本高效和任何排放规定的严格性。更加低本高效的选择适用于新工厂，而非现有工厂。因为尾气措施不干扰过程，所以这种措施富有吸引力。对于尾气温度高于 723K 的工厂，直接 N₂O 分解是非常富有吸引力且低本高效的措施。然而，欧洲 2/3 的硝酸工厂具有低温尾气。为此，需要预先加热或使用还原剂（少量碳氢化合物或氨气），使后处理难于进行。最优雅且低本高效的措施是过程中气体催化分解，它位于工厂的核心（氨气炉）。采用这种减排措施时，要考虑催化剂的化学和机械稳定性以及可能的零损耗。若干催化剂制造商和硝酸生产商已经解决了这个问题，且催化剂用于商业过程的早期阶段。有利的是，与尾气措施相反，此技术可以追溯应用到所有现有工厂。Perez-Ramirez 等（2003）提供了这些措施的进一步讨论。

3.3.2.1 方法选择

根据国情来选择优良作法方法。图 3.2 的决策树说明，优良作法是根据国情选择最适当的方法。可通过以下方式估算排放：

- 始终直接测量排放的连续排放监控（CEM）；
- 周期性排放监控，它在一段时期或周期内进行，可反映工厂的常见运作模式，推导出排放因子与输出相乘（100% HNO₃），从而推导出排放量；
- 不规则抽样，通过与输出（100% HNO₃）相乘得出排放因子，从而推导出排放量；
- 通过将缺省排放因子乘以输出（100% HNO₃）。

根据可用的工厂级数据范围，将方法分类。方法 2 和方法 3 均基于工厂级活动数据。

方法 1

按如下方式估算排放：

$$\text{公式 3.5}$$

$$\text{硝酸生产中的 N}_2\text{O 排放 - 方法 1}$$

$$E_{N_2O} = EF \cdot NAP$$

其中：

E_{N_2O} = N₂O 排放量，单位为 kg

EF = N₂O 排放因子（缺省值），kg N₂O/吨生产的硝酸

NAP = 硝酸产量，单位为吨

当采用方法 1 时，*优良作法*是假定 N₂O 排放没有减排，并根据表 3.3 所示的技术类型使用最高缺省排放因子。

方法 2

硝酸生产工厂很多（据估计有 255-600 家：Choe 等，1993；Bockman 和 Granli，1994），不同类型工厂的 N₂O 生成因子差别更大。因此，估算硝酸 N₂O 排放时，缺省因子可能是更常用的。如果采用缺省值估算硝酸生产的排放量，*优良作法*是根据类型将工厂分类并采用恰当的 N₂O 生成因子。

方法 2 使用按技术类型分解的工厂级生产数据，以及按技术类型分类的缺省排放因子。按如下方式计算排放量：

$$\text{公式 3.6}$$

$$\text{硝酸生产中的 N}_2\text{O 排放 - 方法 2}$$

$$E_{N_2O} = \sum_{i,j} [EF_i \cdot NAP_i \cdot (1 - DF_j \cdot ASUF_j)]$$

其中：

E_{N_2O} = N₂O 排放量，单位为 kg

EF_i = 技术类型 *i* 的 N₂O 排放因子，kg N₂O/吨生产的硝酸

NAP_i = 技术类型 *i* 的硝酸产量，单位为吨

DF_j = 减排技术类型 *j* 的去除因子，比例形式

ASUF_j = 减排技术类型 *j* 的减排系统使用因子，比例形式

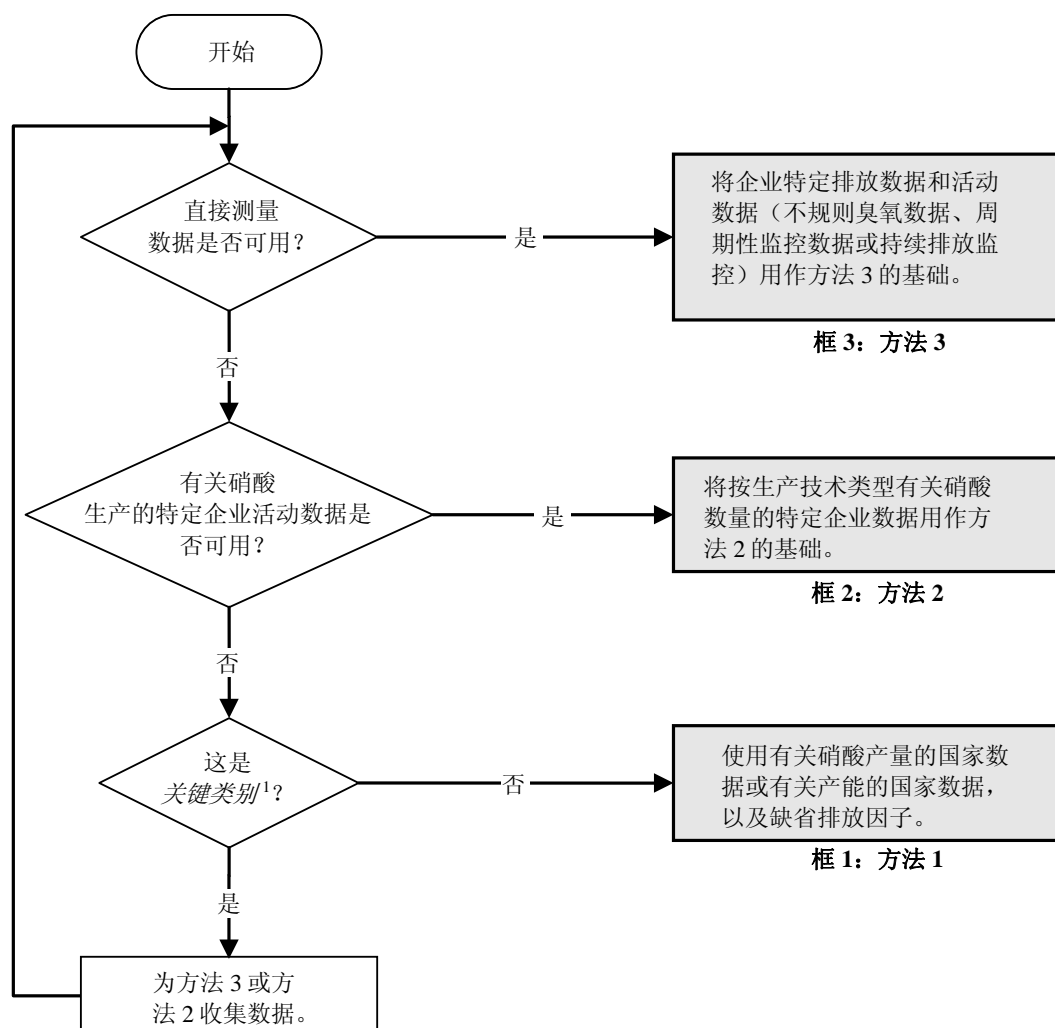
注意：表 3.3 显示的缺省排放因子包括了对相关减排技术排放的影响。若要使用这些因子，清单编制者应验证减排技术是否在个别工厂中安装且全年运行。

估算 N₂O 排放量的基本公式包括补充的术语，可识别 N₂O 减排技术的潜在未来使用。N₂O 去除因子必须乘以减排系统的使用系数，以便说明排放减排设备的故障时间（即减排设备不运转的时间）。

方法 3 - 直接测量

方法 2 采用的技术特定排放因子反应了国家技术组合。方法 3 是基于真实的测量数据（例如 CEMS）。工厂级生产数据的分类按照技术类型和直接测量排放时获得的工厂级排放因子。这些的推导可以用 N₂O 排放的不规则抽样或一段时期（周期）实施的 N₂O 周期性排放监控，可反映工厂运转的常见模式。排放的推导可使用公式 3.6。

方法 3 亦可使用连续排放监控（CEM）的结果，不过由于资源成本大多数工厂不可能采用 CEM。使用 CEM 时，可根据测量的 N₂O 排放量之和估算出排放量，而 N₂O 排放量可在每个监控时间间隔的监控排放内，从 N₂O 的浓度推导出来。

图 3.2 估算硝酸生产中 N₂O 排放的决策树

注：

1 有关关键类别和决策树使用的讨论，请参见第 1 卷第 4 章“方法选择和类别识别”（参见 4.1.2 节有关有限资源部分）。

3.3.2.2 选择排放因子

方法 1

优良作法是假定 N₂O 排放没有减排，且根据表 3.3 所示的技术类型使用最高缺省排放因子。

方法 2

如果没有工厂级数据，优良作法是采用缺省因子。这些缺省值通常表示数据集的中点或平均值（如专家分析确定）。表示特定工厂排放率的范围未知。表 3.3 中的缺省因子应仅使用于没有特定工厂测量数据时。

表 3.3 包括了 N₂O 的排放因子和相关不确定性。表 3.3 列出的因子用于非选择性催化还原（NSCR）（可用于管理减排 N₂O 的 NO_x 减排技术）类工厂，这些因子已经整合了 N₂O 减排措施的影响。若要使用这些因子，清单编制者应验证减排技术是否在个别工厂中安装且全年运行。

方法 3

工厂测量法可提供最严格的数据，用于计算净排放量（即，N₂O 生成和去除因子）。监控硝酸生产产生的 N₂O 排放是切实可行的，因为这是点排放源，况且生产工厂的数量有限。在现有技术条件下，对排放率进行采样和监测的仪器不会制约整体测量的精度或准确性。通常，采样频率和采样时间足以避免系统误差，实现期望的准确度水平。

作为一项通则，*优良作法*是每当工厂对工艺流程采取任何足以影响 N_2O 生成率的改动时，都应进行采样和分析，而且要有足够多的采样次数，除非能够保证工况不变。此外，每年都应当咨询工厂操作人员以确定是否采用了特定的去除技术，并确认其使用情况，因为技术可能随时间而发生变化。排放率和减排效率的精确测量要求测量出口和无控制时二者的流量。测量数据仅可用于出口流量时，*优良作法*是将排放基于这些数据。在这种情况下，提供减排效率的任何可用估算仅应供通报目的，而非用于计算排放量。

表 3.3
硝酸生产的缺省因子

生产过程	N_2O 排放因子 (与 100% 纯酸有关)
具有 NSCR ^a 的工厂 (所有过程)	2 kg N_2O /吨硝酸 \pm 10%
具有集成过程或尾气 N_2O 去除的工厂	2.5 kg N_2O /吨硝酸 \pm 10%
大气压力工厂 (低压)	5 kg N_2O /吨硝酸 \pm 10%
中等压力燃烧工厂	7 kg N_2O /吨硝酸 \pm 20%
高压工厂	9 kg N_2O /吨硝酸 \pm 40%
^a 非选择性催化还原 (NSCR) 来源: van Balken (2005)。	

3.3.2.3 选择活动数据

*优良作法*是详细编制生产数据，可能时允许使用方法 2 或方法 3。活动数据应基于 100% HNO_3 ，*优良作法*是确保报告的所有生产数据用于 100% HNO_3 。

方法 1

方法 1 需要有关国家硝酸生产的数据。国家硝酸统计资料可能遗漏了大比例的国家总量（详细信息请参见 3.3.2.4 节“完整性”）。如果没有国家级活动数据，则可以使用有关产能的信息。*优良作法*是全国产能总量乘以产能使用因子的 $80\% \pm 10\%$ （即，70-90%的范围）。

方法 2

方法 2 需要按技术类型和减排系统类型分类的工厂级生产数据。*优良作法*是收集活动水平（产量）数据的详细程度与任何生成和去除数据一致。由于具有准确信息的经济价值，典型的工厂级生产数据假定 $\pm 2\%$ 的不确定性。

方法 3

对于方法 2，需要按技术和减排系统类型分类的工厂级生产数据。*优良作法*是收集活动水平（产量）数据的详细程度与任何生成和去除数据一致。尽管生产数据未用于基于 CEM 的排放估算，仍应收集和报告这些数据，以确保影响排放的变量变化可长期得到监控。由于具有准确信息的经济价值，典型的工厂级生产数据假定 $\pm 2\%$ 的不确定性。

3.3.2.4 完整性

国家编制的硝酸生产统计资料可能低估产量。据国家硝酸产量数据编译的全球统计资料，与全球产量工业估算的比较研究认为，全国统计只覆盖了总产量的 50-70%（Bouwman 等，1995；Olivier，1999）。这可能是由于一部分硝酸生产汇总为更大生产过程的一部分，而从未成为商品的一部分，所以未能包括在国家统计中。*优良作法*是使用某些方法计算这些源产量，诸如通过国家 NO_x 排放量登记册来确定硝酸产量， NO_x 是硝酸生产另一种意外的副产品。

设计用于减排 N_2O 的 NSCR 和 SCR 系统可能会引起其它排放，例如 CO 、 CO_2 和碳氢化合物（ CH_4 和 NMVOC）。这些排放取决于使用的碳氢化合物还原剂（甲烷（ CH_4 ）、丙烷（ C_3H_8 ）、丙烯

(C_3H_6)、LPG)。排放估算可以根据使用还原剂量以及燃烧的完整性。实现排放估算需要工厂级信息。随着更多信息的获得，可以制定长期缺省值，但是目前没有缺省值。估算这些排放的方法未纳入这些指南，然而，鼓励清单编制者调查这些排放源并开发适当的方法。

一个国家内通常仅有几个硝酸工厂，建议依据工厂特定数据计算排放。在针对方法 3 只有工厂报告数据子集的国家或方法 2 到方法 3 的过渡国家，过渡期间，使用方法 3 报告所有设施的排放可能是行不通的。其中方法 3 的数据不可用于所有工厂，方法 2 可用于剩余的工厂。另外，方法 2 的数据仅通告工厂的一个子集报告，或者方法 1 到方法 2 有个过渡时，可以确定非报告工厂表示的生产份额，并使用方法 1 及此信息估算剩余的排放，以确保过渡期间的完整性。

3.3.2.5 建立一致的时间序列

当排放量计算方法改变时，应重新计算所有年份的 N_2O 排放量（例如，清单编制者从使用缺省值改为使用工厂确定的实测值）。如果工厂级数据不可用于时间序列中所有年份，则必须考虑可以如何用目前的工厂测量数据来重新计算以往年份的排放量。如果工厂运行情况没有大的变化，可以把工厂目前的排放因子应用于往年的产量数据。需要这种重新计算，以保证排放趋势的任何变化是真实的，而非人为的程序性变化。*优良作法*是按照第 1 卷第 5 章中提供的指南，对整个时间序列进行重新计算。

3.3.3 不确定性评估

3.3.3.1 排放因子不确定性

表 3.3 显示的缺省值之不确定性是基于专家判断的估算。一般来说，气态物质的缺省排放因子具有较高的不确定性，因为气态物质的质量值受温度和压力变化的影响，气体更易因过程泄漏而损耗。硝酸生产的缺省值具有相对较高的不确定性，有两种原因。首先， N_2O 可能作为意外反应副产品生成于硝酸生产的纱网反应器里（Cook，1999）。其次，废气可能或不可能进行 NO_x 控制处理，且 NO_x 减排系统可能或不可能减少（或甚至提高）已处理气体的¹的 N_2O 浓度。*优良作法*是获得工厂级的不确定性估算，估算值应小于与缺省值相关的不确定性值。

3.3.3.2 活动数据不确定性

若从工厂获得活动数据，则不确定性估算可从生产工厂获得。从国家统计局获得的数据通常不包括不确定性估算。*优良作法*是咨询国家统计局，以获得有关任何抽样错误的信息。国家统计局从氨气生产设施群收集硝酸数据时，预期国家统计资料中的不确定性与工厂级咨询建立的不确定性没有差异。如果没有其它来源的不确定性值，则可以使用缺省值 $\pm 2\%$ 。若要减少不确定性，*优良作法*是确保所有活动数据均为 100% HNO_3 。

3.3.4 质量保证/质量控制（QA/QC）、报告和归档

3.3.4.1 质量保证/质量控制

*优良作法*是按照第 1 卷第 6 章的概述实施质量控制检查。如果使用高层方法确定排放，则可以使用更加广泛的质量控制检查和质量保证程序。对于第 1 卷第 4 章确定的*关键类别*，鼓励清单编制者采用较高层次的质量保证和质量控制方法。

对采用不同方法估算的排放量进行比较

如果采用各个硝酸厂的数据计算排放（自下而上方法），清单编制者应当将其与按照全国产量数据估算的结果（自上而下方法）进行比较。清单编制者应记录结果并调查任何未解释的差异。

¹ 在某些情况下，设计用于减少 NO_x 排放的过程可能导致更多 N_2O 生成。由于 NO_x 减排技术而使 N_2O 浓度增加，这已经在各个电厂中测量出来，这些电厂对 NO_x 采用非催化还原（Cook，1999）。至少已经从一家硝酸厂了解到， NO_x 控制导致了 N_2O 排放增多（Burtscher，1999）。

由于工业 N_2O 排放源相对小于其它人为排放和自然排放源，不可能将其与观测到的大气中 N_2O 浓度趋势进行比较。

工厂级数据

清单编制者应归档足够信息，以允许独立评审从基准年开始的排放时间序列，并解释进行历史比较时的排放趋势。如果需要重新计算，这尤其重要，例如当清单编制者在工厂级确定的从使用缺省值到改用实际值时。

直接测量排放量的修正

如果工厂级 N_2O 测量结果可用，则清单编制者应当确认采用了国际认可的标准方法。如果测量作法不符合此标准，他们应评估这些排放数据的使用。此外，他们应按照 QA/QC 结果重新考虑不确定性估算。

清单编制者应当将工厂级排放因子与 IPCC 缺省因子进行比较，以确保特定工厂排放因子的合理性。他们应对这两种因子的差异做出解释并整理成文，尤其要解释可能导致这些差异的工厂差异特性。

3.3.4.2 报告和归档

*优良作法*是按照第1卷6.11节的概述，记录和归档生产国家排放清单估算需要的所有信息。

以下列出一些与此源类别相关的具体文档和报告的例子：

- 描述采用的方法；
- 硝酸工厂数量；
- 排放因子；
- 产量数据；
- 生产能力；
- 采用减排技术的工厂数量；
- 减排技术的类型、去除效率和使用率；
- 任何其它假设。

工厂操作人员应向清单编制者提供上述信息供编汇，并对现场情况记录存档。如果进行工厂实测，操作人员还应将测量的频度、仪器校准记录等记入工作日志并存档。

如果全国仅有一两家生产工厂，活动水平数据可视为机密。在此情况下，操作人员和清单编制者应该决定，汇总到何种程度既可以报告信息又可以保证机密性。在工厂一级，还应该对包括仪器记录在内的详细信息进行存档。

不可能在国家清单报告中纳入所有文档记录。然而，清单应包括使用的方法汇总以及源数据参考，以使报告的排放估算保持透明，且计算步骤可具有可追溯性。

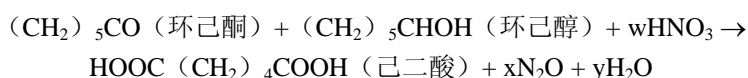
3.4 己二酸生产

3.4.1 引言

己二酸用于大量产品的生产，包括合成纤维、涂料、塑料、聚氨酯泡沫、人造橡胶和合成润滑剂。尼龙 6.6 的生产要考虑批量使用己二酸。如 Hocking (1998; 第 657 页) 所述，‘作为尼龙 6.6 生产中的己二酸，很大一部分消耗量是直接的，但是相当部分己二酸被进一步处理以生产需要的另一单体环己胺。还有少量己二酸转化为二乙基己基酯 (di-2-ethylhexyl) 或双己基酯，在柔性 PVC 等中用作可塑剂或作为合成电机油的高熔点成分’。

3.4.2 方法学问题

己二酸是由环己酮/环己醇混合物制造的二羧酸，放入催化剂由硝酸氧化形成己二酸。生成氧化亚氮 (N_2O) 作为硝酸氧化阶段意外的副产品。



如果未减排，己二酸是大气中 N_2O 的重要来源。 N_2O 排放量取决于生产过程产生的量以及任何后续减排过程中去除的量。通过安装专门设计用于去除 N_2O 的设备，可有计划的实现 N_2O 减排。己二酸生产还会导致 NMVOC、CO 和 NO_x 的排放。己二酸生产的过程排放会随着采用的排放控制级别而有明显差异。

3.4.2.1 方法选择

图 3.3 的决策树说明，*优良作法*是根据国情选择最适当的方法。估算排放的方式包括始终直接测量排放的持续排放监控 (CEM)，在某个时期 (周期) 实施的周期性排放监控 (可反映工厂常见的运营模式，推导出排放因子，此因子乘以输出可得出排放)，不规则抽样推导出排放因子 (通过与输出相乘得出排放或者输出乘以缺省排放因子)。

根据可用的工厂级数据范围，将方法分类。方法 2 和方法 3 需要工厂级活动数据。

方法 1

按如下方式估算排放：

$$\text{公式 3.7} \\ \text{己二酸生产的 } N_2O \text{ 排放 - 方法 1} \\ E_{N_2O} = EF \cdot AAP$$

其中：

E_{N_2O} = N_2O 排放量，单位为 kg

EF = N_2O 排放因子 (缺省值)，kg N_2O /吨生产的己二酸

AAP = 己二酸产量，单位为吨

当采用方法 1 时，*优良作法*是假定 N_2O 排放没有减排，使用表 3.4 所示的最高缺省排放因子。

方法 2

方法 2 使用工厂级生产数据和缺省排放因子。如果采用缺省值估算排放量，*优良作法*是根据采用的减排技术类型和减排技术的使用率因子将工厂分类。按如下方式计算排放量：

公式 3.8
己二酸生产的 N₂O 排放 – 方法 2

$$E_{N_2O} = \sum_{i,j} [EF_i \cdot AAP_i \cdot (1 - DF_j \cdot ASUF_j)]$$

其中：

E_{N_2O} = N₂O 排放量，单位为 kg

EF_i = 技术类型 i 的 N₂O 排放因子，kg N₂O/吨生产的己二酸

AAP_i = 技术类型 i 的己二酸产量，单位为吨

DF_j = 减排技术类型 j 的去除因子，比例形式

$ASUF_j$ = 减排技术类型 j 的减排系统使用因子，比例形式

估算 N₂O 排放的基本公式包括其它术语，可识别 N₂O 减排技术的使用。N₂O 去除因子必须乘以减排系统的使用系数，以便说明排放减排设备的故障时间（即减排设备不运转的时间）。

为达到最高的准确度，*优良作法*是在工厂级应用此公式，使用工厂特定测量数据的 N₂O 排放和去除因子。在这种情况下，国家排放总量就等于各工厂排放量的总和。如果没有工厂级数据信息，则*优良作法*是根据实现的减排技术，按照表 3.4 “己二酸生产的缺省因子”所提供的缺省 N₂O 生成因子和去除因子。若要使用这些因子，清单编制者应验证减排技术是否在个别工厂中安装且全年运行。

方法 3 – 直接测量

方法 3 使用工厂级生产数据和工厂级排放因子，这些值是通过直接测量排放获得的。这些的推导可以用 N₂O 排放的不规则抽样或一段时期（周期）实施的 N₂O 周期性排放监控，可反映工厂运转的常见模式。排放的推导可使用公式 3.8。为了达到最高的准确度，*优良作法*是在工厂级应用此公式，使用相关特定工厂测量数据制定的 N₂O 排放和去除因子。鉴于己二酸生产工厂数量较少（全球大约 23 家，Choe 等，1993），获取工厂数据所要求的额外资源很少。

方法 3 亦可使用连续排放监控（CEM）的结果，不过由于资源成本大多数工厂不可能采用 CEM。使用 CEM 时，可根据测量的 N₂O 排放量之和估算出排放量，而 N₂O 排放量可在每个监控时间间隔的监控排放内，从 N₂O 的浓度推导出来。

3.4.2.2 选择排放因子

方法 1

*优良作法*是使用表 3.4 所示的缺省排放因子，并假定 N₂O 排放没有减排。

方法 2

如果没有工厂级数据，*优良作法*是采用缺省因子。方法 2 基于缺省排放因子。这些缺省值通常表示数据集的中点或平均值（如专家分析确定）。表示特定工厂排放率的范围未知。表 3.4 中的缺省因子应仅使用于没有特定工厂测量数据时。

表 3.4 还包括了缺省 N₂O 去除因子（通常用于减排技术）和相关的 uncertainty。若要使用这些因子，清单编制者应验证减排技术是否在个别工厂中安装且全年运行。若不能确定是否采用了减排技术，则会导致高估排放量。确定适当的值时，需要按照实施的减排技术将工厂分类。

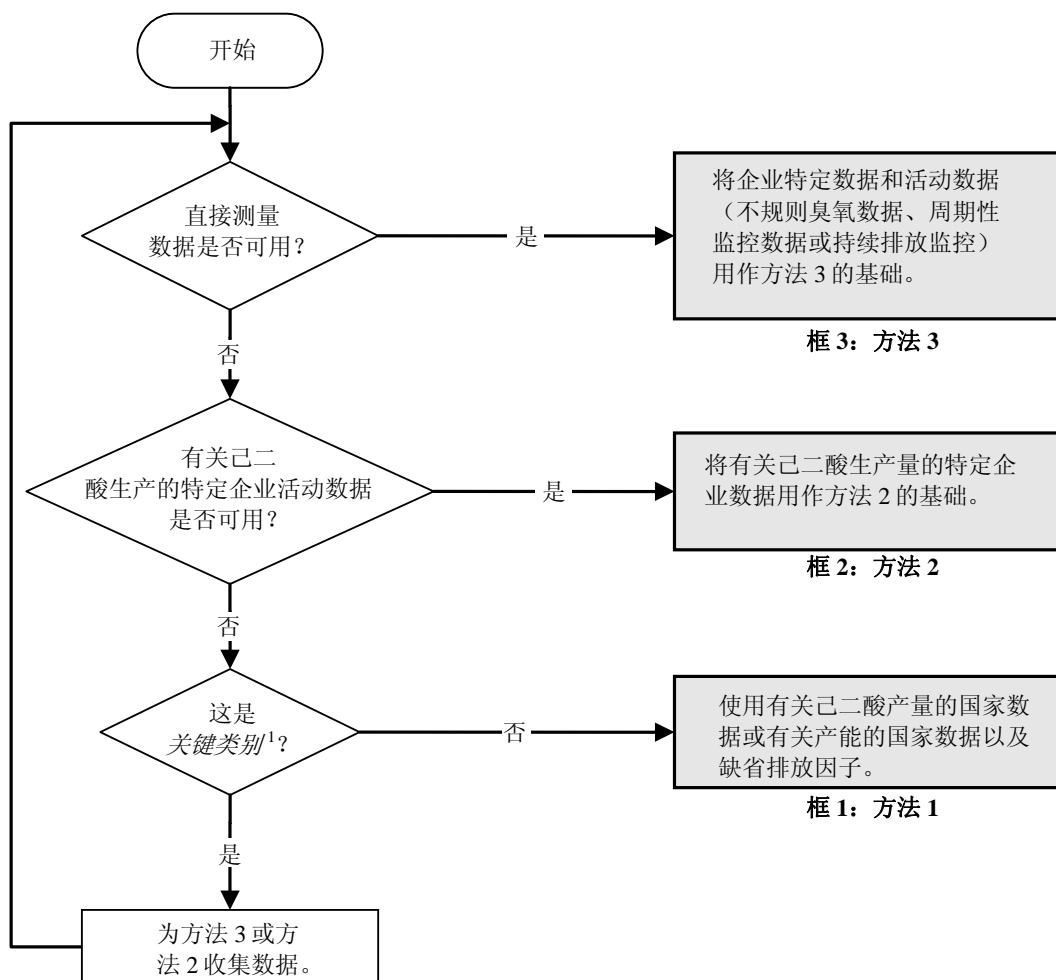
方法 3

方法 3 需要工厂测量数据。如果 N₂O 减排系统正在使用，则工厂测量可提供最严格的数据，用于计算净排放量（即，N₂O 生成和去除因子）。监控己二酸生产产生的 N₂O 排放是切实可行的，因为这些是点排放源，况且生产工厂的数量有限。在现有技术条件下，对排放率进行采样和监测的仪器不会制约整体测量的精度或准确性。通常，采样频率和采样时间足予避免系统误差，实现期望的准确度水平。

未使用 N₂O 减排系统时，可以对排放周期性监控获得特定工厂排放因子，其中，周期性监控排放乘以产量级别以估算工厂级排放。

作为一项通则，*优良作法*是每当工厂对工艺流程采取任何足以影响 N_2O 生成率的改动时，都应进行采样和分析，而且要有足够多的采样次数，除非能够保证工况不变。此外，每年都应当咨询工厂操作人员以确定是否采用了特定的去除技术，并确认其使用情况，因为技术可能随时间而发生变化。排放率和减排效率的精确测量要求测量出口和无控制时二者的流量。测量数据仅可用于出口流量时，*优良作法*是将排放基于这些数据。在这种情况下，提供减排效率的任何可用估算仅供通报目的，而非用于计算排放量。

图 3.3 估算己二酸生产中 N_2O 排放的决策树



注：

1 有关关键类别和决策树使用的讨论，请参见第 1 卷第 4 章“方法选择和类别识别”（参见 4.1.2 节有关有限资源部分）。

表 3.4
己二酸生产的缺省因子

生产过程	N ₂ O 生成因子 ^{a, d}	不确定性估算
硝酸氧化	300 kg/吨己二酸 (未控制)	±10% (基于专家判断)。300kg±10%的范围包含了从纯酮到纯乙醇原料的变率, 大多数制造商处于中间。 ^a
减排技术	N ₂ O 去除因子 ^b	不确定性估算
催化去除	92.5%	90-95% (基于专家判断)。已知采用这种技术的制造商包括: BASF (Scott, 1998) 和 DuPont (Reimer, 1999b)。
热去除	98.5%	98-99% (基于专家判断)。已知采用这种技术的制造商包括: Asahi、DuPont、Bayer 和 Solutia (Scott, 1998)。
回收为硝酸	98.5%	98-99% (基于专家判断)。已知采用这种技术的制造商包括: Alsachemie (Scott, 1998)。
回收为己二酸的原料	94%	90-98% (基于专家判断)。Solutia 于 2002 年左右实现了此技术。
减排系统	使用率因子 ^d	不确定性估算
催化去除	89%	80-98% (基于专家判断) ^c 。
热去除	97%	95-99% (基于专家判断) ^c 。
回收为硝酸	94%	90-98% (基于专家判断) ^c 。
回收为己二酸	89%	80-98% (基于专家判断) ^c 。

^a 关于日本环境署的值 (1995) (282 kg N₂O/吨己二酸), 据信此制造商使用纯环乙醇 (乙醇) 的氧化, 而不使用酮-乙醇混合物 (Reimer 等, 1999)。这是已知使用此方法的唯一工厂。

^b 去除因子 (表示技术排放效率) 应乘以减排系统使用率因子。

^c 注意这些缺省值基于专家判断, 而不是工业提供的数据或特定工厂的测量数据。在实现减排技术的首个 1-5 年, 使用率因子趋向于范围的下限。导致设备的低使用一般是因为, 在需要学习如何操作减排系统, 最初阶段会出现更多维护问题。1-5 年之后, 积累了操作经验, 使用率因子会趋向于范围的上限。

来源:

^d Thiemans 和 Trogler (1991)。

^e Reimer (1999b)。

3.4.2.3 选择活动数据

优良作法是详细编制生产数据, 以允许使用方法 2 或方法 3。

方法 1

方法 1 需要有关国家己二酸生产的数据。如果没有国家级活动数据, 则可以使用有关产能的信息。优良作法是全国产能总量乘以产能使用因子的 80%±10% (即, 70-90%的范围)。

方法 2

方法 2 需要按减排技术类型分类的工厂级生产数据。优良作法是收集活动水平 (产量) 数据的详细程度与任何生成和去除数据一致。由于准确信息具有经济价值, 通常工厂级的产量数据精确到±2%。

方法 3

对于方法 2, 当使用不规则或周期性排放抽样数据推导排放估算时, 需要按减排技术类型分类的工厂级生产数据。优良作法是收集活动水平 (产量) 数据的详细程度与任何生成和去除数据一致。尽管生产数据未用于估算是基于 CEM 的排放估算, 仍应当收集和报告这些数据, 以确保影响排放的变量变化可随时间而得到监控。由于准确信息具有经济价值, 通常工厂级的产量数据精确到±2%。

3.4.2.4 完整性

己二酸源类别的范围完整性是显而易见的，因为只有少量易识别的工厂。

3.4.2.5 建立一致的时间序列

当排放量计算方法改变时，应重新计算所有年份的 N_2O 排放量（例如，清单编制者从使用缺省值改为使用工厂确定的实测值）。如果工厂级数据不可用于时间序列中所有年份，则必须考虑可以如何用目前的工厂测量数据来重新计算以往年份的排放量。如果工厂运行情况没有大的变化，可以把工厂目前的排放因子应用于往年的产量数据。需要这种重新计算，以保证排放趋势的任何变化是真实的，而非人为的程序性变化。*优良作法*是按照第1卷第5章中提供的指南，对整个时间序列进行重新计算。

3.4.3 不确定性评估

3.4.3.1 排放因子不确定性

表 3.4 显示的缺省值不确定性是基于专家判断估算。一般来说，己二酸缺省排放因子具有相对的确切性，因为它们推算于有计划的化学反应（硝酸氧化）化学计量式和特定 N_2O 减排系统。己二酸排放因子的不确定性反映了 N_2O 生成情况的差异，这归咎于各生产厂家所采用的环己酮和环己醇原料（即酮和醇）的合成物不同。酮含量较高时产生的 N_2O 较多，而醇含量较高时产生的 N_2O 较少（Reimer, 1999a）。根据基于硝酸（ HNO_3 ）消耗量的过程，各个工厂应能够将 N_2O 产量精确到 1%。表 3.4 显示了缺省值的不确定性。

3.4.3.2 活动数据不确定性

对于己二酸生产，每公吨生产的潜在 N_2O 排放远远高于其它 N_2O 工业来源。从正确维护和校准的监测系统中获得的测量数据，可以采用 3.8 公式确定，将排放量控制在 95% 置信区间的 $\pm 5\%$ 范围内。鉴于己二酸工厂数量少，国家生产数据（方法 1）的不确定性等同于工厂级数据的不确定性，即 $\pm 2\%$ 。

3.4.4 质量保证/质量控制（QA/QC）、报告和归档

3.4.4.1 质量保证/质量控制

*优良作法*是实施第 6 章第 1 卷概述的质量控制检查以及排放估算的专家评审。也可以采用第 1 卷介绍的附加质量控制核查和质量保证程序，尤其是当运用较高级方法来估算这种排放源类别的排放时。对于第 1 卷第 4 章确定的*关键类别*，鼓励清单编制者采用较高质量保证和质量控制方法。

除第 1 卷的指南外，与该排放源类别相关的具体程序概述如下。

对采用不同方法估算的排放量进行比较

如果采用各个硝酸厂的数据计算排放（自下而上方法），清单编制者应当将其与按照全国产量数据估算的结果（自上而下方法）进行比较。清单编制者应记录结果并调查任何未解释的差异。

由于工业 N_2O 排放源相对小于其它人为排放和自然排放源，不可能将其与观测到的大气中 N_2O 浓度趋势进行比较。

工厂级数据

清单编制者应归档足够信息，以允许独立评审从基准年开始的排放时间序列，并解释进行历史比较时的排放趋势。如果需要重新计算，这尤其重要，例如当清单编制者在工厂级确定的从使用缺省值到改用实际值时。

直接测量排放量的修正

如果工厂级 N_2O 测量结果可用，则清单编制者应当确认采用了国际认可的标准方法。如果测量作法不符合此标准，他们应评估这些排放数据的使用。此外，他们应按照 QA/QC 结果重新考虑不确定性估算。

鼓励清单编制者将工厂级排放因子与 IPCC 缺省因子进行比较，以确保特定工厂排放因子的合理性。他们应对这两种因子的差异做出解释并整理成文，尤其要解释可能导致这些差异的工厂差异特性。

3.4.4.2 报告和归档

优良作法是按照第1卷6.11节的概述，记录和归档生产国家排放清单估算需要的所有信息。

以下列出一些与此源类别相关的具体文档和报告的例子：

- 描述采用的方法；
- 己二酸工厂数量；
- 排放因子；
- 产量数据；
- 生产能力；
- 采用减排技术的工厂数量；
- 减排技术的类型、去除效率和使用率；
- 任何其它假设。

工厂操作人员应向清单编制者提供上述信息供编汇，并对现场情况记录存档。如果进行工厂实测，操作人员还应将测量的频度、仪器校准记录等记入工作日志并存档。

如果全国仅有一两家生产工厂，例如己二酸生产的情形，活动水平数据有可能需要保密。在此情况下，操作人员和清单编制者应该决定，汇总到何种程度既可以报告信息又可以保证机密性。在工厂一级，还应该对包括仪器记录在内的详细信息进行存档。

不可能在国家清单报告中纳入所有文档记录。然而，清单应包括使用的方法汇总以及源数据参考，以使报告的排放估算保持透明，且计算步骤可具有可追溯性。

3.5 己内酰胺、乙二醛和乙醛酸生产

3.5.1 引言

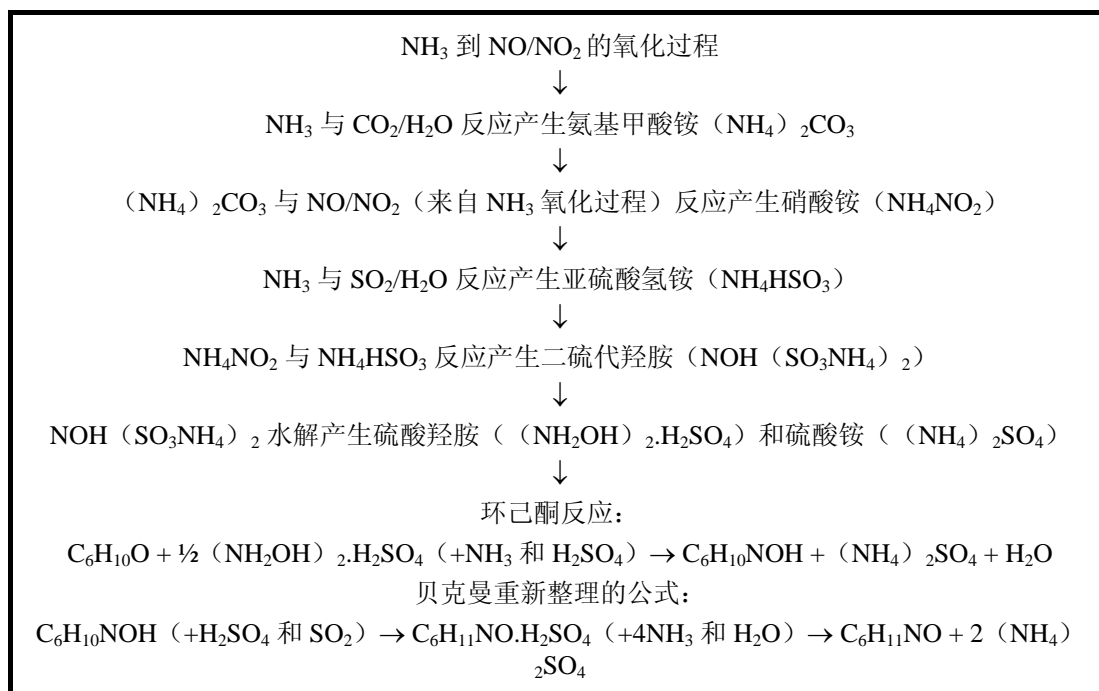
本节讲述了三种化学物质（己内酰胺、乙二醛和乙醛酸）的生产，这三种化学物质是化工生产国家中氧化氮（N₂O）排放的潜在重要来源。详细讨论了己内酰胺的方法，此法适合用于估算乙二醛和乙醛酸的排放。在 3.5.3 节中，概述了引起 N₂O 排放的乙二醛和乙醛酸生产过程。根据 Clariant（法国）（Babusiaux, 2005）的信息，提供了缺省生成因子、去除因子和排放因子。

3.5.2 己内酰胺

己内酰胺（C₆H₁₁NO）的几乎全部年产量都被用作尼龙-6 纤维和塑料的单体（Kirk-Othmer, 1999；第 310 页），包括地毯生产使用的大量纤维。制造己内酰胺的所有商业过程均以甲苯或苯为基础。

3.5.2.1 方法学问题

在主要过程中，己内酰胺由苯产生，苯氢化生成环己胺，然后经氧化生成环己醇（C₆H₁₀O）。从环己醇中产生己内酰胺的典型工艺（Raschig 过程）和基本反应公式为（Reimschuessel, 1977；第 83 页；Lowenheim 和 Moran, 1975；第 201 页）：



Lowenheim 和 Moran (1975；第 202 页) 概述了如下 Raschig 生产过程。通过将硫酸羟胺添加到环己醇，按照贝克曼重新整理的公式（通常使用硫酸为催化剂，将酮肟转化为氨基化合物）产生己内酰胺。由氨基硝酸铵和二氧化硫产生硫酸羟胺。将氨气和空气送到转化器中，通过与氨基甲酸铵和二氧化硫连续接触，将氨气在转化器中转化为二硫代羟胺。通过将氨气和二氧化碳溶于水中产生氨基甲酸铵，而燃烧硫磺即可产生二氧化硫。二硫酸盐经水解成为硫酸羟胺和硫酸铵。将硫酸羟胺添加到环己醇产生环己醇肟，而环己醇肟可通过贝克曼重新整理的公式转化为己内酰胺。

生产己内酰胺时，会在氨气氧化过程步骤中引起氧化亚氮（N₂O）的排放，碳酸铵步骤中 CO₂ 的排放，亚硫酸氢铵步骤中二氧化硫（SO₂）的排放以及 NMVOC 的排放。传统过程中的 CO₂、SO₂ 和 NMVOC 排放和管理良好的工厂中可能量不大。己内酰胺生产要考虑的主要温室气体是 N₂O。经修改的己内酰胺生产过程主要与消除大量硫酸铵有关，硫酸铵是传统过程的副产品（Reimschuessel, 1977；第 84 页）。NH₃ 氧化过程仍然是用于获得所需的 NO/NO₂ 所有过程的重要部分。

方法选择

己内酰胺生成过程中 N_2O 排放的估算可视为类似于硝酸生产中 N_2O 排放的估算。两个生产过程都涉及到 NH_3 氧化过程的最初步骤，而 NH_3 氧化过程是 N_2O 形成和排放的来源。

根据国情来选择优良作法方法。图 3.4 的决策树说明，优良作法是根据国情选择最适当的方法。估算排放的方式包括始终直接测量排放的持续排放监控（CEM），在某个时期（周期）实施的周期性排放监控（可反映工厂常见的运营模式，推导出排放因子，此因子乘以输出可得出排放），不规则抽样推导出排放因子（通过与输出相乘得出排放或者输出乘以缺省排放因子）。

根据可用的工厂级数据范围，将方法分类。方法 2 和方法 3 都需要工厂级活动数据。

方法 1

按如下方式估算排放：

$$\begin{aligned} & \text{公式 3.9} \\ & \text{己内酰胺生产中的 } N_2O \text{ 排放 - 方法 1} \\ & E_{N_2O} = EF \cdot CP \end{aligned}$$

其中：

E_{N_2O} = N_2O 排放量，单位为 kg

EF = N_2O 排放因子（缺省值），kg N_2O /吨生产的己内酰胺

CP = 己内酰胺生产，单位为吨

当采用方法 1 时，优良作法是假定 N_2O 排放没有减排，使用表 3.5 所示的最高缺省排放因子。

方法 2

由己内酰胺生产和控制技术引起的排放信息有限。当没有工厂级信息时，优良作法是提供缺省的 N_2O 生成因子，如表 3.5 所示。缺省因子基于硝酸厂中 N_2O 排放，因为没有与己内酰胺工厂有关的信息，氨气氧化过程的最初反应步骤对于两个过程均很相似。优良作法是鼓励制定己内酰胺工厂的特定因子。

己内酰胺工厂数量相对较少（大约为 42 家工厂，其中大约有 19 家工厂采用 DSM（Stamicarbon）技术）。工厂间的 N_2O 生成因子不太可能会有很大变化。如果采用缺省值估算己内酰胺生产的排放，则优良作法是根据类型确定不同工厂的排放差异程度，同时使用恰当的 N_2O 生成因子。

方法 2 使用按技术类型分解的工厂级生产数据，以及按技术类型分类的缺省排放因子。按如下方式计算排放量：

$$\begin{aligned} & \text{公式 3.10} \\ & \text{己内酰胺生产中的 } N_2O \text{ 排放 - 方法 2} \\ & E_{N_2O} = \sum_{i,j} [EF_i \cdot CP_i \cdot (1 - DF_j \cdot ASUF_j)] \end{aligned}$$

其中：

E_{N_2O} = N_2O 排放量，单位为 kg

EF_i = 技术类型 i 的 N_2O 排放因子，kg N_2O /吨生产的己内酰胺

CP_i = 技术类型 i 的己内酰胺产量，单位为吨

DF_j = 减排技术类型 j 的去除因子，比例形式

$ASUF_j$ = 减排技术类型 j 的减排系统使用因子，比例形式

估算 N_2O 排放量的基本公式包括补充的术语，可识别 N_2O 减排技术的潜在未来使用。 N_2O 去除因子必须乘以减排系统的使用系数，以便说明排放减排设备的故障时间（即减排设备不运转的时间）。

如果没有工厂级数据信息，则优良作法是根据实现的减排技术，按照表 3.5 “己二酸生产的缺省因子”所提供的缺省 N_2O 生成因子和去除因子。为达到最高的准确性，优良作法是在工厂级应用公式 3.10，使

用由特定工厂测量数据得到的 N₂O 排放和去除因子。在这种情况下，国家排放总量就等于各工厂排放量的总和。

方法 3 – 直接测量

方法 3 使用工厂级生产数据和工厂级排放因子，这些值是通过直接测量排放获得的。这些的推导可以用 N₂O 排放的不规则抽样或一段时期（周期）实施的 N₂O 周期性排放监控，可反映工厂运转的常见模式。排放的推导可使用公式 3.10。

方法 3 亦可使用连续排放监控（CEM）的结果，不过由于资源成本大多数工厂不可能采用 CEM。使用 CEM 时，可根据测量的 N₂O 排放量之和估算出排放量，而 N₂O 排放量可在每个监控时间间隔的监控排放内，从 N₂O 的浓度推导出来。

选择排放因子

方法 1

*优良作法*是使用表 3.5 所示的缺省排放因子，并假定 N₂O 排放没有减排。

方法 2

如果没有工厂级数据，*优良作法*是采用缺省因子。方法 2 使用缺省因子。缺省值通常表示数据集的中点或平均值（如专家分析确定）。表示特定工厂排放率的范围未知。对于己内酰胺生产尤其如此，其数值基于高压硝酸厂。表 3.5 中的缺省因子应仅使用于没有特定工厂测量数据时。

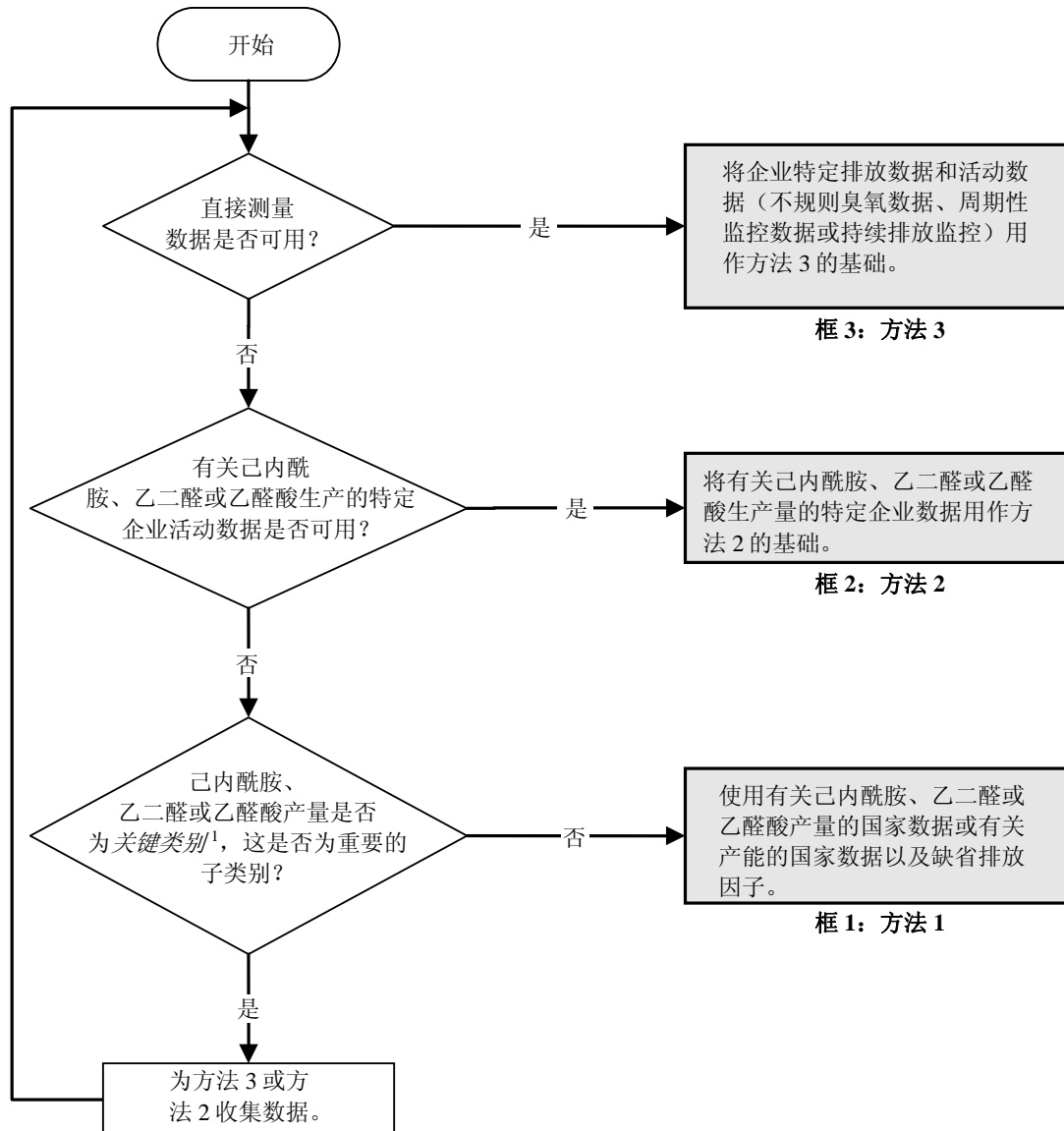
方法 3

工厂测量法可提供最严格的数据，用于计算净排放量（即，N₂O 生成和去除因子）。监控己二酸生产产生的 N₂O 排放是切实可行的，因为这些是点排放源，况且生产工厂的数量有限。在现有技术条件下，对排放率进行采样和监测的仪器不会制约整体测量的精度或准确性。通常，采样频率和采样时间足以避免系统误差，实现期望的准确度水平。

作为一项通则，*优良作法*是每当工厂对工艺流程采取任何足以影响 N₂O 生成率的改动时，都应进行采样和分析，而且要有足够多的采样次数，除非能够保证工况不变。此外，每年都应当咨询工厂操作人员以确定是否采用了特定的去除技术，并确认其使用情况，因为技术可能随时间而发生变化。排放率和减排效率的精确测量要求测量出口和无控制时二者的流量。测量数据仅可用于出口流量时，*优良作法*是将排放基于这些数据。在这种情况下，提供减排效率的任何可用估算仅供通报目的，而非用于计算排放量。

生产过程	N ₂ O 排放因子 (kg N ₂ O/吨己内酰胺)	不确定性
Raschig	9.0 ^a	± 40%

^a 以硝酸生产的高压工厂为准。
来源：硝酸生产的缺省因子。（参见本章中的表 3.3。）

图 3.4 估算己内酰胺、乙二醛和乙醛酸生产中 N₂O 排放的决策树

注:

1 有关关键类别和决策树使用的讨论, 请参见第 1 卷第 4 章“方法选择和类别识别”(参见 4.1.2 节有关有限资源部分)。

选择活动数据

*优良作法*是详细编制生产数据，以允许使用方法2或方法3。

方法1

方法1需要有关的国家己内酰胺生产数据。如果没有国家级活动数据，则可以使用有关产能的信息。*优良作法*是全国的总产能乘以产能使用率因子的 $80\pm 20\%$ （即，60-100%的范围）。

方法2

方法2需要按减排技术类型分类的工厂级生产数据。如果有关技术类型和减排技术的其它信息可用，则*优良作法*是收集此信息并根据获得的信息分类生产数据。*优良作法*是收集活动水平（产量）数据的详细程度与任何生成和去除数据一致。如果采用工厂级排放因子，则*优良作法*是收集工厂级产量数据。由于准确信息具有经济价值，通常工厂级的产量数据精确到 $\pm 2\%$ 。

方法3

当使用不定期或定期抽样的排放时，方法3需要按技术类型分类的工厂级产量数据。*优良作法*是收集活动水平（产量）数据的详细程度与任何生成和去除数据一致。尽管生产数据未用于估算是基于CEM的排放估算，仍应当收集和报告这些数据，以确保影响排放的变量变化可随时间而得到监控。由于准确信息具有经济价值，通常工厂级的产量数据精确到 $\pm 2\%$ 。

完整性

范围的完整性需要考虑所有工厂以及所有直接温室气体的排放。除了 N_2O 之外，可能还有 CO_2 、 NO_x 、NMVOC和 SO_2 等非燃烧排放。为了纳入间接温室气体（ NO_x 、NMVOC和 SO_2 ）的排放，请参见第1卷第7章提供的指南：一般指南及报告。实现排放估算需要工厂级信息。随着更多信息的获得，可以建立长期缺省值。

一个国家内通常仅有几个硝酸工厂，建议依据工厂特定数据计算排放。

建立一致的时间序列

当排放量计算方法改变时，应重新计算所有年份的 N_2O 排放量（例如，清单编制者从使用缺省值改为使用工厂确定的实测值）。如果工厂级数据不可用于时间序列中所有年份，则必须考虑可以如何用目前的工厂测量数据来重新计算以往年份的排放量。如果工厂运行情况没有大的变化，可以把工厂目前的排放因子应用于往年的产量数据。需要这种重新计算，以保证排放趋势的任何变化是真实的，而非人为的程序性变化。*优良作法*是按照第1卷第5章中提供的指南，对整个时间序列进行重新计算。

3.5.2.2 不确定性评估

排放因子不确定性

表3.5显示的不确定性缺省值是基于硝酸工厂缺省值的一个估算值。一般来说，气态物质的缺省排放因子具有较高的不确定性，因为气态物质的质量值受温度和压力变化的影响，气体更易因过程泄漏而损耗。己内酰胺生产的缺省值具有相对较高的不确定性，这是由于可用信息有限。*优良作法*是获得工厂级的不确定性估算，估算值应小于与缺省值相关的不确定性值。

活动数据不确定性

若从工厂获得活动数据，则不确定性估算可从生产工厂获得。从国家统计局获得的数据通常不包括不确定性估算。*优良作法*是咨询国家统计局，以获得有关任何抽样错误的信息。国家统计局从氨气生产设施群收集硝酸数据时，预期国家统计资料中的不确定性与工厂级咨询建立的不确定性没有差异。如果没有其它来源的不确定性值，则可以使用缺省值 $\pm 2\%$ 。

3.5.2.3 质量保证/质量控制（QA/QC）、报告和归档

质量保证/质量控制

*优良作法*是按照第1卷第6章的概述实施质量控制检查。如果使用高层方法确定排放，则可以使用更加广泛的质量控制检查和质量保证程序。对于第1卷第4章确定的*关键类别*，鼓励清单编制者采用较高质量保证和质量控制方法。

对采用不同方法估算的排放量进行比较

如果采用各个硝酸厂的数据计算排放（自下而上方法），清单编制者应当将其与按照全国产量数据估算的结果（自上而下方法）进行比较。清单编制者应记录结果并调查任何未解释的差异。

由于工业 N_2O 排放源相对小于其它人为排放和自然排放源，不可能将其与观测到的大气中 N_2O 浓度趋势进行比较。

工厂级数据

清单编制者应归档足够信息，以允许独立评审从基准年开始的排放时间序列，并解释进行历史比较时的排放趋势。如果需要重新计算，这尤其重要，例如当清单编制者在工厂级确定的从使用缺省值到改用实际值时。

直接测量排放量的修正

如果工厂级 N_2O 测量结果可用，则清单编制者应当确认采用了国际认可的标准方法。如果测量作法不符合此标准，他们应评估这些排放数据的使用。此外，他们应按照 QA/QC 结果重新考虑不确定性估算。

清单编制者应当将工厂级排放因子与 IPCC 缺省因子进行比较，以确保特定工厂排放因子的合理性。他们应对这两种因子的差异做出解释并整理成文，尤其要解释可能导致这些差异的工厂差异特性。

报告和归档

*优良作法*是按照第1卷6.11节的概述，记录和归档生产国家排放清单估算需要的所有信息。

以下列出一些与此源类别相关的具体文档和报告的例子：

- 描述采用的方法；
- 己内酰胺工厂数量；
- 排放因子；
- 产量数据；
- 生产能力；
- 采用减排技术的工厂数量；
- 减排技术的类型、去除效率和使用率；
- 任何其它假设。

工厂操作人员应向清单编制者提供上述信息供编汇，并对现场情况记录存档。如果进行工厂实测，操作人员还应将测量的频度、仪器校准记录等记入工作日志并存档。

如果全国仅有一两家生产工厂，例如己二酸生产的情形，活动水平数据有可能需要保密。在此情况下，操作人员和清单编制者应该决定，汇总到何种程度既可以报告信息又可以保证机密性。在工厂一级，还应该对包括仪器记录在内的详细信息进行存档。

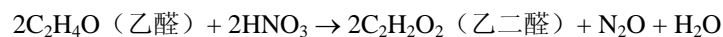
不可能在国家清单报告中纳入所有文档记录。然而，清单应包括使用的方法汇总以及源数据参考，以使报告的排放估算保持透明，且计算步骤可具有可追溯性。

3.5.3 乙二醛和乙醛酸生产

乙二醛 (C₂H₂O₂) 是乙醛 (C₂H₄O) 与一定浓度的硝酸 (HNO₃) 通过氧化产生的。乙二醛还可以从乙二醇 (CH₂OHCH₂OH) 的催化氧化过程中产生。乙二醛用作乙酸乙烯酯/丙烯酸树脂的交联剂、消毒剂、胶质硬化剂、毛纺整理剂 (免烫棉、人造纤维织物)、防湿添加剂 (纸类涂料) (Ashford, 1994; 第 454 页)。

乙二醛酸是通过乙二醛的硝酸氧化产生的。乙二醛酸用于生产合成香料、农药和制药中间产品 (Babusiaux, 2005; 第 1 页)。

由乙醛产生乙二醛的基本反应公式为：



化学计量关系表明，完成反应后每吨乙二醛将产生 0.543 吨 N₂O。在商业化情况下，每吨乙二醛产生的 N₂O 量大约是 0.52 吨 (Babusiaux, 2005; 第 1 页)。

乙二醛酸生产是批量生产过程，其中，硝酸被还原为 NO，而含 NO 的 N₂O 在生产过程中还原为 HNO₃。N₂O 通过次级反应出现在生产过程中，其中，乙二醛被转化为草酸 (COOH)₂。

乙二醛和乙二醛酸生产的缺省因子，如表 3.6 所示。可以使用前文己内酰胺所述的相同方法，估算排放。若要使用缺省去除因子，清单编制者应当验证减排技术是否在各个工厂中安装且全年运行。

产品	N ₂ O 生成因子 (吨 N ₂ O/吨)	N ₂ O 去除率 (%)	N ₂ O 排放因子 (吨 N ₂ O/吨)	不确定性 (%)
乙二醛	0.52	80	0.10	±10
乙二醛酸	0.10	80	0.02	±10

来源：Babusiaux (2005)

3.6 电石生产

3.6.1 引言

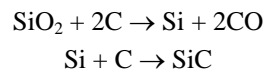
温室气体排放与碳化硅（SiC）和碳化钙（CaC₂）的生产有关。碳化物生产会导致二氧化碳（CO₂）、甲烷（CH₄）、一氧化碳（CO）和二氧化硫（SO₂）的排放。碳化硅是重要的人造研磨剂。产生于硅砂或石英以及石油焦中。碳化钙用于乙炔生产、氨脲制造（少量历史用法）以及电弧炼钢炉中的还原剂。由两种含碳的原材料制成：碳酸钙（石灰石）和石油焦。

在生产过程中使用含碳的原材料会导致 CO₂ 和 CO 的排放。在石油焦中出现的含氢挥发性化合物和硫（S），可能在大气中形成 CH₄ 和 SO₂，且造成这两种气体的排放。

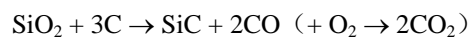
3.6.2 方法学问题

碳化硅生产中的CO₂和CH₄

碳化硅产生于硅砂或石英以及石油焦中，根据以下这些反应用作碳来源（Austin, 1984；第 262 页）：



以下给出描述综合反应的公式，但是实际上没有按指示的化学计量比例进行反应：



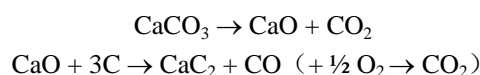
在生产过程中，硅砂与碳接近 1:3 的莫尔比混合。某些碳（大约 35%）包含在产品中，其它碳与过量的氧气反应转化为 CO₂ 并作为过程副产品排放到大气中。

在此过程中使用的石油焦可能包含挥发性化合物，这些挥发性化合物会形成甲烷。某些甲烷将泄漏到大气中，尤其是在启动期间。

碳化钙生产中的CO₂

碳化钙（CaC₂）的制成方式为：加热碳酸钙（石灰石），然后用碳还原 CaO，例如石油焦。两个步骤都会造成 CO₂ 的排放。约 67% 来自石油焦的碳包含在了产品中。

基本反应为：



CO 气体在大多数工厂中用作能量来源。

框 3.4 重复计算

为了避免重复计算，应在 IPPU 部门中考虑 CO 气体（CaC₂ 生产过程中产生）燃烧造成的 CO₂ 排放，且这种排放不应纳入能源部门中。生产过程中使用的石油焦应当从能源部门中扣除，因为其属于石油焦的非能源使用。

碳化钙最重要的应用是，通过与含水的 CaC₂ 反应产生乙炔（C₂H₂）。乙炔的主要使用是焊接。乙炔还用于乙醛、乙酸、乙酸酐生产的化学合成，以及作为‘乙炔碳黑’生产的原料，乙炔碳黑是碳黑的一种。通常，生产 CaC₂ 的工厂不生产乙炔，当采用更高层方法估算 CaC₂ 使用中 CO₂ 的排放时，这一点更需要考虑。

化学合成中的乙炔使用以及乙炔碳黑生产中会在产品中包含碳，减少了与 CaC_2 使用有关的 CO_2 排放。乙炔可以从天然气的部分氧化过程中产生，也可以从 CaC_2 中产生。本卷的第 3.9 节概述了这些使用中考虑乙炔的方法。

焊接应用的乙炔生产和使用，通过以下反应进行了汇总：



其中，乙炔用于焊接应用，假定乙炔在生产之后的相对不久时期内就投入使用，则可能会从 CaC_2 量中产生排放。

框 3.5

CaO 生产中的排放分配

CaO（石灰）可以在室内生产，也可以在除电石工厂之外的工厂中生产。在以上任何一种情况下，CaO 步骤中的排放应报告为石灰生产中的排放（本卷第 2.3 节），只有 CaO 与石油焦反应产生的排放以及使用产品生产焊接用乙炔时产生的排放，报告为碳化钙中的排放。

3.6.2.1 方法选择

根据可用的工厂级数据范围，将方法分类。方法 1 基于缺省值和国家统计资料。方法 2 基于有关产量的工厂级数据以及焊接用乙炔生产中 CaC_2 的使用。方法 3 基于有关石油焦给料（包括可用的碳含量因子（CCF）和碳氧化因子（COF）；另外还可以使用特定国家的能源部门值）的工厂级数据、焊接用乙炔生产中 CaC_2 的使用以及相关的工厂级排放因子。

方法 2 和方法 3 均基于工厂级活动数据。估算 CO_2 和 CH_4 排放时采用的方法取决于具体国情如图 3.5 所示的。

电石生产中的 CO_2 和 CH_4

方法 1

电石生产中的排放可以由活动数据（AD）估算，这些活动数据与石油焦消耗量或电石生产、焊接用乙炔生产中使用的碳化钙以及缺省排放因子有关。采用有关石油焦消耗量的活动数据时，可以从第 2 卷第 1 章中获得石油焦的 CCF 和 COF，且结果必须乘以 44/12，将 C 转化为 CO_2 。估算排放量的基本公式为：

公式 3.11

电石生产中的排放

$$E_{\text{CO}_2} = \text{AD} \cdot \text{EF}$$

其中：

E_{CO_2} = CO_2 的排放量，单位为吨

AD = 与石油焦消耗量或电石产量有关的活动数据，单位为使用的原材料吨数或产生的电石吨数

EF = CO_2 排放因子。有如下两个选项：

当电石产量用作活动数据时，EF 应该是每单位电石产量输出的 CO_2 平均排放量，单位为吨 CO_2 /吨电石产量。

当石油焦消耗量用作活动数据时，EF 应该是 CCF（碳含量因子）乘以 COF（碳氧化因子）再乘以 44/12，然后调整为计算产品包含的 C，单位为吨 CO_2 /吨使用材料

$$\text{SiC 的调整因子} = 0.35 \Rightarrow \text{排放因子} = 0.65 \cdot \text{CCF} \cdot \text{COF} \cdot 44/12$$

$$\text{CaC}_2 \text{ 的调整因子} = 0.67 \Rightarrow \text{排放因子} = 0.33 \cdot \text{CCF} \cdot \text{COF} \cdot 44/12。$$

公式 3.11 还可用于估算 CH_4 排放，其中 EF 是针对 CH_4 的恰当排放因子。

估算 CaC_2 中的排放时，需要纳入乙炔生产中 CaC_2 间接造成的 CO_2 排放。当活动数据为使用的 CaC_2 量且 EF 是与此使用有关的排放因子时，可采用公式 3.11。采用方法 1 时，*优良作法*是，假定乙炔生产使用的所有 CaC_2 会造成 CO_2 排放。

方法 2

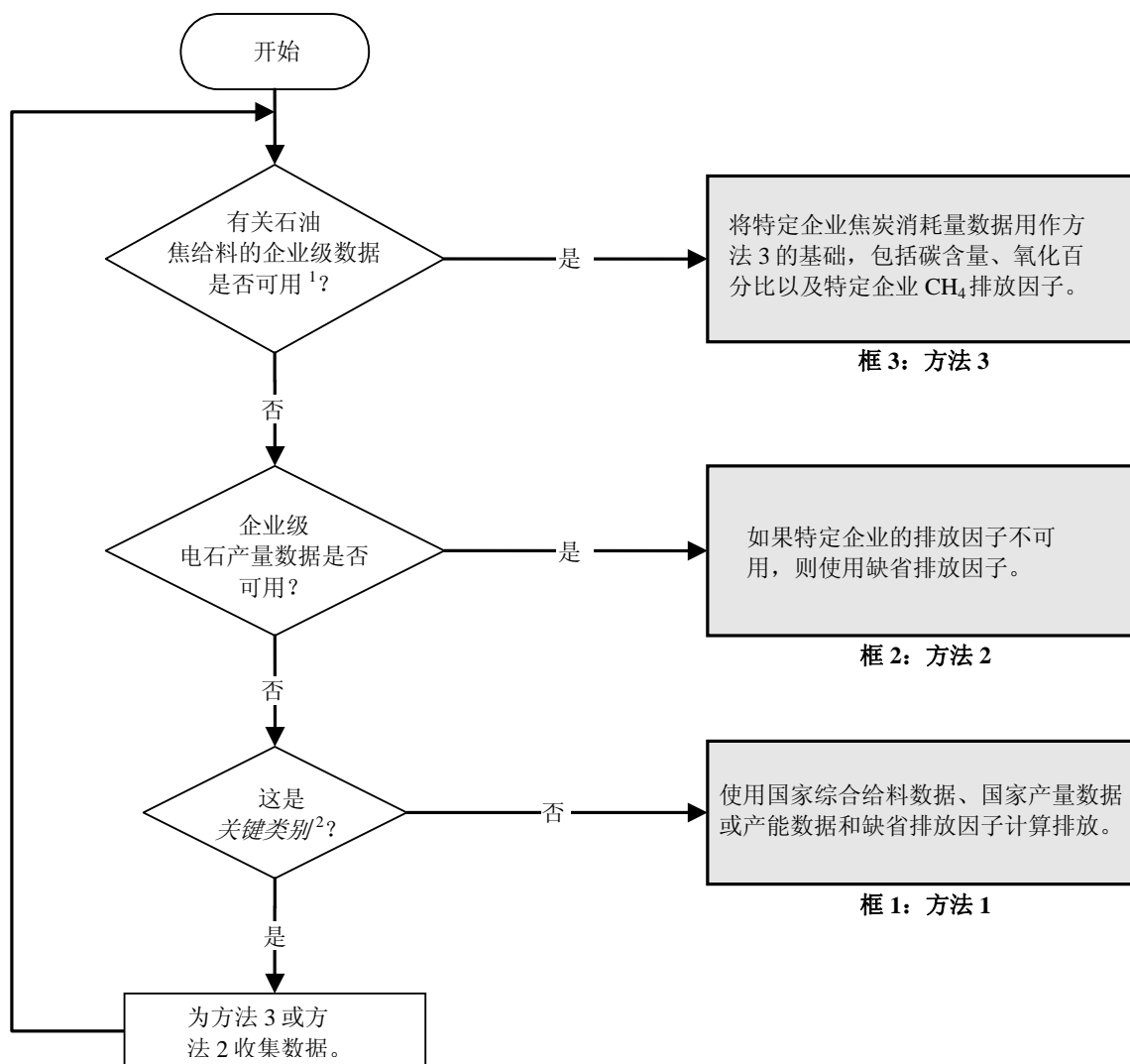
方法 2 使用有关电石生产和产品中碳含量的工厂级数据。对于 CaC_2 ，还需要焊接用乙炔生产中有关 CaC_2 使用的数据。生产和使用的排放可使用缺省排放因子采用公式 3.11 进行估算。当 CaC_2 在其它地点产生乙炔，且此使用中使用的 CaC_2 量未知时，*优良作法*是记录下这一事实。

方法 3

方法 3 需要有关石油焦以及 CCF 和 COF（如果可用）的工厂级数据；另外，特定国家 CCF 和 COF 的能源部门值可能会被用到。还需要产品中碳含量的工厂级数据。

对于 CaC_2 ，类似于工厂级排放因子，需要焊接用乙炔生产中有关 CaC_2 使用的数据。当 CaC_2 在其它地点产生乙炔，且此使用中使用的 CaC_2 量未知时，*优良作法*是记录下这一事实。此外，还需要收集 CH_4 的工厂级排放因子。可使用公式 3.11 估算每个工厂的排放，国家排放总量是这些排放之和。

生产数据不用于计算，但是应当以报告为目的收集起来。乙炔生产数据不可通过使用分类时，鼓励使用方法 3 的国家清单编制者们在排放形成点考虑任何排放；例如，对于使用各国特定的排放因子的乙炔使用点，应考虑焊接用乙炔使用的排放。对于乙炔的其它使用，应遵循同样方法。

图 3.5 电石生产中 CO₂ 和 CH₄ 排放的估算决策树

注:

1 “给料数据”指原材料消耗量数据。

2 有关关键类别和决策树使用的讨论, 请参见第 1 卷第 4 章“方法选择和类别识别”(参见 4.1.2 节有关有限资源部分)。

3.6.2.2 选择排放因子

方法 1

方法 1 使用产品中所含 CCF、COF 和 C 的缺省值, 其中石油焦用于估算。另外, 在使用电石生产时, 此方法使用表 3.7 和 3.8 所示的相关缺省排放因子。在这两种情形下, 均要采用 CaC₂ 使用的缺省因子。

方法 2

至于方法 1, 除产品中包含的碳含量之外, 方法 2 采用缺省排放因子值, 此时需要工厂级数据。

方法 3

方法 3 需要工厂级数据所有变量, 除石油焦的 CCF 和 COF 之外, 因为二者可能使用各国特定的能源部门值。如果在室内生产石灰, 且 CaC₂ 工厂级排放因子用于生产焊接用乙炔, 则这包括石灰的工厂级排放因子。

碳化硅生产中的CO₂

碳化硅生产过程中需要的碳比一个化学计量反应计算的碳要多。过量的碳在生产过程中氧化，剩余的少量碳作为炉灰（Raanes, 1991）。对于挪威工厂的典型缺省值来说，焦炭中的碳含量是 97%，而产品所含碳为 35%。这暗示，典型的排放因子为 2.3 吨 CO₂/吨使用的石油焦（IPCC, 1997），或 2.62 吨 CO₂/吨生产的电石。

碳化钙生产中的CH₄

挪威工厂的测量数据表明，排放因子为 10.2 kg CH₄/吨石油焦或 11.6 kg CH₄/吨生产的电石（IPCC, 1997）。

过程	排放因子 (吨 CO ₂ /吨使用的原材料)	排放因子 (kg CH ₄ /吨使用的原材料)	排放因子 (吨 CO ₂ /吨生产的电石)	排放因子 (kg CH ₄ /吨生产的电石)
碳化硅生产	2.30	10.2	2.62	11.6

来源：经修订的 1996 IPCC 国家温室气体清单，第 3 卷，第 2.21 节（IPCC, 1997）

碳化钙生产中的CO₂

排放因子可能由原材料（石油焦）的使用推导出，也可能由使用的质量平衡方式的电石生产推导出来。电石生产中使用的石灰石包含大约 98% CaCO₃，且要在其它位置考虑。生产 1 吨电石需要 1 750 kg 石灰石（或 950 kg CaO）、640 kg 石油焦和 20 kg 碳电极。

估算排放的缺省排放因子包括在表 3.8 中。

过程	缺省排放因子 (吨 CO ₂ /吨使用的原材料)	缺省排放因子 (吨 CO ₂ /吨生产的电石)
石油焦使用	1.70	1.090
产品使用	不相关	1.100

来源：《1996 年 IPCC 国家温室气体清单修订版》，第 3 卷，第 2.22 节（IPCC, 1997）

由一个化学计量反应计算的理论排放因子低于表格中显示的石油焦步骤。过量的碳在过程中氧化，在某一挪威工厂，建议排放因子是由原材料的实际使用计算的。乙炔使用的排放因子由电石的实际（非化学计量）碳含量计算。

当用电石生产双氰胺时，通过使用气体可降低 CO₂ 排放（Olsen, 1991）。

3.6.2.3 选择活动数据

方法 1

方法 1 需要与石油焦有关的数据，这些石油焦用于电石生产或电石国家生产。这些数据可以从国家统计资料中获得，也可以从代表电石和石油焦生产商的工贸组织获得。

方法 2

方法 2 所需的活活动数据包含有生产的电石以及焊接用乙炔生产中 CaC₂ 的用量有关的工厂级数据。

方法3

方法3需要所有变量的工厂级活动数据，包括石油焦给料和焊接用乙炔生产中的 CaC_2 量。

方法2需要从个别工厂或公司中收集的活动数据。在方法1中，应使用国家统计资料或工贸组织提供的活动数据，它们与电石和石油焦生产有关。然而，如果有足够的特定工厂或特定公司数据，则它们可用于估算排放。

3.6.2.4 完整性

每个国家的电石生产工厂通常是已知的。因此，电石生产数据可用于国家统计数据库，或即使这些数据还未在国家统计资料中发布，也可以收集。石油焦消耗量数据可以从电石生产工厂直接获得，也可以从石油焦生产商或贸易商处获得。活动数据和排放估算比较复杂，而事实上，用 CaC_2 生产乙炔的同一工厂没有必要也生产 CaC_2 。当使用高层方法时，需要考虑这种情况，以及排放出现时要考虑源于 CaC_2 使用中造成的排放；例如，对于焊接用乙炔，乙炔在不同的地点生产，所以 CaC_2 排放应在乙炔生产时进行估算，前提是在生产之后不久就投入使用。

采用方法2和方法3时，假定自下而上（逐个工厂）的排放估算以及工厂级数据收集。在针对方法3只有工厂报告数据子集的国家或方法2到方法3的过渡国家，过渡期间，使用方法3报告所有设施的排放可能是行不通的。其中方法3的数据不可用于所有工厂，方法2可用于剩余的工厂。另外，方法2的数据仅通告工厂的一个子集报告，或者方法1到方法2有个过渡时，可以确定非报告工厂表示的生产份额，并使用方法1及此信息估算剩余的排放，以确保过渡期间的完整性。

3.6.2.5 建立一致的时间序列

*优良作法*是，在整个时间序列中，用同样方法估算每一年的电石生产排放。如果时间序列中数据不能全年支持更严格的方法，*优良作法*就根据第1卷第5章提供的指南来重新计算。

3.6.3 不确定性评估

3.6.3.1 排放因子不确定性

一般来说，缺省 CO_2 排放因子相对不确定，因为工业规模的电石生产过程与理论化学反应的化学计量是有所区分的。 CH_4 排放因子的不确定性是因为，不同制造商采用的原材料（石油焦）中含氢挥发性化合物可能变化，另外生产过程参数也可能出现变化。如果其它来源的不确定性值不可用，则可以使用缺省值 $\pm 10\%$ 。

*优良作法*是获得工厂级不确定性估算，估算的值应当小于与缺省值相关的不确定性值。

3.6.3.2 活动数据不确定性

如果从工厂中直接获得活动数据，则可从生产商处获得不确定性估算。这将包括不确定性估算，即使用的石油焦和石灰石以及电石生产数据。从国家统计机构或从工贸组织获得的数据通常不包括不确定性估算。*优良作法*是咨询国家统计机构，以获得有关任何抽样错误的信息。国家统计机构从生产设施群收集电石产量数据，国家统计资料中的不确定性预期与工厂级咨询机构建立的不确定性没有不同。如果没有其它来源的不确定性值，则可以使用缺省值 $\pm 5\%$ 。

3.6.4 质量保证/质量控制（QA/QC）、报告和归档

3.6.4.1 质量保证/质量控制

*优良作法*是实施第1卷第6章概述的质量控制检查以及排放估算的专家评审。也可以采用第1卷介绍的附加质量控制核查和质量保证程序，尤其是当运用较高级方法来估算这种排放源类别的排放时。对于第1卷第4章确定的*关键类别*，鼓励清单编制者采用较高质量保证和质量控制方法。

除第1卷的指南外，与该排放源类别相关的具体程序概述如下。

对采用不同方法的排放估算进行比较

如果使用方法2（工厂特定的），则清单编制者应当进行比较排放估算与使用国家级活动数据（方法1）计算得出的排放。还鼓励清单编制者对采用同一方法的不同修改计算得出的排放估算进行比较。

应该记载这种比较的结果作为内部文件，包括对两者不一致方面的解释。

排放因子审核

清单编制者应当将国家综合排放因子与IPCC缺省排放因子进行比较，以确定国家排放因子相对于IPCC缺省值是否合理。对于特定工厂排放因子，应采用相同的程序（即，与IPCC缺省值比较）。国家或工厂的具体因子与缺省因子的差别应加以解释并成文，尤其是如果它们代表着不同的情形。

工厂数据审核

对工厂特定数据，清单编制者应审核工厂之间的不一致性，以确定这种不一致是否反映误差、不同的测量技术，或由原材料、运行条件或技术的实际差别造成。

清单编制者应确保，排放因子和活动水平数据的推算符合国际认可并经证明的测量方法。如果收集各工厂的排放量测量数据，清单编制者应确保该测量符合国家或国际认可的标准。如果实际测量不符合此项标准，那么应当仔细评估此排放因子及活动水平数据的使用，重新估算其不确定性，并记载其合格性。

专家评审

鼓励清单编制者吸纳电石和石油焦生产有关的关键工贸组织参与评审过程。这一进程应当开始于清单编制过程的早期阶段，以便能对清单方法和数据采集的确定与评审有所贡献。

第三方评审对该排放源类别亦可能有用，尤其是在原始数据收集、抄录、计算和文件编制等方面。

3.6.4.2 报告和归档

*优良作法*是按照第1卷6.11节的概述，记录和归档生产国家排放清单估算需要的所有信息。前几年排放的重新计算亦应当记录和归档。

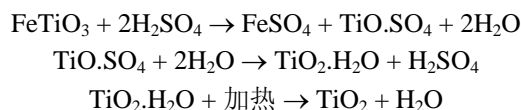
3.7 二氧化钛生产

3.7.1 引言

二氧化钛 (TiO₂) 是一种最常用的白色色素。主要用途是油漆制造，其次是造纸、塑料、橡胶、陶瓷、织物、地毯、打印墨水以及其它杂项使用 (Austin, 1984; Lowenheim 和 Moran, 1975)。假设 TiO₂ 的产量为 400 万吨左右且大量采用氯化工艺，则二氧化碳 (CO₂) 排放可能量很大，需要算入温室气体清单。自 1970 年开始，硫酸化产量已经相对稳定，氯化工艺的全球产量增长了近 7 倍 (Kirk-Othmer, 1999; 第 2017 页)。注意：在此讨论中，二氧化钛产品通常系指二氧化钛类，除非产品需要区分。讨论适用于钛矿渣、合成金红石 (>90% TiO₂) 金红石 TiO₂。

3.7.2 方法学问题

生产的 TiO₂ 是锐钛矿 TiO₂ 和金红石 TiO₂。各种 TiO₂ 的最终产品晶体结构和纯度会有所差异。锐钛矿 TiO₂ 的生产可能用硫酸浸渍的钛铁矿 (本质上是钛酸亚铁 (FeO·TiO₂))、硫酸化过程或用钛渣。酸解工艺的基本反应公式为 (Lowenheim 和 Moran, 1975; 第 814 页)：

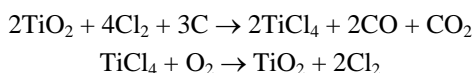


硫酸化工艺过程不会引起大量过程温室气体排放。

有三个过程运用于 TiO₂ 生产，会造成过程温室气体排放：电炉中的钛渣生产、使用比彻过程的合成金红石生产以及通过氯化工艺进行的金红石 TiO₂ 生产。

生产锐钛矿 TiO₂ 所用的钛渣产生于熔炼钛铁矿的电炉。在使用钛渣时，不需要酸还原步骤，因为电炉熔炼会以钛铁矿中杂质还原所含的亚铁。通过进一步处理锐钛矿 TiO₂，可以产生金红石 TiO₂。过程排放产生于过程中使用的还原剂。

在使用比彻过程时，合成金红石生产会引起 CO₂ 排放。此过程将钛铁矿中的氧化铁还原为冶金铁，然后重新氧化为氧化铁，在此过程中将二氧化钛作为合成金红石分离出，纯度为 91% 到 93% (Chemlink, 1997)。黑煤用作还原剂，而引起的 CO₂ 排放应视为工业过程排放。金红石 TiO₂ 的主要生产工艺是氯化工艺。通过将金红石矿或合成金红石的碳热还原氯化产生四氯化钛 (TiCl₄)，然后 TiCl₄ 蒸气经氧化成为 TiO₂，从而最终产生金红石 TiO₂，反应公式如下 (Kirk-Othmer, 1999; 第 2017 页)：



根据化学计量，假定在过量空气中通过 CO 的进一步转化，将给料 C 完全转化为 CO₂，每吨 TiO₂ 的 CO₂ 排放因子不可能低于 0.826 吨 CO₂ (根据 1.5 摩尔 CO₂/摩尔 TiO₂)。

3.7.2.1 方法选择

计算二氧化钛生产中 CO₂ 排放量的一般方法是相同的，与产品无关，因为排放是基于还原剂或碳热给料的数量。优良作法的选择取决于图 3.6 所示决策树中的国情。TiO₂ 生产中二氧化碳的过程排放，主要出现在钛渣生产中碳阳极氧化过程，使用比彻过程生产合成金红石的煤氧化过程以及通过氯化工艺生产金红石 TiO₂ 的石油焦氧化过程。

根据可用的工厂级数据范围，将方法分类。

方法 1

方法 1，每单位产出的缺省排放因子乘以从国家统计资料获得的的活动数据。估算 CO₂ 排放的基本公式为：

公式 3.12
钛渣、合成金红石和金红石 TiO₂ 生产中的 CO₂ 排放 – 方法 1

$$E_{CO_2} = \sum_i (AD_i \cdot EF_i)$$

其中：

E_{CO_2} = CO₂ 的排放量，单位为吨

AD_i = 钛渣、合成金红石或金红石 TiO₂（产品 i ）的产量，单位为吨

EF_i = 钛矿渣、合成金红石或金红石 TiO₂（产品 i ）每单位产量的 CO₂ 排放，单位为吨 CO₂/吨产品

方法 2

可通过电极碳（钛渣）的还原剂消耗量、比彻过程中煤（合成金红石）用量以及氯化工艺过程中金红石 TiO₂ 碳热给料（石油焦）量，计算排放量。方法 2，使用有关还原剂量和碳热给料量的工厂级数据，得出排放量以下：

公式 3.13
来自钛矿渣、合成金红石和金红石 TiO₂ 生产中的 CO₂ 排放 – 方法 2

$$E_{CO_2} = \sum_i (AD_i \cdot CCF_i \cdot COF_i \cdot 44/12)$$

其中：

E_{CO_2} = CO₂ 的排放量，单位为 kg

AD_i = 还原剂或碳热给料量 i ，GJ

CCF_i = 还原剂或碳热给料 i 的碳含量因子，kg C/GJ

COF_i = 还原剂或碳热给料 i 的碳氧化因子，比例形式

为达到最高的准确性，*优良作法*是，在工厂级应用公式 3.13，并使用工厂操作员获得的所有数据输入。

如果工厂级信息不可用，则*优良作法*是为合成金红石和金红石 TiO₂ 提供缺省 CO₂ 生成因子，如表 3.9 所示。钛渣缺省因子不可用的原因是工厂数量较少。

框 3.6
重复计算

为了避免重复计算，电极碳数量、用作还原剂的煤量以及氯化工艺过程中使用的石油焦数量，必须从**能源部门**能源使用报告的数量中减去。

3.7.2.2 选择排放因子

方法 1

如果没有工厂级信息，则*优良作法*是采用缺省因子。这些缺省值通常表示数据集的中点或平均值（如专家分析确定）。表示特定工厂排放率的范围未知。生产过程的缺省因子见表 3.9，应仅用在没有特定工厂数据时。缺省因子是根据还原剂或每单位产出的碳热给料的估算，假设 C 含量完全转化为 CO₂。

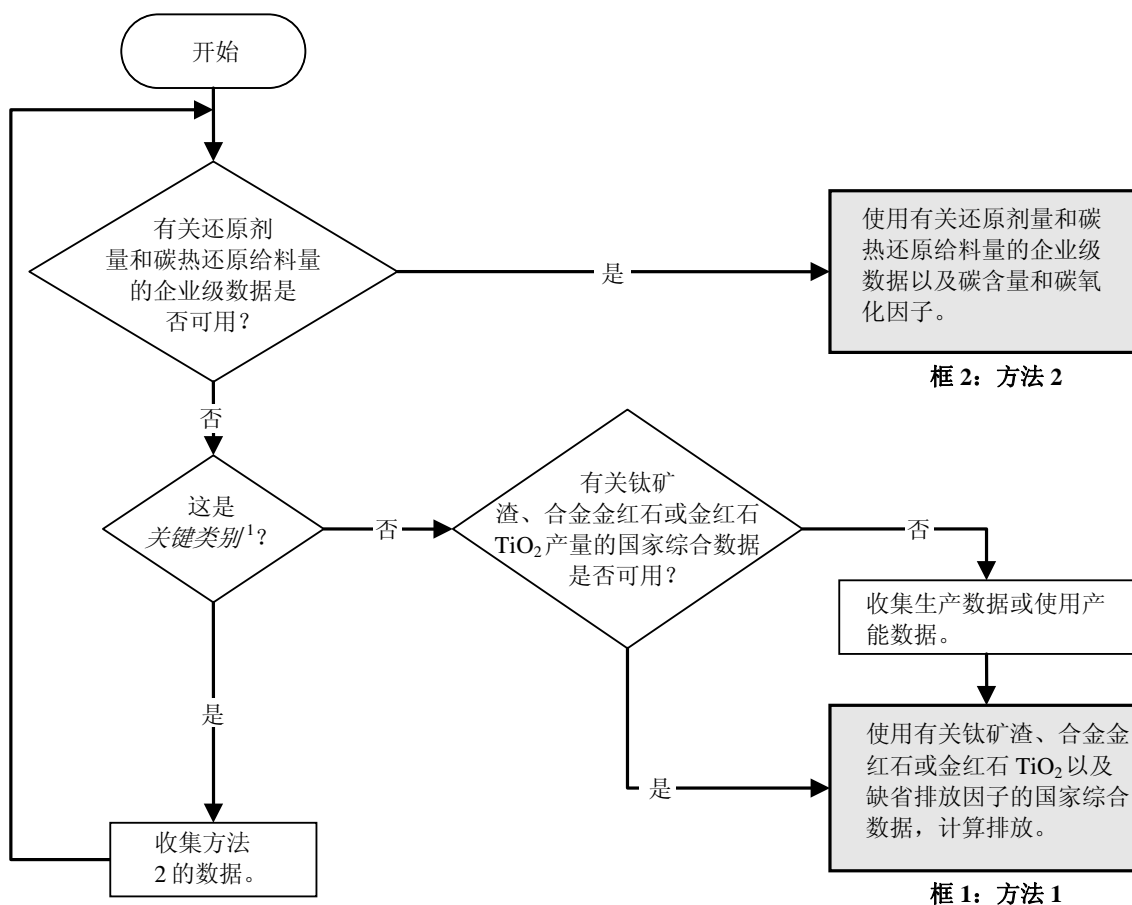
方法 2

工厂级数据提供了最严格的数据，用于计算二氧化钛生产中 CO₂ 的排放量。对于方法 3，还原剂与碳热给料的碳含量以及氧化的 C 比例是关键排放因子变量，用于推导排放的 CO₂ 量。

表 3.9 二氧化钛生产的缺省因子（吨 CO ₂ /吨产品）	
产品	排放因子和各自的不确定性 (吨 CO ₂ /吨产品)
钛渣 ¹	无
合成金红石 ²	1.43 (± 10%)
金红石二氧化钛（氯化工艺） ³	1.34 (± 15%)

来源：
¹ 缺省排放因子不可获得，因为只有两个工厂，即南非 Richards Bay 和加拿大 Allard Lake，而且数据均保密。对于各个国家，优良作法是将特定工厂的排放估算纳入到国家温室气体清单。
² 由 Iluka 资源提供的数据得出。
³ 改编自 EIPPCB（2004a，第 99 页）。

图 3.6 估算二氧化钛生产中 CO₂ 排放的决策树



注：

1 有关关键类别和决策树使用的讨论，请参见第 1 卷第 4 章“方法选择和类别识别”（参见 4.1.2 节有关有限资源部分）。

3.7.2.3 选择活动数据

*优良作法*是详细编制生产数据，以允许使用方法 2 或方法 3。当采用这些方法时，必须清晰区分产品，避免活动数据乘以错误的排放因子。

方法 1

方法 1 需要与钛渣、合成金红石和金红石 TiO_2 的有关的国家生产数据。如果没有国家级活动数据，则可以使用有关产能的信息，同时使用缺省排放因子估算排放。*优良作法*是全国产能总量乘以产能使用因子的 $80\% \pm 10\%$ （即，70-90%的范围）。

方法 2

方法 2 所需的工厂级活动数据是：还原剂总用量、碳电极消耗总量和碳热给料总量。*优良作法*还要收集有关钛渣总产量、合成金红石总产量和金红石 TiO_2 总产量的数据。产量数据收集，使随着时间变化的每单位产出能够进行比较，并提供了确保时间序列一致的牢固基础。如果采用工厂级排放因子，则*优良作法*是收集工厂级产量数据。由于准确信息具有经济价值，通常假定工厂级的产量数据精确到 $\pm 2\%$ 。如果没有工厂级数据，则可以采用全国汇总的产量数据。

3.7.2.4 完整性

二氧化钛生产的完整性范围需要计算来自所有源头的的所有排放，包括钛渣、合成金红石和金红石 TiO_2 。 CO_2 排放是主要的过程排放。为了纳入此源类别的 NO_x 、 CO 和 SO_2 排放，请参见第 1 卷第 7 章提供的指南：一般指南及报告。

3.7.2.5 建立一致的时间序列

每当排放量计算方法改变时，应重新计算所有年份的 CO_2 排放量（例如，如果清单编制者从使用缺省值改为工厂级确定的实测值）。如果没有特定工厂级数据（包括特定工厂生产数据），则必须考虑如何用目前的工厂数据重新计算以往年份的排放量。如果工厂运行情况没有大的变化，可以把工厂目前的排放因子应用于往年的产量数据。重新计算是为了保证排放趋势的任何变化是真实的，而非程序性的人为改变。*优良作法*是按照第 1 卷第 5 章中提供的指南，对整个时间序列进行重新计算。

3.7.3 不确定性评估

3.7.3.1 排放因子不确定性

缺省值的不确定性基于专家判断。*优良作法*是获得工厂级的不确定性估算，估算的值应小于与缺省值相关的不确定性值。

3.7.3.2 活动数据不确定性

若从工厂获得活动数据，则不确定性估算可从生产工厂获得。这包括对还原剂使用、碳热给料和产量数据的不确定性估算。从国家统计局获得的数据通常不包括不确定性估算。*优良作法*是咨询国家统计局，以获得有关任何抽样错误的信息。若国家统计局从二氧化钛生产设施群收集数据，则预期国家统计局资料中的不确定性与工厂级咨询机构建立的不确定性没有差异。如果没有其它来源的不确定性值，则可以使用缺省值 $\pm 5\%$ 。

3.7.4 质量保证/质量控制（QA/QC）、报告和归档

3.7.4.1 质量保证/质量控制

*优良作法*是按照第1卷第6章的概述实施质量控制检查。如果使用高层方法确定排放，则可以使用更加广泛的质量控制检查和质量保证程序。对于第1卷第4章确定的*关键类别*，鼓励清单编制者采用较高质量保证和质量控制方法。

排放因子比较

清单编制者应当检查排放因子估算值是否在方法1提供的缺省排放因子范围之内，还要确保此排放因子与过程化学分析得出的值一致。例如，生产每吨金红石 TiO_2 ，来自氯化工艺过程中的金红石 TiO_2 的 CO_2 生成率不应低于 0.826 吨 CO_2 。如果排放因子在估算的范围之外，则*优良作法*是评估和记录说明差异的特定工厂条件。

如果收集各工厂的排放量测量数据，清单编制者应确保该测量符合国家或国际认可的标准。现场所用的质量控制程序也应直接参考并纳入质量控制计划。如果测量做法同质量控制标准不一致，则清单编制者应重新考虑这些数据的使用。

3.7.4.2 报告和归档

*优良作法*是按照第1卷6.11节的概述，记录和归档生产国家排放清单估算需要的所有信息。不可能在国家清单报告中纳入所有文档记录。然而，清单应包括使用的方法汇总以及源数据参考，以使报告的排放估算保持透明，且计算步骤可具有可追溯性。

工厂数据审核

对排放量估算值的充分审计需要如下工厂数据：

- 活动数据包括电极碳消耗量（钛渣）、煤还原剂用量（合成金红石）、碳热给料量（金红石 TiO_2 ）、钛渣产量、合成金红石产量和金红石 TiO_2 产量；
- 排放因子数据包括还原剂（碳电极和煤）的碳含量、碳热给料（石油焦）以及过程中的氧化比例；
- 计算和估算方法；
- 假定列表；
- 任何特定工厂测量方法和测量结果的文档记录。

总之，生产数据和过程数据被厂家视为专有，特别是某个国家内仅有少量工厂时。*优良作法*是运用适当技术（包括数据集）以确保对保密数据的保护。

3.8 纯碱生产

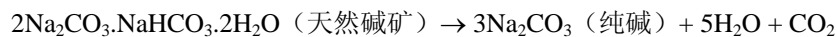
3.8.1 引言

纯碱（碳酸钠 Na_2CO_3 ）是白色的结晶体，在大量工业中用作原材料，包括玻璃生产、肥皂和清洁剂、纸浆和纸张的生产以及水处理。使用纯碱时会排放出二氧化碳（ CO_2 ），这些排放如第3卷第2章所述作为相关工业源考虑。生产期间亦会造成 CO_2 排放，其排放量取决于制造纯碱所用的工业过程。

纯碱生产的 CO_2 排放随制造过程而有很大差异。四个不同的过程可用于商业方式生产纯碱。这些过程中的三个过程，一水化物、倍半碳酸钠（天然碱）和直接碳酸化作用，均称为自然过程。第四个索尔伟过程归类为合成过程。碳酸钙（石灰石）在索尔伟过程中用作 CO_2 的来源。石灰石和其它碳酸盐的更多使用见第3卷第2章的讨论。

3.8.2 天然纯碱生产

全世界产量大约有 25% 是从含天然碳酸钠沉积物中产生的，这称为天然过程。在生产过程中，天然碱矿（制造天然纯碱的主要矿石）在转炉中煅烧，并通过化学方法转化成天然纯碱。二氧化碳和水是此过程的副产品。根据以下化学反应可以估算二氧化碳排放：



3.8.2.1 方法学问题

方法选择

方法的选择取决于具体国情。使用基于输出的方式（每单位产出量的排放）或基于输入的方式（每单位输入量的排放），可以估算排放。然而，*优良作法*是使用基于输入的方法，前提是数据可获。

根据可用的工厂级数据范围，将方法分类。方法 1 基于缺省值和国家统计资料，而方法 2 基于完整的工厂级输入或产出数据以及工厂特定排放因子。如果有 CO_2 排放的监控和直接测量，则等于方法 3。

方法 1

天然纯碱生产通过天然碱矿（ $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot \text{NaHCO}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ）的加热分解（煅烧）产生纯碱，排放出 CO_2 。根据上述化学反应，10.27 吨天然碱矿可以产生 1 吨二氧化碳。因此，对于使用天然碱矿的天然纯碱生产，可从天然碱矿输入或天然纯碱产出，采用以下公式计算得出二氧化碳的排放。

$$\text{公式 3.14} \\ \text{天然纯碱生产中 } \text{CO}_2 \text{ 排放 - 方法 1} \\ E_{\text{CO}_2} = AD \cdot EF$$

其中：

E_{CO_2} = CO_2 的排放量，单位为吨

AD = 使用的天然碱矿或生产的纯碱量，使用的天然碱矿吨数或生产的天然纯碱吨数

EF = 每单位天然碱矿输入或天然纯碱产出的排放因子，吨 CO_2 /吨天然碱矿或吨 CO_2 /吨生产的天然纯碱： $EF_{\text{Trona}} = 0.097$ 吨 CO_2 /吨天然碱矿， $EF_{\text{Soda Ash}} = 0.138$ 吨 CO_2 /吨生产的天然纯碱。

*优良作法*是评估现有国家统计资料的完整性。*优良作法*方法的选择应根据具体国情，如图 3.7 所示。估算天然纯碱生产中 CO_2 排放的决策树如果没有天然碱矿输入纯度的可用数据，则*优良作法*是，假定纯度为 90%，以调节公式 3.14 所示的排放因子。

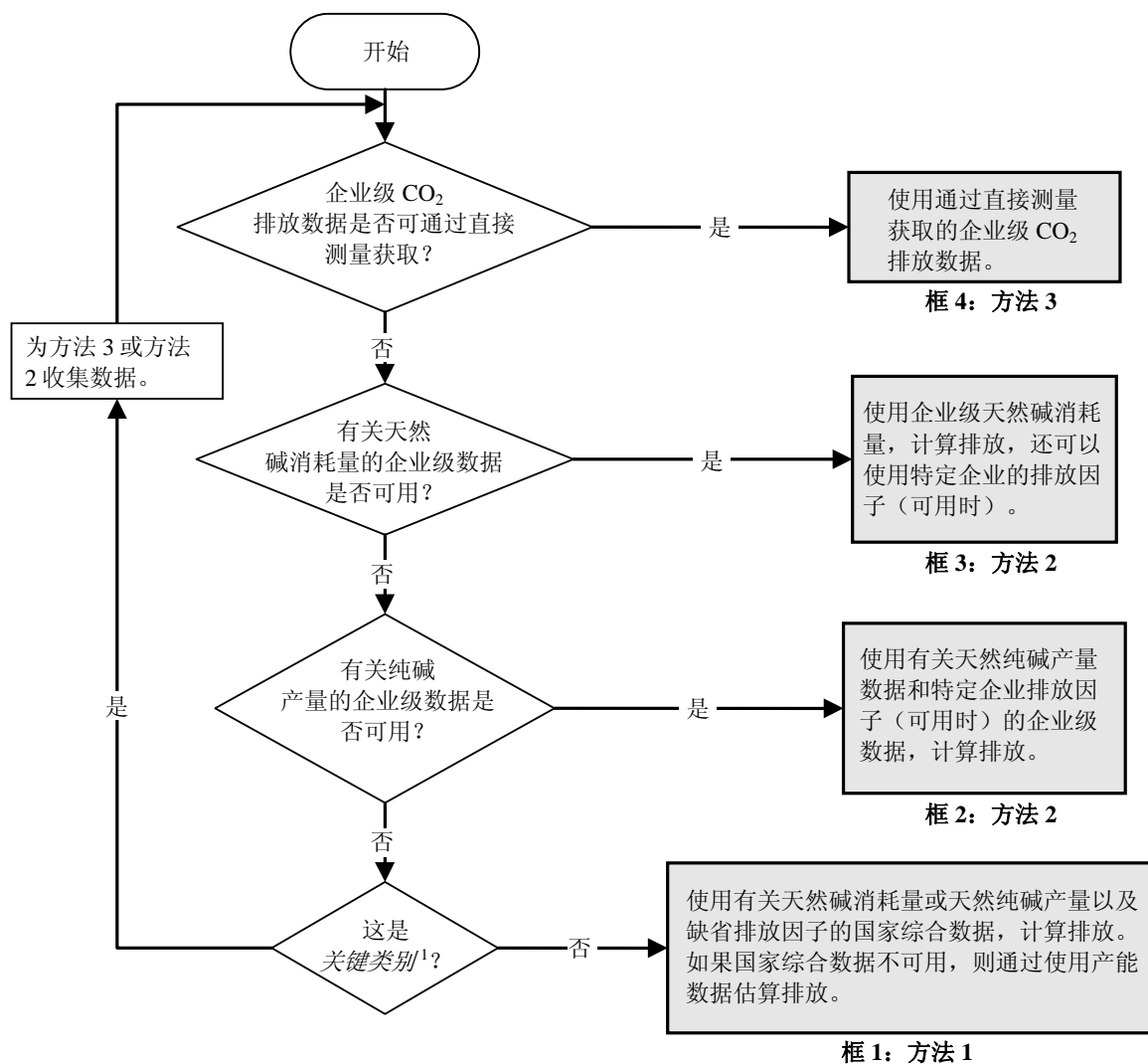
方法 2

若要使用方法 2，必须收集有关国内每家工厂天然碱矿消耗量或天然纯碱产量的完整数据，以及天然碱矿输入或纯碱产出的特定工厂排放因子。每家工厂的 CO₂ 排放量可使用任一变化的公式 3.14 来计算。如果没有特定工厂的排放因子，则可使用公式 3.14 中提供的缺省排放因子。CO₂ 排放总量为所有工厂的排放量之和。

方法 3

方法 3 使用工厂级 CO₂ 排放数据，它通过直接测量获得。排放总量为所有工厂的排放量之和。

图 3.7 估算天然纯碱生产中 CO₂ 排放的决策树



注:

1 有关关键类别和决策树使用的讨论, 请参见第 1 卷第 4 章“方法选择和类别识别”(参见 4.1.2 节有关有限资源部分)。

排放因子选择

方法 1

此方法使用公式 3.14 所示的缺省排放因子。从生产的天然纯碱与从天然碱矿中获得的提纯倍半碳酸钠之间的化学计量比率，推导出缺省排放因子。这二者基于目前使用的主要天然生产过程，其中，纯碱生产是通过煅烧已提纯倍半碳酸钠。

方法 2

方法 2 需要每单位天然碱矿输入或每单位天然纯碱产出的工厂级排放因子。工厂级排放因子应当反映天然碱矿输入和天然碱产出的纯度比例，*优良作法*是确保在推导工厂级排放因子时考虑到这些因素。

活动水平数据选择

*优良作法*是详细编制生产数据，以允许使用方法 2 或方法 3。当采用这些方法时，必须清晰区分产品，避免活动数据乘以错误的排放因子。

方法 1

方法 1 需要与国家天然碱矿消耗量或国家天然纯碱产量有关的数据。如果没有国家级活动数据，则可以使用有关产能的信息，同时使用缺省排放因子估算排放。*优良作法*是全国产能总量乘以产能使用因子的 $80\% \pm 10\%$ （即，70-90%的范围）。

方法 2

使用方法 2 时，应当在工厂级收集活动数据。最重要的数据是，每个工厂纯碱生产所用的天然碱矿数量以及生产的天然纯碱量。如果排放量从天然碱矿输入量推导出，尽管纯碱产量未用于计算，*优良作法*是仍收集和报告这些数据，以便可比较随着时间每单位产出量的输入，并提供确保时间序列一致的可靠基础。

完整性

活动水平数据（例如，天然碱矿使用率）的完整性是*优良作法*的关键属性。因此，*优良作法*是评估可用国家统计资料的完整性。如果没有工厂级数据，则*优良作法*是分类这些数据，并以国家级可用数据检查结果。这种作法能够评估是否有任何重要的纯碱生产商被遗漏，以确保考虑了国家内的所有生产过程。如果没有工厂级数据，则*优良作法*是使用产能数据以及国家统计资料来估算排放（出于完整性目的）。

建立一致的时间序列

*优良作法*是，在整个时间序列中，用同样的方法计算每一年纯碱生产的排放。如果没有数据能支持对时间序列中所有年份采用更严格的方法，*优良作法*就根据第 1 卷第 5 章提供的指南来重新计算空白。

3.8.2.2 不确定性评估

排放因子不确定性

化学计量比率是准确的数值，假定输入或产出纯度为 100%，缺省排放因子的不确定性忽略不计。然而，缺省因子不考虑天然碱矿或纯碱产出的比例纯度，预计在这两种情况下都会造成排放的高估。如上所述，如果没有天然碱矿输入纯度的数据，则*优良作法*是，假定纯度为 90%并调节公式 3.14 中所示的排放因子。*优良作法*是根据工厂级数据进行不确定性估算。

活动数据不确定性

若从工厂获得活动数据，则不确定性估算可从生产工厂获得。这应包括使用的天然碱矿和使用的天然纯碱的不确定性估算。从国家统计机构获得的数据通常不包括不确定性估算。*优良作法*是咨询国家统计机构，以获得有关任何抽样错误的信息。如果国家统计机构从氨气生产设施群收集数据，预期国家统计资料中的不确定性与咨询工厂确定的不确定性没有差异。如果没有其它来源的不确定性值，则可以使用缺省值 $\pm 5\%$ 。

3.8.2.3 质量保证/质量控制（QA/QC）、报告和归档

质量保证/质量控制

*优良作法*是实施第6章第1卷概述的质量控制检查以及排放估算的专家评审。也可以采用第1卷介绍的附加质量控制核查和质量保证程序，尤其是当运用较高级方法来估算这种排放源类别的排放时。对于第1卷第4章确定的*关键类别*，鼓励清单编制者采用较高质量保证和质量控制方法。

对采用不同方法的排放量估算进行比较

如果采用自下而上方法，则清单编制者应当将排放估算与采用自上而下方法的估算结果进行比较。应该记载这种比较的结果作为内部文件，包括对两者不一致方面的解释。

报告和归档

*优良作法*是按照第1卷6.11节的概述，记录和归档生产国家排放清单估算需要的所有信息。不可能在国家清单报告中纳入所有文档记录。然而，清单应包括使用的方法和引用数据源的汇总，以及重现估算所需的所有信息。

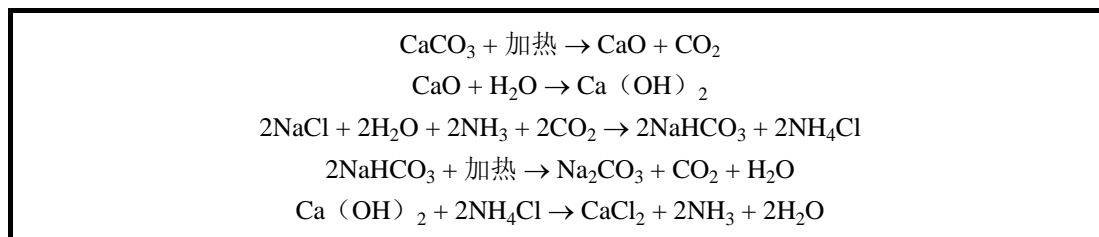
除了排放之外，*优良作法*是，报告计算中使用的活动数据（天然碱矿使用率）、相应的排放因子以及推导时使用的所有假定。

为保持时间序列排放的内部一致性，每当国家方法改变，*优良作法*是重新计算所有年份的排放。如果机密性对任何类型生产是个问题，则应进行最小程度的汇总来保证机密性。

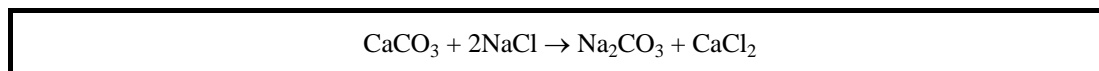
此外，清单编制者应当记录QA/QC程序。

3.8.3 索尔伟纯碱生产

全世界的纯碱产量大约有75%是从氯化钠中制成的合成纯碱。在索尔伟过程中，氯化钠盐水、石灰石、冶金焦炭和氨气是生产纯碱的一系列反应使用的原材料。然而，氨气被回收，只有少量会损耗。索尔伟过程中涉及的系列反应可以描述如下：



净总合反应可以汇总为：



从上述系列反应中，CO₂生成自两个高温分解过程。生成的CO₂被捕获、压缩并直接送到索尔伟沉淀塔，消耗于盐水（含水NaCl）和氨气混合物中。尽管生成的CO₂是副产品，但是CO₂被回收，用于碳酸化作用阶段，在理论上此过程是中性的，即CO₂生成量等于摄入量。

实际上，索尔伟生产过程中会有某些CO₂排放到大气中，因为实际中产生的CO₂要多于化学计量所需的量。多余的CO₂来自于石灰石与冶金级焦炭的煅烧过程。石灰石与焦炭组合，焦炭的重量相当于石灰石的7%左右。

单独纯碱工厂中的CO₂排放估算，应基于整个化学过程内CO₂的综合平衡。为了编制清单，可使用简单形式的平衡，假定CO₂排放是来自焦炭的化学计量氧化过程。索尔伟氨气纯碱生产过程是一项化工活动，排放应报告在工业过程与产品使用（IPPU）部门内。

**框 3.7
重复计算**

为了避免重复计算，应在 **IPPU 部门** 考虑纯碱生产过程中生成的 CO₂ 排放，这种排放不应纳入 **能源部门**。生产过程中使用的焦炭应从 **能源部门** 中扣除，因为其属于焦炭的非能源使用。

3.8.3.1 质量保证/质量控制（QA/QC）、报告和归档

在**能源部门**的索尔伟过程中使用冶金级焦炭产生的排放分配表明，**工业过程和产品使用部门**未提供估算这些排放的方法。然而，应收集和整理索尔伟过程中的纯碱产量数据，以确保过程中纯碱产量的所有数据均可用于记录、报告、归档和重新整理有关纯碱使用的国家统计资料。

质量保证/质量控制

*优良作法*是，按照第 1 卷第 6 章的概述实施质量控制检查。还可采用第 1 卷概述的附加质量控制检查和质量保证程序。对于第 1 卷第 4 章确定的**关键类别**，鼓励清单编制者采用较高质量保证和质量控制方法。

报告和归档

*优良作法*是按照第 1 卷 6.11 节的概述，记录和归档生产国家排放清单估算需要的所有信息。不可能在国家清单报告中纳入所有文档记录。然而，清单应包括使用的方法和引用数据源的汇总，以及重现估算所需的所有信息。

3.9 石油化工和碳黑生产

3.9.1 引言

石油化工将化石燃料（例如天然气）或石油提炼产品（例如石油精）用作原料。本节提供了甲醇、乙烯和丙烯²、二氯乙烯和丙烯腈生产中估算排放的指南。详细说明了这些石化产品，因为它们的全产生产量及其有关的温室气体排放量相对较大。然而，包括的化学产品并不代表整个石化过程工业。还有大量其它石化过程排放少量温室气体，此处没有对此提供明确的指南（例如苯乙烯生产）。

本节还提供了碳黑生产指南。碳黑被视为非石化产品；然而，碳黑生产过程使用了石化原料。碳黑生产中的排放少于石化过程中的排放，但是，在某些国家这种排放可能较多。

3.9 节的附件举例说明了产品生产链的原料，这些产品包括甲醇、乙烯和丙烯、氯乙烯、环氧乙烷、丙烯腈和碳黑。

分配和报告

在石化工业和碳黑工业中，初级化石燃料（天然气、石油、煤）在石化和碳黑生产中用于非燃料使用。这些初级化石燃料的使用，可能涉及燃烧部分碳氢化合物含量用于加热、生产次级燃料（例如分离的烟炷）。

从原料中获得的燃料所形成的燃烧排放，应分配到 IPPU 部门中的源类别。然而，如果燃料未用于源类别，而是转移到过程外在其它位置燃烧（例如区域加热使用），此排放应报告在恰当的能源部门源类别中。这些工业纳入化工业源类别（2B1 – 2B10），参见本卷第 1 章中图 1.1 有关燃料非能源使用的进一步讨论，请参见本卷第 1 章和第 5 章。

注意，国家能源统计资料可能包括化石燃料（包括天然气、油和煤）的燃烧总量以及能源生产的次级燃料（例如工业过程烟炷）。至关重要的是调查石化工业中使用的燃料是否纳入国家能源统计资料。如果是，则应从已计算能源部门排放中减去石化过程中的排放，避免重复计算。这对于乙烯和甲醇尤其相关，因为对于这两者，初级燃料（例如天然气、乙烷和丙烷）原料消耗量可能报告在国家能源统计资料中。

如果工厂中安装和采用了 CO₂ 捕获技术，*优良作法*是在高层方法排放计算中扣除捕获的 CO₂。缺省假设是没有出现 CO₂ 捕获和储存（CCS）。任何计算 CO₂ 捕获的方法均应考虑，过程中捕获的 CO₂ 排放可能是燃烧造成的，亦可能与过程有关。如果燃烧和过程排放要单独报告，则清单编制者应确保 CO₂ 的相同数量没有被重复计算。在这些情况下，捕获的 CO₂ 总量应最好报告在相应的能源燃烧和 IPPU 源类别中，且按照这些源类别生成的 CO₂ 量比例报告。有关 CO₂ 捕获和储存的更多信息，请参见第 3 卷第 1.2.2 节；有关捕获和储存的更多详细信息，请参见第 2 卷第 2.3.4 节。

石化过程可能使用其它位置捕获的 CO₂ 作为原料，CO₂ 亦可能从石化过程中捕获。这可能会造成潜在的重复计算问题。例如，某些甲醇工厂可能将其它工业过程中捕获的副产品 CO₂ 用作甲醇生产的原料。为了避免重复计算，捕获的 CO₂ 不应报告为捕获 CO₂ 过程的 CO₂ 排放。

² 注意，对于丙烯没有单独的清单编制方法。假定丙烯是乙烯生产的副产物。

甲醇

全世界几乎所有甲醇均是通过天然气的蒸汽重整方式制成的。蒸汽重整和变换反应产生由 CO_2 、一氧化碳 (CO) 和氢气 (H_2) 组成的“合成气体”。天然气到甲醇的生产过程会从合成气体中产生甲醇和副产品 CO_2 、 CO 和 H_2 。由天然气或其它原料生产甲醇有若干备选过程。这些包括常规重整过程、组合重整以及部分氧化过程。3.9 节附件 (附件 3.9A) 中, 叙述了甲醇生产中原料到产品过程流程图的示例。甲醇生产的过程说明见下框 3.8。

框 3.8
甲醇过程说明

常规重整过程

甲醇生产的常规重整过程涉及蒸汽重整 (可能包括单个重整器单元或初级重整器和次级重整器单元) 和甲醇合成。常规重整过程的综合公式为:

<u>蒸汽重整</u> $\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO} + 3 \text{H}_2$ $\text{C}_n\text{H}_m + n\text{H}_2\text{O} \rightarrow n\text{CO} + (m/2 + n) \text{H}_2$	<u>变换反应</u> $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$	<u>甲醇生产</u> $\text{CO} + 2 \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{OH}$ $\text{CO}_2 + 3 \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{OH} + \text{H}_2\text{O}$
--	--	--

<u>重整/变换反应</u> $2 \text{CH}_4 + 3 \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO} + \text{CO}_2 + 7 \text{H}_2$	<u>甲醇生产</u> $\text{CO} + \text{CO}_2 + 7 \text{H}_2 \rightarrow 2 \text{CH}_3\text{OH} + 2 \text{H}_2 + \text{H}_2\text{O}$
---	--

此过程中的多余氢以及含有甲烷 (CH_4) 的甲醇过程清洗气和非甲烷挥发性有机化合物 (NMVOC), 通常在甲醇生产过程中用于能源回收和燃烧, 以产生过程蒸汽和/或过程的电能。常规重整过程可能将其它工业过程中捕获的 CO_2 用作甲醇生产过程的补充原料。

混合重整过程

混合重整过程结合了常规蒸汽重整过程与催化部分氧化过程。部分氧化化学公式为:

<u>甲醇蒸汽重整反应</u> $\text{CH}_4 + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + 2 \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{OH}$	<u>原料氧化反应</u> $\text{CH}_4 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + 2 \text{H}_2$
---	--

混合重整过程产生一种合成气体, 它包含常比常规重整过程更具平衡性的比率, 即氢气与一氧化碳 (CO) 和 CO_2 的比率, 不产生能量回收的氢气气流。混合重整过程产生包含 CH_4 在内的清洗气, CH_4 在甲醇过程内燃烧用于能源回收。

其它生产过程

甲醇还可以从油、煤或石化原料的部分氧化过程产生, 或者从煤到合成气体的气化过程中产生; 然而, 这些原料和过程目前仅占全世界的少量甲醇产量。

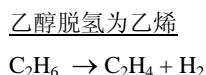
乙烯

全世界几乎所有乙烯均是通过石化原料的蒸汽裂解方式制成的。在石化厂，乙烯可通过石化给料蒸汽裂解产生，亦可以由石油提炼操作中的裂解和其他过程产生。乙烯生产的蒸汽裂解还会产生包括丙烯和丁二烯在内的次级产品。乙烯生产的蒸汽裂解过程的过程说明，如下框 3.9 所示。

框 3.9
乙烯过程说明

蒸汽裂解

乙烯生产的基本化学公式如下：



乙烯生产的蒸汽裂解所用原料的类型和组合随地区而有所差异，包括乙烷、丙烷、丁烷、石油精、汽油和其它石化原料。在美国，大部分乙烯是从乙烷的蒸汽裂解中产生的；而在欧洲、韩国和日本，大部分乙烯是从石油精的蒸汽裂解中生产的。

石化原料的蒸汽裂解产生乙烯时，还会产生其它高价值（可出售）的石化产品，包括丙烯、丁二烯和芳烃化合物。全球大部分丙烯是作为乙烯生产的副产品产生的，在石油提炼厂内从蒸汽裂解装置或液体催化裂解单元中回收。使用石油精原料的蒸汽裂解装置是丙烯的最大来源。还有其它过程技术可用于生产丙烯，包括丙烷的催化脱氢作用。注意，本节的排放估算方法仅适用于蒸汽裂解装置中乙烯和丙烯的生产，不适用于生产乙烯或丙烯的其它过程技术。蒸汽裂解过程还会产生氢气、甲烷和 C4+ 碳氢化合物等副产品，这些副产品通常在此过程内燃烧用于能源回收。

（Houdek, 2005: 第 3 页图 1, 第 4 页）

二氯乙烷和氯乙烯单体

世界上，几乎所有的二氯乙烷（1, 2 二氯乙烷）都是通过乙烯的直接氯化作用或氧氯化过程制成的，还可以通过两个过程的组成制成（系指“平衡的过程”）。3.9 节附件（附件 3.9A）中，叙述了甲醇生产中产品流程图的原料示例。二氯乙烷和氯乙烯单体生产的过程说明见以下框 3.10。注意，化合物‘二氯乙烷’亦称 1, 2-二氯乙烷。化合物“二氯乙烯”亦称为 1, 2-二氯乙烯，是不同的化合物。

框 3.10
二氯乙烷和氯乙烯单体过程说明

直接氯化 and 氧氯化过程

直接氯化过程涉及乙烯与氯产生二氯乙烷的气体阶段反应。直接氯化过程涉及乙烯与氢氯酸和氧产生二氯乙烷和水的反应。然后二氯乙烷裂解产生氯乙烯单体和盐酸。氧氯化过程产生一种过程废气（包括副产品 CO₂），它由乙烯给料的直接氧化所得。

直接氯化 and 氧氯化过程的基本化学公式如下：

直接氯化 $C_2H_4 + Cl_2 \rightarrow C_2H_4Cl_2$	氧氯化反应 $C_2H_4 + \frac{1}{2} O_2 + 2 HCl \rightarrow C_2H_4Cl_2 + H_2O$ $[C_2H_4 + 3 O_2 \rightarrow 2 CO_2 + 2 H_2O]$	二氯乙烷 > 氯乙烯 $2 C_2H_4Cl_2 \rightarrow 2 CH_2CHCl + 2 HCl$
--	---	---

框 3.10 (续)
二氯乙烷和氯乙烯单体过程说明

平衡过程

产生二氯乙烷的直接氯化过程和产生氯乙烯单体的二氯乙烷裂解过程的组合之后，产生多余的氯化氢。氧氯化过程为氯化氢提供了汇。因此，二氯乙烷/氯乙烯单体生产设施可能起“平衡的过程”作用，即直接氯化过程和氧氯化过程二者的结合。“平衡的过程”还产生过程泄放气体（包含副产品 CO₂），它由乙烯给料的直接氧化所得。

由乙烯产生氯乙烯单体的“平衡的过程”，基本化学公式如下：

<u>二氯乙烷-氯乙烯单体反应</u> $2 \text{C}_2\text{H}_4 + \text{Cl}_2 + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{CH}_2\text{CHCl} + \text{H}_2\text{O}$	<u>原料氧化反应</u> $[\text{C}_2\text{H}_4 + 3 \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{CO}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}]$
--	---

二氯乙烷生产的直接氯化过程和氧氯化过程中，乙烯给料的使用率并非 100% 有效。大约 3% 的乙烯原料不是转化为二氯乙烷，而是转化为 CO₂（通过氧氯化过程中的直接氧化）或其它氯化的碳氢化合物（通过氧氯化过程或直接氯化过程）。包含其它氯化碳氢化合物的过程烟气，通常在排放到大气之前进行处理。热焚烧过程或催化焚烧过程中，氯化的碳氢化合物转化为 CO₂。大多数二氯乙烷/氯乙烯单体工厂，从焚烧炉烟气和过程烟气中回收能源。

环氧乙烷

环氧乙烷（C₂H₄O）是乙烯经催化与氧气而反应生成的。乙烯原料直接氧化所得的副产品 CO₂，使用回收的碳酸盐溶液从过程泄放蒸汽中移除，回收的 CO₂ 可排放到大气中或回收以作进一步使用（例如，食品生产）。通过空气或从空气中分离出的纯净氧气，可将氧气供应给此过程。3.9 节附件（附件 3.9A）中，叙述了环氧乙烷生产中原料到产品过程流程图的示例。环氧乙烷生产的过程说明如下框 3.11 所示。

框 3.11
环氧乙烷过程说明

从乙烯生产环氧乙烷以及生产单乙烯基乙二醇的基本化学公式如下：

<u>环氧乙烷反应</u> $\text{C}_2\text{H}_4 + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4\text{O}$	<u>原料氧化反应</u> $\text{C}_2\text{H}_4 + 3 \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{CO}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$	<u>乙烯基乙二醇生产</u> $\text{C}_2\text{H}_4\text{O} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{HO}-\text{C}_2\text{H}_4-\text{OH}$
---	---	---

按照生成每吨环氧乙烷消耗的乙烯吨数，以环氧乙烷反应与副产品反应的比率，定义环氧乙烷过程的选择性。组合环氧乙烷反应和副产品 CO₂ 反应是放热的，会产生热量，这些热量可回收用于过程蒸汽的生产。环氧乙烷过程还会产生其它液体和烟气副产品（例如乙烷），可在过程内燃烧用于能源回收。过程中产生的 CO₂ 量和其它副产品量以及从过程中产生的蒸汽量，取决于过程的选择性。

环氧乙烷用作制造乙二醇、乙二醇醚、酒精和胺的原料。全球生产近 70% 的环氧乙烷用于制造乙二醇，包括单乙烯基乙二醇。

丙烯腈

全世界有 90% 多丙烯腈（氰化乙烯）的生产方式是通过催化氨气（NH₃）、氧气与丙烯的直接氨氧化。此过程称为 SOHIO 过程，以俄亥俄标准石油公司（SOHIO）命名。丙烯腈的生产还可通过丙烷的氨氧化过程或丙烷与过氧化氢的直接反应。最近，英国石油公司（BP）和其它制造商已经将丙烷-过氧化物直接过程商业化。（DOE, 2000）然而，过程数据不易用于从丙烷原料生产丙烯腈。因此，对此过程没有提供排放估算方法。3.9 节附件（附件 3.9A）中，叙述从丙烯中生产丙烯腈时原料到产品过程流程图的示例。丙烯腈生产的过程说明见下框 3.12。

框 3.12
丙烯腈过程说明

SOHIO 过程

SOHIO 过程涉及化学级丙烯、氨气和氧气经催化剂的液化床反应。催化剂是重金属氧化的混合物（包括铍和钼）。此过程产生的初级产品为丙烯腈，次级产品为乙腈（甲基腈）和氰化氢（HCN）。初级产品丙烯腈的过程产量，部分取决于使用的催化剂类型以及过程配置。氨氧化过程还从丙烯原料的直接氧化过程中产生副产品 CO₂、CO 和水，从氨氧化过程副反应中产生其它碳氢化合物。

通过吸收从乙腈中分离出乙腈和氰化氢，氰化氢可用于在现场制造其它产品或作为产品出售。未使用或未出售的氰化氢可燃烧用于能源回收或发光燃烧。乙腈还可回收作为产品出售，但更常见的是燃烧乙腈用作能源回收或发光燃烧。主吸收器中的烟气泄放包含 CO₂、CO、氮、水、未反应的丙烯和其它碳氢化合物，这些烟气可以在热氧化单元或催化氧化单元中发光燃烧或处理，可用作能源回收，亦可不用作能源回收。

从乙腈-氰化氢 - 丙烯腈吸收分离过程中产生的重底液亦可燃烧用于能源回收或循环使用。丙烯腈和其它非甲烷碳氢化合物还释放于杂项过程泄放，包括储罐。这些杂项过程泄放可以发光燃烧或捕获及燃烧，用于能源回收。

通过氨氧化生产丙烯腈的基本化学公式如下：

<p><u>丙烯腈反应</u></p> $\text{CH}_2 = \text{CHCH}_3 + 1.5 \text{O}_2 + \text{NH}_3 \rightarrow \text{CH}_2 = \text{CHCN} + 3 \text{H}_2\text{O}$	<p><u>氰化氢反应</u></p> $\text{CH}_2 = \text{CHCH}_3 + 3 \text{O}_2 + 3 \text{NH}_3 \rightarrow 3 \text{HCN} + 6 \text{H}_2\text{O}$
<p><u>乙腈反应</u></p> $\text{CH}_2 = \text{CHCH}_3 + 1.5 \text{O}_2 + 1.5 \text{NH}_3 \rightarrow 1.5 \text{CH}_3\text{CN} + 3 \text{H}_2\text{O}$	<p><u>原料氧化作用</u></p> $\text{C}_3\text{H}_6 + 4.5 \text{O}_2 \rightarrow 3 \text{CO}_2 + 3 \text{H}_2\text{O}$ $\text{C}_3\text{H}_6 + 3 \text{O}_2 \rightarrow 3 \text{CO} + 3 \text{H}_2\text{O}$

丙烯到丙烯腈的氨氧化过程中，丙烯原料使用率并非 100%。大约 70% 的丙烯原料被转化为丙烯腈。大约 85% 的丙烯原料被转化为初级产品丙烯腈，亦或次级产品乙腈或氰化氢。其余的丙烯原料通过氨氧化过程原料的直接氧化，直接转化成 CO₂，或在氨氧化过程中通过副反应转化成其它碳氢化合物。

碳黑

全世界几乎所有碳黑的生产均是使用“炉黑”过程基于石油，或基于煤的原料。碳黑生产的过程说明见下框 3.13。

炉黑过程是部分燃烧过程，部分碳黑原料经燃烧为此过程提供能源。碳黑的生产还可使用其它石油原料，或基于煤的原料部分氧化过程，包括“槽黑”过程和“灯黑”过程；还可直接通过天然气或芳烃油的部分氧化（“槽黑过程”）。碳黑的生产还可通过含乙腈原料的热裂解（乙腈黑过程），或其它碳氢化合物的热裂解（热黑过程）。全世界约 95% 的碳黑产量是通过炉黑过程生产的；其余的 5% 通过其它过程生产。

全世界近 90% 生产的碳黑用于轮胎和橡胶产业（称为“橡胶”），其余的碳黑用于色素应用场合（例如墨水）和其它应用场合（例如碳性干电池）。碳黑生成可采用炉黑过程、热黑过程、乙炔碳黑过程、槽黑过程和灯黑过程。这些过程在下框 3.13 中进一步说明。3.9 节附件（附件 3.9A）中，叙述了碳黑生产中原料到产品过程流程图的示例。

框 3.13 碳黑生产过程说明

炉黑过程

炉黑过程由“碳黑原料”（亦称为“碳黑油”）生产碳黑，其中，“碳黑原料”是重质芳烃油，可作为副产品产自石油精炼过程或冶金（煤）焦炭生产过程。对于石油衍生或煤衍生原料，“初级原料”碳黑原料注入一个用“次级原料”（通常是天然气或油）加热的炉中。天然气次级原料和部分碳黑原料经氧化，皆为将其余碳黑原料热分解为碳黑的生产过程提供热量。炉黑过程中的泄放气体包含 CO_2 、 CO 、硫化物、 CH_4 和 NMVOC。部分尾气通常燃烧用于能源回收，以加热下游碳黑产品干燥器。其余的尾气还可能经燃烧用于能源回收、发光燃烧或未经控制排放到大气中。

热裂炭黑法

在一对生产炉内没有空气时，通过气态碳氢化合物或雾化石油的热分解，在热裂炭黑过程中生产碳黑。碳黑原料加入预先加热的炉子中，用次级原料（通常是天然气）或碳黑生产过程中的烟气加热。一个炉子用次级原料预先加热，而另一个炉子接收碳黑原料。此过程会产生约 45% 的碳输入总量（或所用总碳黑原料的 40%），而能源使用率大约为已生产碳黑的 280 MJ/kg。

乙炔炭黑过程

通过将原料加到预先加热的反应器中，其中乙炔经放热过程分解为碳黑，从而由乙炔或含乙炔的少量碳氢化合物产生碳黑。全世界每年乙炔炭黑总产量大约仅 40 000 公吨。而此过程产生的碳黑为理论产出的大约 95-99%。乙炔炭黑大约为 99.7% 碳。

其它生产过程

槽黑过程涉及蒸发碳黑原料的部分氧化过程，此原料同运载气体（可以是焦炉煤气、氢气或甲烷）在炉子中燃烧。此过程的碳黑产量可能是橡胶级碳黑生产中碳输入总量的 60%，或色素级碳黑碳输入总量的 10-30%。

灯黑过程涉及浅锅中碳黑原料的露天燃烧。就灯黑过程的原料产量以及能源消耗量来说，不易获得数据。此过程占全世界碳黑产量中微不足道的百分比。

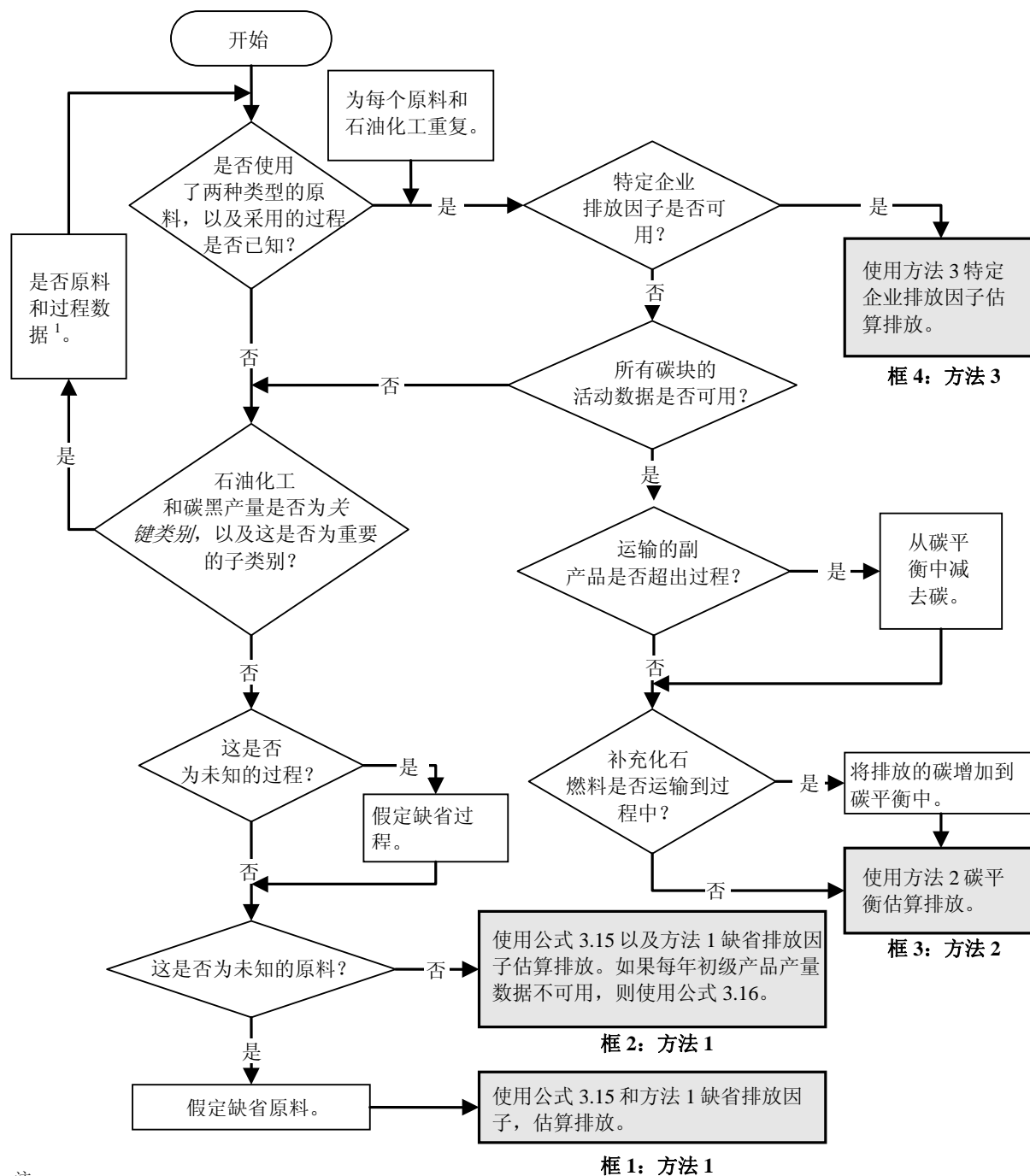
（Kirk Othmer, 1992）

3.9.2 方法学问题

3.9.2.1 方法选择

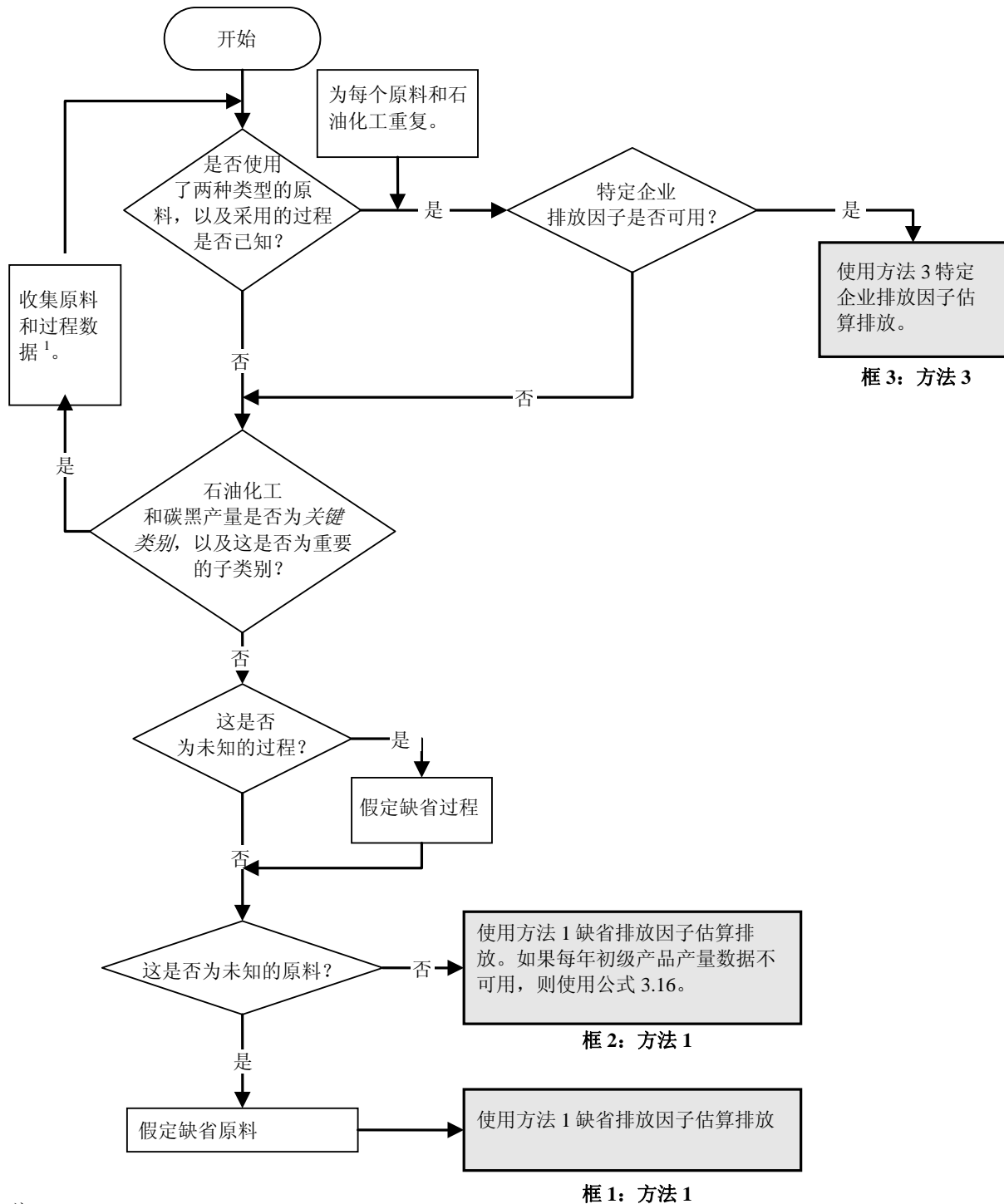
石化和碳黑生产中的排放因使用的过程和原料而有所差异。因此，应对使用的每个产品、过程和原料的方法反复选择。根据数据的可获性，提供了三个方法。方法的选择取决于具体国情，其决策树如图 3.8 和图 3.9 中所示。

图 3.8 石化工业和碳黑工业中 CO₂ 排放估算的决策树



注:

1 有关关键类别和决策树使用的讨论, 请参见第 1 卷第 4 章“方法选择和类别识别”(参见 4.1.2 节有关有限资源部分)。

图 3.9 石化工业和碳黑工业中 CH₄ 排放估算的决策树

注:

1 有关关键类别和决策树使用的讨论, 请参见第 1 卷第 4 章“方法选择和类别识别”(参见 4.1.2 节有关有限资源部分)。

2 注意没有采用方法 2 估算 CH₄ 排放。方法 2 是总原料碳质量平衡方法, 适用于估算总的碳 (CO₂) 排放, 但不适用于估算 CH₄ 排放。

方法 3 可用于估算工厂级 CO₂ 排放和 CH₄ 排放。方法 3 取决于石化过程中工厂特定数据的可获性。方法 2 是一种质量平衡方法, 适用于估算 CO₂ 排放, 却不适用于估算 CH₄ 排放。当使用方法 2 时, 此过程中初级原料和次级原料的碳流量皆纳入质量平衡计算。此过程中, 初级燃料的碳流程可能涉及部分碳氢化合物含量的燃烧, 以用于提高热量以及次级燃料 (例如烟气) 的生产。为了应用方法 2, 必须说明此过

程初级和次级原料流程以及初级和次级产品流程的特征，还必须说明此过程内能源回收副产品流程以及过程外运输副产品流程的特征。

二氧化碳

CO₂ 排放方法选择的决策树，如图 3.8 所示。本节将叙述方法 1、方法 2 和方法 3。

方法 1 基于产品排放因子方法

石化过程中，如果工厂级特定数据或碳流量活动数据均不可获得，则方法 1 排放因子方法适用于估算石化过程中的 CO₂ 排放。方法 1 排放因子方法不需要石化生产过程中每个含碳原料消耗量的活动数据。它仅需要已生产产品量的活动数据。方法 1 不考虑可能由石化过程生成的一氧化碳或 NMVOC 排放的碳含量。本节中石化生产过程的公式还适用于碳黑生产。

根据每个石化生产的活动数据以及每个石化的特定过程排放因子，使用方法 1 来计算石化过程中的排放，各种初级石化产品（例如甲醇、乙烯、二氯乙烷、环氧乙烷、丙稀腈）和碳黑的产量如公式 3.15 所示。

公式 3.15
方法 1 CO₂ 排放计算

$$ECO_{2i} = PP_i \cdot EF_i \cdot GAF / 100$$

其中：

ECO_{2i} = 石化产品 *i* 生产中 CO₂ 排放量，单位为吨

PP_i = 石化产品 *i* 的年产量，单位为吨

EF_i = 石化产品 *i* 的 CO₂ 排放因子，吨 CO₂/吨生产的产品

GAF = 地理调整因子（有关乙烯生产方法 1 CO₂ 排放因子的，请参见表 3.15），百分比

根据西欧实施的乙烯蒸汽裂解装置数据，已经确定了乙烯生产（在 3.9.2.2 节中讨论）的方法 1 CO₂ 排放因子。地理调节因子适用于方法 1 排放因子，以便考虑蒸汽裂解装置工作效率中的地区多变性。地理调节因子仅适用于乙烯生产。

如果没有初级产品年产量的活动数据，则初级产品产量可能从原料消耗量估算，如公式 3.16 所示：

公式 3.16
初级产品产量估算

$$PP_i = \sum_k (FA_{i,k} \cdot SPP_{i,k})$$

其中：

PP_i = 石化产品 *i* 的年产量，单位为吨

FA_{i,k} = 石化产品 (*i*) 生产中消耗原料 *k* 的年消耗量，单位为吨

SPP_{i,k} = 石化产品 *i* 和原料 *k* 的特定初级产品产量因子，吨初级产品/吨消耗的原料

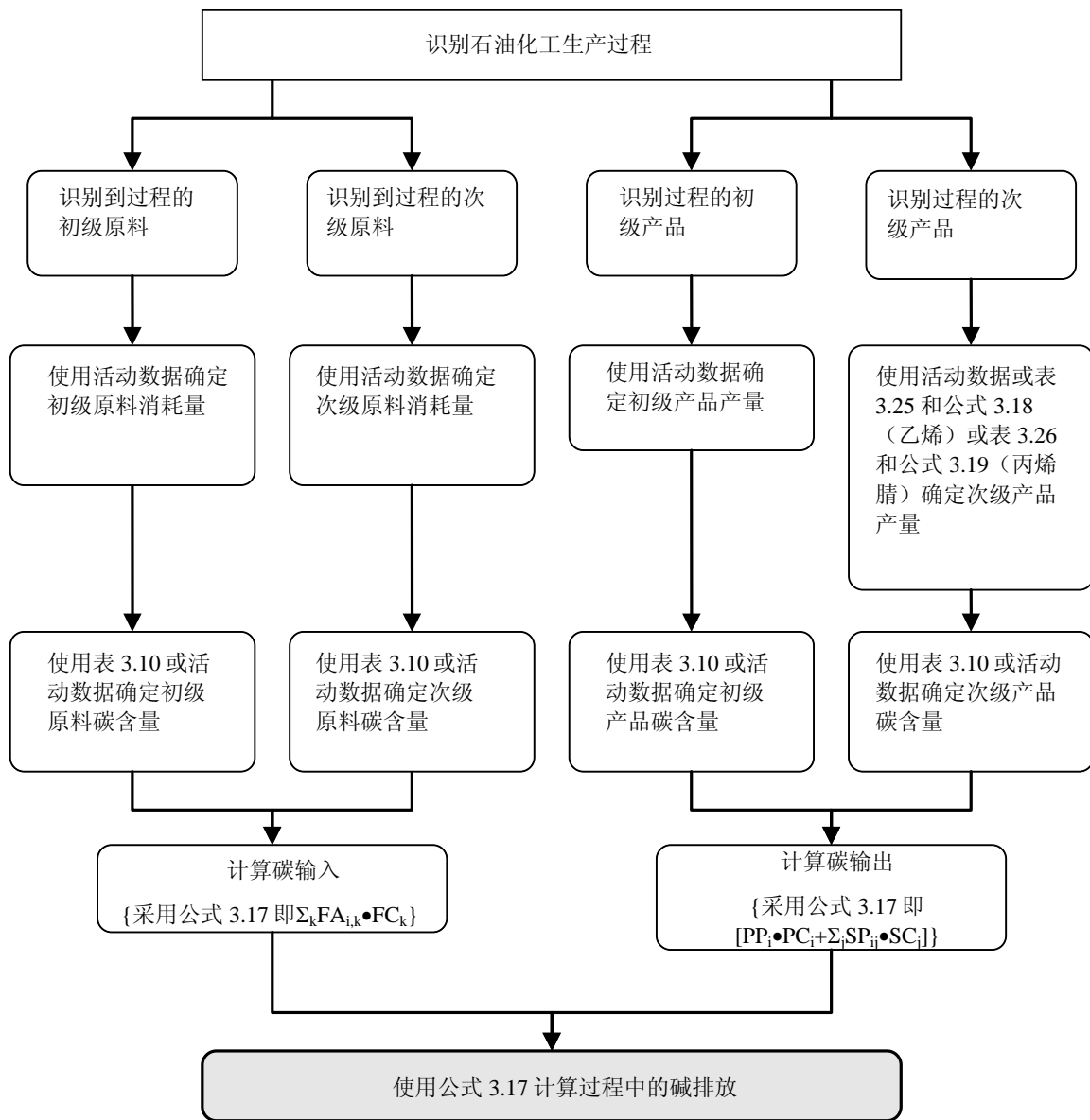
将公式 3.15 或公式 3.15 和公式 3.16 分别运用于每个石化过程的各个已知原料。图 3.8 中框 1 所示的方法 1 排放估算将使用公式 3.15，而图 3.8 中框 2 所示的方法 1 排放估算将使用公式 3.15 或公式 3.16 和公式 3.15。如果初级产品年产量数据可用于石化过程，则只使用公式 3.15 即可。如果没有初级产品年产量数据，但原料消耗数据可用于石化过程，则使用公式 3.16 估算初级产品的年产量，而使用公式 3.16 估算的初级产品年产量将在公式 3.15 中用于估算排放。

方法 2 总原料碳平衡方法

方法 2 是特定原料和特定过程的碳平衡方法。如果活动数据可用于原料消耗量以及初级和次级产品产量和处理量，则可以使用此方法。若要实施方法 2，需要所有碳流程的活动数据。3.9 节附件纳入了过程流

程图的示例，说明了甲醇、二氯乙烷、环氧乙烷、丙烯腈和碳黑生产过程的原料和产品流程。蒸汽裂解过程中乙烯生产的潜在原料以及产品数量如此，过程说明采用原料-产品矩阵要好采用过程流程图。乙烯生产的原料-产品矩阵纳入 3.9.2.3 节表 3.25。方法 2 的流程图如图 3.10 所示。

图 3.10 方法 2 碳质量平衡流程图



方法 2 计算差值，即进入生产过程中作为初级原料和次级原料的碳总量与作为石化产品离开生产过程的碳含量之间的差值。初级原料和次级原料的碳含量与过程中生产及回收的初级产品和次级产品的碳含量之间的差值，是作为 CO_2 计算的。方法 2 质量平衡方法，基于下列假定：过程的所有碳输入量转换为初级和次级产品或转换为 CO_2 。这意味着，假定过程中转换为 CO 、 CH_4 或 NMVOC 的任意碳输入量为 CO_2 排放，用于质量平衡计算。

方法 2 的总合质量平衡公式，即公式 3.17。

公式 3.17
总合方法 2 质量平衡公式

$$ECO2_i = \left\{ \sum_k (FA_{i,k} \cdot FC_k) - \left[PP_i \cdot PC_i + \sum_j (SP_{i,j} \cdot SC_j) \right] \right\} \cdot 44/12$$

其中：

$ECO2_i$ = 石化产品 i 生产中 CO_2 排放量，单位为吨

$FA_{i,k}$ = 石化产品 i 生产中原料 k 的年消耗量，单位为吨

FC_k = 原料 k 的碳含量，吨 C/吨原料

PP_i = 初级石化产品 i 的年产量，单位为吨

PC_i = 初级石化产品 i 的碳含量，吨 C/吨产品

$SP_{i,j}$ = 从石化产品 i 的生产过程中生产的次级产品 j 的年产量，单位为吨[对于甲醇、二氯乙烷、环氧乙烷和碳黑过程， $SP_{i,j}$ 的值为零，原因是这些过程中没有产生次级产品。有关乙烯生产和丙烯腈生产，请参见以下次级产品生产公式 3.18 和 3.19 来计算 $SP_{i,j}$ 的值。]

SC_j = 次级产品 j 的碳含量，吨 C/吨产品

对于乙烯生产和丙烯腈生产，此过程中初级产品和次级产品会同时产生。如果没有这些过程产生的次级产品量的活动数据，则可通过将缺省值应用到初级原料消耗量，来估算产生的次级产品量，如公式 3.18 和 3.19 所示：

公式 3.18
由初级产品 [乙烯] 产量估算次级产品产量

$$SP_{Ethylene,j} = \sum_k (FA_{Ethylene,k} \cdot SSP_{j,k})$$

其中：

$SP_{Ethylene,j}$ = 乙烯生产次级产品 j 的年产量，单位为吨

$FA_{Ethylene,k}$ = 乙烯生产中消耗的原料 k 的年消耗量，单位为吨

$SSP_{j,k}$ = 次级产品 j 和原料 k 的特定次级产品产量因子，吨次级产品/吨消耗的原料

公式 3.19
由初级产品 [丙烯腈] 产量估算次级产品产量

$$SP_{Acrylonitrile,j} = \sum_k (FP_{Acrylonitrile,k} \cdot SSP_{j,k})$$

其中：

$SP_{Acrylonitrile,j}$ = 丙烯腈生产中次级产品 j 的年产量，单位为吨

$FP_{Acrylonitrile,k}$ = 原料 k 中丙烯腈的年产量，单位为吨

$SSP_{j,k}$ = 次级产品 j 和原料 k 的特定次级产品产量因子，吨次级产品/吨生产的丙烯腈

注：预期在大多数情况下，只有单个原料（丙烯）用于丙烯腈生产。

原料和产品碳含量

原料和石化生产过程的产品的碳含量列在表 3.10 中，单位为每吨原料或产品的碳吨数。纯物质（例如甲醇）的碳含量由化学公式计算。其它原料和产品（例如碳黑原料、碳黑）的碳含量根据文献来源估算。化石燃料（例如，天然气、石油精）的代表性碳含量，可见第 2 卷第 1 章表 1.3：能源；然而，化石燃料的碳含量会随国家和地区而有所差异，最佳获取途径为国家能源统计资料，或化石燃料产品规范或国家标准。

方法3 直接估算特定工厂排放

最严格的优良作法是，使用工厂具体数据，计算石化生产过程的 CO₂ 排放。为了用运方法 3，需要工厂特定数据和/或工厂特定测量数据。石化生产过程中的排放包括燃料或过程副产品经燃烧为生产过程提供热量或热能时排放的 CO₂，从过程泄放中排放的 CO₂ 以及从喷焰燃烧废气中排放的 CO₂。这些排放使用公式 3.20-公式 3.22 计算。

石化生产过程的总合 CO₂ 排放使用公式 3.20 计算。

公式 3.20
方法 3 CO₂ 排放计算公式

$$ECO2_i = E_{\text{燃烧},i} + E_{\text{过程泄放},i} + E_{\text{火炬},i}$$

其中：

$ECO2_i$ = 石化产品 i 生产中 CO₂ 排放量，单位为吨

$E_{\text{燃烧},i}$ = 燃料或过程副产品经燃烧，为石化产品 i 的生产过程提供热量或热能时排放的 CO₂ 量，单位为吨

$E_{\text{过程泄放},i}$ = 石化产品 i 的生产期间从过程泄放中排放的 CO₂ 量，单位为吨

$E_{\text{喷焰燃烧},i}$ = 石化产品 i 的生产期间从喷焰燃烧的废气中排放的 CO₂ 量，单位为吨

$E_{\text{燃烧}}$ 和 $E_{\text{喷焰燃烧}}$ 如公式 3.21 和公式 3.22 所示，其中，应使用工厂具体数据或国家净发热值数据。排放因子由燃料的碳含量、燃烧氧化因子和常数 (44/12) 给出，将此结果从碳转换成 CO₂。如果排放因子未知，则缺省值可见第 2 卷“能源”第 1 章表 1.4。净发热值纳入第 2 卷“能源”。碳含量纳入第 2 卷“能源”第 1 章中表 1.3。对于过程泄放，清单编制者应直接测量/估算 CO₂ 的排放，因此不提供进一步公式。

公式 3.21
燃料燃烧方法 3 CO₂ 排放计算

$$E_{\text{燃烧},i} = \sum_k (FA_{i,k} \cdot NCV_k \cdot EF_k)$$

其中：

$FA_{i,k}$ = 石化产品 i 生产中燃料 k 的消耗量，单位为吨

NCV_k = 燃料 k 的净发热值，TJ/吨

(注：第 2 卷第 1 章表 1.2 中，净发热值用 TJ/kg 表示)

EF_k = 燃料 k 的 CO₂ 排放因子，吨 CO₂/TJ

(注：在第 2 卷第 1 章的表 1.4 中，CO₂ 排放因子用 kg/TJ 表示)

公式 3.22
火炬气方法 3 CO₂ 排放计算

$$E_{\text{火炬},i} = \sum_k (FG_{i,k} \cdot NCV_k \cdot EF_k)$$

其中：

$FG_{i,k}$ = 石化产品 i 生产期间火炬气 k 的量，单位为吨

NCV_k = 火炬气 k 的净发热值，TJ/吨

(注：第 2 卷第 1 章表 1.2 中，净发热值用 TJ/kg 表示)

EF_k = 火炬气 k 的 CO₂ 排放因子，吨 CO₂/TJ

(注：在第 2 卷第 1 章的表 1.4 中，CO₂ 排放因子用 kg/TJ 表示)

表 3.10
石化原料和产品的特定碳含量

物质	碳（每吨原料或产品的碳吨数）
乙腈	0.5852
丙烯腈	0.6664
丁二烯	0.888
碳黑	0.970
碳黑原料	0.900
乙烷	0.856
乙烯	0.856
二氯乙烷	0.245
乙二醇	0.387
环氧乙烷	0.545
氰化氢	0.4444
甲醇	0.375
甲烷	0.749
丙烷	0.817
丙烯	0.8563
氯乙烯单体	0.384

注：天然气和石油精的碳含量值因国家和地区而异。天然气、石油精和可用作石化原料的其它初级燃料的净发热值（NCV），皆纳入第2卷“能源”第1章表1.2中。原料碳含量纳入第2卷“能源”第1章表1.3中。

甲烷

CH₄排放方法选择的决策树，如图 3.9 所示。本节叙述 CH₄的方法 1 和方法 3。方法 2 不适用于 CH₄估算。

方法 1 基于产品排放因子方法

石化过程中的 CH₄ 排放可能是逃逸排放和/或过程泄放排放。逃逸排放散发自法兰、阀门和其它过程设备。过程泄放源的排放包括喷焰燃烧中和能源回收系统中的废气不完全燃烧。运用方法 1 计算 CH₄排放时，可以使用公式 3.23 计算 CH₄逃逸排放，使用公式 3.24 计算过程泄放排放，使用公式 3.25 计算 CH₄总排放。对于石化过程，如果没有初级产品年产量数据，而有原料消耗数据，则可使用公式 3.16 估算初级产品的年产量，接着使用公式 3.16 估算的初级产品年产量可运用在公式 3.23 和公式 3.24 中以估算排放。

公式 3.23

方法 1 CH₄逃逸排放计算

$$ECH4_{\text{逃逸},i} = PP_i \cdot EFf_i$$

公式 3.24

方法 1 CH₄过程泄放排放计算

$$ECH4_{\text{过程泄放},i} = PP_i \cdot EFP_i$$

公式 3.25

方法 1 CH₄总排放量计算

$$ECH4_{\text{总量},i} = ECH4_{\text{逃逸},i} + ECH4_{\text{过程泄放},i}$$

其中：

$ECH4_{\text{总排放},i}$ = 石化产品 i 生产中 CH₄ 总排放量，单位为 kg

$ECH4_{\text{逃逸排放},i}$ = 石化产品 i 生产中 CH₄ 的逃逸排放量，单位为 kg

$ECH4_{\text{过程泄放},i}$ = 石化产品 i 生产中 CH₄ 的过程泄放排放量，单位为 kg

PP_i = 石化产品 i 的年产量，单位为吨

EFP_i = 石化产品 i 的 CH₄ 逃逸排放因子，kg CH₄/吨产品

EFP_i = 石化产品 i 的 CH₄ 过程泄放排放因子，kg CH₄/吨产品

方法 2 总原料碳平衡方法

总原料碳质量平衡方法不适用于估算 CH₄ 排放量。总碳质量平衡方法估算过程中总碳排放量，但不直接提供散发 CO₂、CH₄、CO 或 NMVOC 时的碳排放总量的估算值。

方法 3 直接估算特定工厂排放

方法 3 基于连续或定期性特定工厂的测量。石化生产过程中的排放，包括燃料或过程副产品经燃烧为生产过程提供热量或热能时排放的 CH₄、从过程泄放中排放的 CH₄ 以及从喷焰燃烧废气中排放的 CH₄。如果甲烷直接泄放到大气中，则会成为主要排放。过程泄放中的 CH₄ 排放还可以在喷焰燃烧或能源回收装置中燃烧。在估算 CH₄ 逃逸排放时，直接在工厂之上或热柱之中 VOC 的大气浓度测量是首选的活动数据；然而，这些数据可能不可获。大气测量通常很昂贵，且通常不采用连续的测量，而是采用离散和定期性的测量程序来获得数据，用作工厂特定排放因子开发的基础。然后，将这些测量程序的结果与其它工厂过程参数关联，从而能够估算测量周期之间的排放。

工厂废气流量中 VOC 和 CH₄ 浓度的直接测量，以及工厂阀门、连接件和使用总合泄漏检测程序的相关设备中逃逸 VOC 和 CH₄ 排放的直接测量，还可用于获取工厂特定数据，以得出 CH₄ 排放的方法 3 估算。然而，对于散发 CH₄ 的所有相关工厂设备，工厂特定泄漏探测程序应当提供逃逸 CH₄ 排放。类似地，烟囱和通风管道的工厂特定测量数据需要涵盖工厂中主要的烟囱和通风管道 CH₄ 排放源，以便为方法 3 排放计算提供基础。

过程烟囱和通风管道中的 CH₄ 排放估算，可通过废气中 CH₄ 浓度的直接测量，或作为废气中测量的 VOC 总浓度组成成分。工厂设备（例如阀门、连接件）中，CH₄ 的逃逸排放估算可通过特定工厂泄漏探测数据和工厂设备清单的应用，假设特定工厂泄漏探测程序和设备清单是总合性的，以便此程序为散发 CH₄ 的所有相关工厂设备提供 CH₄ 逃逸排放数据。类似地，烟囱和通风管道的工厂特定测量数据需要涵盖工厂中主要的烟囱和通风管道 CH₄ 排放源，以便为方法 3 排放计算提供基础。

逃逸排放测量还可根据工厂或热柱顺风处大气中的 CH₄ 浓度。这些大气测量数据通常测量整个工厂的排放，而不会隔离不同的源。除了 CH₄ 浓度之外，还必须测量热柱面积和风速。公式 3.26 中给出这些排放。

公式 3.26

基于大气测量数据的方法 3 CH₄ 排放计算

$$CH_4 \text{ 排放}_s = \int_t [(C_{\text{总 VOCs}} \cdot CH_4 \text{ 比例} - CH_4 \text{ 背景级别}) \cdot WS \cdot PA]$$

其中：

CH₄ 排放 = 工厂 CH₄ 总排放量，单位为 μg/s

C_{总量 VOC} = 工厂中 VOC 浓度，单位为 μg/m³

CH₄ 比例 = CH₄ 的 VOC 总浓度比例，比例形式

CH₄ 背景级别 = 背景位置处 CH₄ 的环境浓度，单位为 μg/m³

WS = 工厂中的风速，单位为 m/s

PA = 热柱面积，单位为 m²

注：∫_t 意味着长期内此数量应相加求和。

注意，方法 3 不会指导清单编制者实施大气测量或其它特定类型的直接测量，用以估算特定地点的 CH₄ 排放。工厂特定泄漏探测数据和工厂特定烟囱及通风管道排放数据，预期将比大气测量数据更易获得。然而，如果大气测量数据可获，则此数据可用于开发 CH₄ 排放的方法 3 估算，或用于验证其它估算。比起泄漏探测数据及烟囱和通风管道排放数据，大气测量数据可能提供更准确的过程 CH₄ 排放估算。工厂将会使用 i) 公式 3.26 或 ii) 公式 3.27、3.28 和 3.29 来估算 CH₄ 排放。假定，过程泄放排放通过离散方式或连续方式进行监控。计算方法会因数据类型而异，因此，对于过程泄放排放计算不提供单独的公式。

石化生产过程中，CH₄ 的总合排放基于工厂特定泄漏探测数据和工厂特定烟囱和通风管道排放数据，可使用公式 3.27 计算。

公式 3.27

方法 3 CH₄ 排放计算公式

$$ECH_{4,i} = E_{\text{燃烧},i} + E_{\text{过程泄放},i} + E_{\text{火炬},i}$$

其中：

ECH_{4,i} = 石化产品 *i* 生产中 CH₄ 总排放量，单位为 kg

E_{燃烧,i} = 燃料或过程副产品经燃烧为石化产品 *i* 的生产过程提供热量或热能时的 CH₄ 排放，单位为 kg

E_{过程泄放,i} = 石化产品 *i* 生产期间从过程泄放中的 CH₄ 排放量，单位为 kg

E_{喷焰燃烧,i} = 石化产品 *i* 的生产期间从喷焰燃烧的废气中的 CH₄ 排放量，单位为 kg

E_{燃烧} 和 E_{喷焰燃烧} 如公式 3.28 和公式 3.29 所示，其中，应使用工厂具体数据或国家净发热值数据。

公式 3.28

燃料燃烧方法 3 CH₄ 排放计算

$$E_{\text{燃烧},i} = \sum_k (FA_{i,k} \cdot NCV_k \cdot EF_k)$$

其中：

FA_{i,k} = 石化产品 *i* 生产中燃料 *k* 的消耗量，单位为吨

NCV_k = 燃料 *k* 的净发热值，TJ/吨

(注：第 2 卷第 1 章表 1.2 中，净发热值用 TJ/kg 表示)

EF_k = 燃料 *k* 的 CH₄ 排放因子，kg/TJ

公式 3.29
火炬气方法 3 CH₄ 排放计算

$$E_{\text{火炬},i} = \sum_k (FG_{i,k} \cdot NCV_k \cdot EF_k)$$

其中：

$FG_{i,k}$ = 石化产品 i 生产期间火炬气 k 的量，单位为吨

NCV_k = 火炬气 k 的净发热值，TJ/吨

(注：第 2 卷第 1 章表 1.2 中，净发热值用 TJ/kg 表示)

EF_k = 火炬气 k 的 CH₄ 排放因子，kg/TJ

3.9.2.2 选择排放因子

本节纳入了对方法 1 排放因子选择的讨论。方法 2 基于质量平衡原则，方法 3 基于工厂特定数据；因此，没有缺省排放因子适用于方法 2 和方法 3。

表 3.11
石化生产方法 1 缺省原料和过程

石化过程	缺省原料	缺省过程
甲醇	天然气	不含初级重整装置的常规蒸汽重整
乙烯	北美、南美、澳大利亚——乙烷 其它洲——石油精	蒸汽裂解 蒸汽裂解
二氯乙烷 / 氯乙烯单体	乙烯	VCM 集成生产工厂的 EDC 生产平衡过程
环氧乙烷	乙烯	催化氧化、空气过程，含热处理
丙烯腈	丙烯	直接氨氧化过程，次级产品燃烧用于能源回收或喷焰燃烧
碳黑	碳黑原料和天然气	炉黑过程，含热处理

方法 1

石化产品中 CO₂ 排放和 CH₄ 排放的方法 1 估算因子如下。CO₂ 排放的方法 1 估算因子不包括作为 CO、CH₄ 或 NMVOC 散发的碳。为石化过程中 CH₄ 排放提供了单独的方法 1 排放因子。没有为一氧化碳和 NMVOC 排放提供方法 1 排放因子。

如果没有活动数据来识别生产石化产品所用的原料或过程，则方法 1 允许选择‘缺省’原料和‘缺省’过程。表 3.11 为每个石化生产过程提供了缺省原料和缺省过程。如果某国家没有与生产石化产品的特定过程和原料相关的活动数据，则在表 3.11 中确定的石化产品、缺省过程和缺省原料，以及本节中后续各表内确定的相关方法 1 排放因子，用于估算石化生产过程中 CO₂ 排放。如果有特定国家因子可用，则特定国家排放因子可代替缺省排放因子。

甲醇

二氧化碳排放

蒸汽重整和部分氧化过程中，生产甲醇时 CO₂ 排放的估算方式是，将缺省过程原料排放因子或表 3.12 中具体原料以及具体排放因子应用到甲醇生产、过程配置以及过程原料的活动数据。缺省排放因子基于特定工厂 CO₂ 排放数据的平均值，由四家甲醇工厂报告，这些工厂采用不含初级重整装置的常规蒸汽重整过程以及天然气原料。新西兰、智利、加拿大以及荷兰的常规过程甲醇工厂，报告了开发缺省 CO₂ 排放因子中所用的排放数据。表中的排放因子，包括过程原料引起的 CO₂ 排放以及蒸汽重整过程内原料燃烧

引起的 CO₂ 排放。对表 3.12 所示的各甲醇生产过程配置及原料，表 3.13 总结了原料消耗总量，单位为 GJ/吨生产的甲醇。

常规重整过程可能包括单个重整装置，或同时包括初级重整装置及次级重整装置。排放因子依据重整装置数量而有所区分。Lurgi 是甲醇过程技术的一个提供商，已经发布了若干常规重整过程技术的排放因子，参见表 3.12。Mega Methanol 工厂的产能，即每天的甲醇产量，通常大于 5000 吨。只有特定过程技术已知，才可以采用 Lurgi 常规过程技术的排放因子。否则，应采用不含初级重整装置的常规蒸汽重整的排放因子，或采用含初级重整装置的常规蒸汽重整的排放因子。

甲醇生产的常规蒸汽重整过程可以与氨气生产过程整合。只有特定过程技术已知，才采用合并的甲醇和氨气生产排放因子。

表 3.12 甲醇生产 CO ₂ 排放因子																		
过程配置	原料	吨 CO ₂ /吨生产的甲醇																
		天然气	天然气+ CO ₂	油	煤	褐煤												
不含初级重整装置的常规蒸汽重整 (a) (缺省过程和天然气缺省原料)		0.67																
含初级重整装置的常规蒸汽重整 (b)		0.497																
常规蒸汽重整, Lurgi 常规过程 (c1)		0.385	0.267															
常规蒸汽重整, Lurgi 低压过程 (c2)		0.267																
组合蒸汽重整, Lurgi 组合过程 (c3)		0.396																
常规蒸汽重整, Lurgi Mega 甲醇 过程 (c4)		0.310																
部分氧化过程 (d)				1.376	5.285	5.020												
综合氨气生产的常规蒸汽重整		1.02																
天然气 + CO ₂ 原料过程基于每吨甲醇 0.2-0.3 吨 CO ₂ 原料 根据以下原料碳含量和发热值，此表中的排放因子由表 3.13 中原料消耗量值计算。 <table border="0" style="width: 100%; margin-top: 10px;"> <tr> <td style="padding-right: 20px;">天然气:</td> <td style="padding-right: 20px;">56 kg CO₂/GJ</td> <td>48.0 GJ/吨</td> </tr> <tr> <td>油:</td> <td>74 kg CO₂/GJ</td> <td>42.7 GJ/吨</td> </tr> <tr> <td>煤:</td> <td>93 kg CO₂/GJ</td> <td>27.3 GJ/吨</td> </tr> <tr> <td>褐煤:</td> <td>111kg CO₂/GJ</td> <td></td> </tr> </table> 此表的不确定性值已纳入表 3.27							天然气:	56 kg CO ₂ /GJ	48.0 GJ/吨	油:	74 kg CO ₂ /GJ	42.7 GJ/吨	煤:	93 kg CO ₂ /GJ	27.3 GJ/吨	褐煤:	111kg CO ₂ /GJ	
天然气:	56 kg CO ₂ /GJ	48.0 GJ/吨																
油:	74 kg CO ₂ /GJ	42.7 GJ/吨																
煤:	93 kg CO ₂ /GJ	27.3 GJ/吨																
褐煤:	111kg CO ₂ /GJ																	
来源: (a) Struiker, A 和 Blok, K, 1995; Methanex, 2003; (b) Hinderink, 1996; (c1 - c4) Lurgi, 2004a; Lurgi, 2004b; Lurgi, 2004c; (d) FgH-ISI, 1999																		

表 3.13
甲醇生产原料消耗因子

过程配置	原料	GJ 原料输入/吨生产的甲醇				
		天然气	天然气+ CO ₂	油	煤	褐煤
不含初级重整装置的常规蒸汽重整 (a) (缺省过程和天然气缺省原料)		36.5				
含初级重整装置的常规蒸汽重整 (b)		33.4	29.3			
常规蒸汽重整, Lurgi 常规过程 (c1)		31.4				
常规蒸汽重整, Lurgi 低压过程 (c2)		29.3				
组合蒸汽重整, Lurgi 组合过程 (c3)		31.6				
常规蒸汽重整, Lurgi Mega 甲醇过程 (c4)		30.1				
部分氧化过程 (d)				37.15	71.6	57.6
天然气 + CO ₂ 原料过程基于每吨甲醇 0.2-0.3 吨 CO ₂ 原料						
来源: (a) Struker, A 和 Blok, K, 1995; Methanex, 2003; (b) Hinderink, 1996; (c1 - c4) Lurgi, 2004a; Lurgi, 2004b; Lurgi, 2004c; (d) FgH-ISI, 1999 此表的不确定性值已纳入表 3.27						

甲烷排放

1996 年气候变化行动计划 (Methanex, 1996) 内, Methanex 报告了两家加拿大甲醇生产工厂的 CH₄ 排放。Methanex 报告称, 甲醇生产中的 CH₄ 排放可能产生于重整装置、快装锅炉、甲醇蒸馏装置以及粗甲醇储罐。工厂 CH₄ 排放经计算, 约占工厂温室气体总排放的 0.5% 到 1.0%, 报告还称此排放值因工厂设备维护和运行控制的级别而异。两个报告年所报告的平均排放因子是, 生产每吨甲醇产生 2.3 kg CH₄ 排放。第二个 Methanex 甲醇生产工厂中的 CH₄ 排放报告为生产每吨甲醇产生 0.15kgCH₄。应采用这两个报告值的较高值 (即生产每吨甲醇产生 2.3 kg CH₄) 作为甲醇生产的缺省 CH₄ 排放因子。对于挪威甲醇工厂 Tjeldbergodden (SFT, 2003a), 其 CH₄ 排放经估算最低为每吨 0.1 kg。

乙烯

二氧化碳排放

乙烯生产蒸汽裂解中的 CO₂ 排放估算可使用表 3.14 中的特定原料排放因子以及蒸汽裂解过程中乙烯产量的活动数据。对蒸汽裂解过程中原料消耗量和补充能源消耗量中的 CO₂ 排放, 表 3.14 提供了单独的排放因子。但是, 原料消耗量以及补充能源消耗量的 CO₂ 排放均报告为工业过程排放, 按照上述讨论的报告约定。缺省排放因子推源于西欧实施的蒸汽裂解装置特定工厂数据。排放因子可以调节, 应用表 3.15 中的缺省地理调节因子, 计算各个国家和地区内蒸汽裂解装置能源效率的差异。注意: 如表 3.11 所示, 北美、南美和澳大利亚实施的蒸汽裂解装置缺省原料为乙烷, 而其它洲实施的蒸汽裂解缺省原料为石油精。

缺省排放因子不包括喷焰燃烧中的 CO₂ 排放。在挪威维护良好的工厂中, 喷焰燃烧中的排放量大约为总排放的 7%。采用石油精、丙烷和丁烷原料的蒸汽裂解过程假定为中性能源, 不需要使用补充燃料, 因此假定没有与这些原料的补充燃料消耗量有关的 CO₂ 排放。

表 3.14
蒸汽裂解乙烯生产方法 1 CO₂ 排放因子

原料	吨 CO ₂ /生产的乙烯吨数					
	石油精	汽油	乙烷	丙烷	丁烷	其它
乙烯（总过程和能源原料使用）	1.73	2.29	0.95	1.04	1.07	1.73
- 过程原料使用	1.73	2.17	0.76	1.04	1.07	1.73
- 补充燃料（能源原料）使用	0	0.12	0.19	0	0	0

来源：Neelis, M., Patel, M.和 de Feber, M., 2003, 表 2.3, 第 26 页。
 乙烯生产的缺省原料在表 3.11 中确定。排放因子不包括喷焰燃烧中所用的补充燃料。
 假定其它原料具有与石油精原料相同的生产量。
 此表的不确定性值已纳入表 3.27。

如果只有蒸汽裂解过程产生的乙烯量的活动数据，则可使用表 3.14 中的排放因子。蒸汽裂解是多产品过程，可产生乙烯、丙烯、丁二烯、芳烃和若干其它高值化学物质。内在的假定为，表 3.14 中缺省排放因子内的特定产品组合。表 3.14 中每个排放因子的缺省产品组合的确定，见第 3.9.2.3 节的乙烯蒸汽裂解原料产品矩阵。原料/产品矩阵确定了蒸汽裂解过程中乙烯、丙烯和其它碳氢化合物产品的缺省值，单位为每吨原料生产的产品千克数。为了确定表 3.14 中所示的蒸汽裂解排放因子，蒸汽裂解装置的 CO₂ 过程总排放仅除以乙烯的产出。换言之，在作为一个整体估算蒸汽裂解过程中的 CO₂ 总排放时，将乙烯作为基准。表 3.14 中的排放因子乘以乙烯产量，会得出乙烯生产以及丙烯、丁二烯、芳烃和蒸汽裂解过程中产生的所有其它化学物质生产中产生的 CO₂ 总排放。表 3.14 中的缺省排放因子提供了蒸汽裂解过程中的 CO₂ 总排放，不仅仅是蒸汽裂解过程中与乙烯产量关联的 CO₂ 排放。

表 3.15
缺省地理调整因子，用于方法 1 蒸汽裂解乙烯生产的 CO₂ 排放因子

地理区域	调整因子	注
西欧	100%	表 3.14 中的值基于西欧蒸汽裂解装置中的数据
东欧	110%	不包括俄罗斯
日本和韩国	90%	
亚洲、非洲、俄罗斯	130%	包括除日本和韩国之外的其它亚洲国家
北美、南美、澳大利亚	110%	

来源：调整因子基于 2002 年 5 月 Mr. Roger Matthews 与 Mr. Martin Patel 在个人交流之后提供的数据。
 此表的不确定性值已纳入表 3.27。

甲烷排放

乙烯生产中乙烷和石油精蒸汽裂解的 CH₄ 缺省逃逸排放因子的估算，依据 VOC 总排放因子以及 EMEP/CORINAIR 排放清单指南（EEA，2005）中的 VOC 种类说明数据。根据欧洲出版资料假定原料为石油精，蒸汽裂解中挥发性有机化合物总排放经估算为生产每吨乙烯产生 5 kg，根据美国出版资料假定原料为乙烷，对此经估算为生产每吨乙烯产生 10 kg VOC。从 VOC 总排放因子，按 VOC 种类说明、石油精蒸汽裂解中的 CH₄ 总排放估算为生产每吨乙烯产生 3 kg，主要来自泄漏损耗；按 VOC 种类说明、乙烷裂解中 CH₄ 总排放估算为是石油精裂解的 2 倍（生产每吨乙烯产生 6 kg）；但是这些因子有不确定性，因为对石油精原料的每吨乙烯 5 kg VOC 的 VOC 总排放因子以及对乙烷原料每吨乙烯的 10 kg VOC 均基于单一的出版资料。除乙烷和石油精外，其它原料蒸汽裂解中的 CH₄ 排放已经假定为等同于从石油精蒸汽裂解的 EMEP/CORINAIR 数据中的估算值。

在报告乙烯生产中的 CH₄ 排放因子方面，出版的数据有很大差异。欧洲塑料制造商协会（APME）欧洲塑料工业的生态状况报告称，乙烯生产的 CH₄ 排放因子为生产每吨乙烯产生 2.9 kg CH₄，参见烯烃生产的 APME 生态状况（Boustead，2003a）。乙烯蒸汽裂解装置过程运算的 CH₄ 排放因子基于 15 个欧洲蒸汽裂解装置的生命周期分析数据。根据在挪威乙烯工厂的直接测量数据（SFT 2003b），生产每吨乙烯所产生的排放估算最低为 0.14 kg CH₄，而根据澳大利亚 2003 年温室气体排放和汇估算方法（AGO，

2005) 报告的公司数据, 生产每吨乙烯最低产生 0.03 kg CH₄。其它欧洲和澳大利亚蒸汽裂解装置运营商报告, 特定工厂的 CH₄ 排放为表 3.16 (DSM, 2002; Qenos, 2003; Qenos, 2005) 报告值的大约百分 10。因此, 表 3.16 中的排放因子不应用于估算可获特定工厂数据的蒸汽裂解装置乙烯工厂中的 CH₄ 排放。这种情况下, 应使用特定工厂数据和方法 3。各个过程原料的缺省 CH₄ 排放因子如表 3.16 所示。注意, 乙烯生产的缺省原料已在表 3.11 中确定。

表 3.16 乙烯生产的缺省甲烷排放因子	
原料	kg CH ₄ /生产的乙烯吨数
乙烷	6
石油精	3
所有其它原料	3
来源: EEA, 2005 (EMEP/CORINAIR 排放清单指南) 此表的不确定性值已纳入表 3.27。	

二氯乙烷和氯乙烯单体

二氧化碳排放

对于包括直接氯化过程、氧氯化过程和平衡过程在内的二氯乙烷和氯乙烯单体生产过程, 其排放因子见表 3.17。CO₂ 排放因子的推导, 可通过大量有机化工中最佳可用技术的总合污染防治和控制 (IPPC) 参考文档 (欧洲 IPPC 局, 2003 年 2 月; 系指本节中的 IPPC LVOC BAT 文档) 中报告的欧洲工厂特定工厂 CO₂ 排放数据求平均值。注意, 如表 3.11 所示, 缺省过程是总合 VCM 生产工厂的 EDC 生产的平衡过程。每个过程的 CO₂ 总排放因子包括, 二氯乙烷过程泄放中的非燃烧 CO₂ 排放以及二氯乙烷工厂燃烧源中的燃烧 CO₂ 排放。工厂燃烧源排放因子包括过程废气以及过程废气热焚化炉中的辅助燃料的燃烧。燃烧相关的排放因子不包括喷焰燃烧中的排放。表 3.17 中燃烧相关的排放因子基于氧氯化过程工厂中的数据, 而还假定排放因子应用到直接氯化过程和平衡过程工厂。二氯乙烷和氯乙烯单体生产过程的原料消耗量因子见表 3.18。关于 EDC 生产的欧洲塑料生态状况 (Boustead, 2005) 表明, 基于 8 个欧洲工厂生产每吨 EDC 时乙烯使用量为 0.306 吨乙烯。

应注意, 表 3.17 中单位为生产每吨 EDC 的 CO₂ 吨数以及生产每吨 VCM 的 CO₂ 吨数不是附加的 CO₂ 排放因子。这两个 CO₂ 排放因子均可应用到总合 EDC/VCM 生产过程, 但是每吨 EDC 的 CO₂ 吨数因子基于 EDC 生产活动数据, 而每吨 VCM 的 CO₂ 吨数基于 VCM 生产活动数据。要应用的 CO₂ 排放因子将取决于, 是否可获 EDC 生产的活动数据或 VCM 生产的活动数据。类似地, 表 3.18 中单位为生产每吨 EDC 消耗的乙烯吨数以及生产每吨 VCM 消耗的乙烯吨数不是附加的原料消耗因子。要应用的原料消耗因子将取决于是否可获得 EDC 生产或 VCM 生产活动数据。

表 3.17
二氯乙烷/氯乙烯生产过程方法 1 CO₂ 排放因子

过程配置	吨 CO ₂ /生产的 EDC 吨数	吨 CO ₂ /生产的 VCM 吨数
直接氯化过程		
非燃烧过程泄放	可忽略的排放	可忽略的排放
燃烧排放	0.191	0.286
CO ₂ 排放总因子	0.191	0.286
氧氯化过程		
非燃烧过程泄放	0.0113	0.0166
燃烧排放	0.191	0.286
CO ₂ 排放总因子	0.202	0.302
平衡过程 [缺省过程]		
非燃烧过程泄放	0.0057	0.0083
燃烧排放	0.191	0.286
CO ₂ 排放总因子	0.196	0.294
若干欧洲生产工厂的 EDC 和 VCM 生产中的 CO ₂ 排放值见 IPPC LVOC BAT 文档（欧洲 IPPC 局，2003）的表 12.6 和表 12.7。求出这些值的平均值以计算 EDC 和 VCM 产量的 CO ₂ 排放因子。配备 CO ₂ 控制装置且报告过程中零 CO ₂ 排放的一个 EDC 工厂未纳入平均排放因子中。		
来源：欧洲 IPPC 局，2003（IPPC LVOC BAT 文档，表 12.6 和 12.7 数据）。 此表的不确定性值已纳入表 3.27。		

表 3.18
二氯乙烷/氯乙烯单体过程方法 1 CO₂ 原料消耗因子

过程配置	吨乙烯/生产的 EDC 吨数	吨乙烯/生产的 VCM 吨数
直接氯化过程	0.290	--
氧氯化过程	0.302	--
平衡过程	0.296	0.47
来源：欧洲 IPPC 局，2003（IPPC LVOC BAT 文档，第 12.3.1 节，第 299-300 页，第 12.1 节表 12.3，第 293 页）。 此表的不确定性值已纳入表 3.27。		

甲烷排放

EMEP/CORINAIR 二氯乙烷/氯乙烯单体平衡过程的“物种概况”表明，此过程中没有 CH₄ 排放，CH₄ 排放仅来自燃烧过程。EMEP/CORINAIR 物种概况报告称，泄漏损耗、存储和搬运中的 VOC 排放不包含 CH₄。EMEP/CORINAIR 还报告称，平衡过程中 VOC 总排放的 2% 来自燃烧源，CH₄ 在 VOC 总排放中占 1.2%。因此，可以假定二氯乙烷/氯乙烯单体生产中的非燃烧 CH₄ 排放是可忽略不计的。

二氯乙烷/氯乙烯单体生产过程中天然气补充燃料燃烧中的 CH₄ 排放的估算，可以依据天然气补充燃料燃烧的活动数据以及天然气燃烧的 CH₄ 排放因子。对于荷兰的总合二氯乙烷/氯乙烯单体生产工厂，总合二氯乙烷/氯乙烯单体生产的天然气消耗量经估算为生产每吨 VCM 产生 110.1 Nm³ 天然气，对于德国的总合二氯乙烷/氯乙烯单体生产工厂，经估算为生产每吨 VCM 产生 126.4 Nm³ 天然气。这两个值的平均值是每吨 VCM 产生 118.3 Nm³ 天然气。总合 EDC/VCM 生产过程的 CH₄ 排放因子，基于 5gCH₄/燃烧的 GJ 天然气的 CH₄ 排放因子以及这两家欧洲工厂的平均天然气消耗量。总合二氯乙烷/氯乙烯单体生产过程的缺省 CH₄ 排放因子见表 3.19。缺省排放因子不适用于单独的 EDC 生产工厂。如果天然气消耗量活动数据可获，则 5 g CH₄/GJ 的 CH₄ 排放因子可直接应用于活动数据，而不使用缺省排放因子。

表 3.19
二氯乙烷/氯乙烯过程方法 1 缺省 CH₄ 排放因子

过程配置	kg CH ₄ /生产的 VCM 产品吨数
总合 EDC/VCM 生产工厂	0.0226

来源：欧洲 IPPC 局，2003（IPPC LVOC BAT 文档，第 12.3.1 节，表 12.4，第 300 页）；EEA，2005（EMEP/CORINAIR 排放清单指南，有机化工中的过程（批量生产）1，2-二氯乙烷和氯乙烯（平衡过程），活动 040505，1996 年 2 月 15 日，第 3.4 节，第 B455-3 页和表 9.2，B455-5）。

环氧乙烷

二氧化碳排放

环氧乙烷生产中 CO₂ 的排放可使用排放因子估算，此排放因子基于环氧乙烷生产的活动数据以及过程配置和催化剂选择的特定数据。有关一系列催化剂选择性空气过程中的 CO₂ 排放以及氧气过程中的 CO₂ 排放，单独的 CO₂ 排放因子见表 3.20。空气过程和氧气过程的缺省排放因子的估算，依据 IPPC LVOC BAT 文档中提供的特定过程催化剂选择数据。为了从表 3.20 中选择排放因子，需要与过程类型和过程催化剂选择有关的特定数据。排放因子使用化学计量原理从催化剂选择中推导出，基于的假定为过程中的 CH₄ 和 NMVOC 排放是可忽略的，且乙烯原料中包含的所有碳均转化为环氧乙烷产品或 CO₂ 排放。表 3.20 中的排放因子不包括喷焰燃烧中的排放。

如表 3.20 所示，空气过程的缺省排放因子基于 70% 的缺省过程催化剂选择，而氧气过程的缺省排放因子基于 75% 的缺省催化剂选择。如果活动数据不可用于过程配置或催化剂选择，则缺省过程配置是空气过程，而缺省催化剂选择为 70%。如果活动数据可用于确定用作氧气过程的过程，但活动数据不可用于氧气过程的催化剂选择过程，则应使用表 3.20 中氧气过程 75% 的缺省催化剂选择的排放因子。

表 3.20
环氧乙烷生产原料消耗与 CO₂ 排放因子

过程配置	催化剂选择性	原料消耗量（吨乙烯/吨环氧乙烷）	排放因子（吨 CO ₂ /吨环氧乙烷）
空气过程 [缺省过程]	缺省值 (70)	0.90	0.863
	75	0.85	0.663
	80	0.80	0.5
氧气过程	缺省值 (75)	0.85	0.663
	80	0.80	0.5
	85	0.75	0.35

来源：欧洲 IPPC 局，2003（IPPC LVOC BAT 文档，第 9.2.1 节，第 224 页，第 9.3.1.1 节，第 231 页，图 9.6）

甲烷排放

IPPC LVOC BAT 环氧乙烷生产的文档报告了环氧乙烷过程泄放、环氧乙烷提纯过程废气蒸汽和逃逸排放源的 CH₄ 排放因子（单位为生产每吨环氧乙烷所产生的甲烷千克数）。CH₄ 排放因子报告在关于欧洲环氧乙烷工厂处理前后二氧化碳迁移泄放的 IPPC LVOC BAT 文档中。还报告了荷兰的两个环氧乙烷工厂 CH₄ 排放。通过求出这些数据的平均值，得出环氧乙烷生产的 CH₄ 排放因子。通过将表 3.21 中的这些排放因子应用到环氧乙烷生产中的活动数据，可以估算 CH₄ 的排放。假定环氧乙烷生产的缺省 CH₄ 排放因子没有热处理过程。

表 3.21
环氧乙烷生产方法 1 CH₄ 排放因子

过程配置	kg CH ₄ /生产的环氧乙烷吨数
无热处理 [缺省因子]	1.79
热处理	0.79

来源：欧洲 IPPC 局，2003（IPPC LVOC BAT 文档，表 9.6，第 233 页；表 9.8，第 236 页；表 9.9，第 236 页）。

丙烯腈

二氧化碳排放

丙烯腈生产过程中通过丙烯的直接氨氧化产生的过程泄放 CO₂ 排放的计算，可使用表 3.22 中提供的排放因子的丙烯腈生产活动数据：

表 3.22
丙烯腈生产 CO₂ 排放因子

过程配置	吨 CO ₂ /生产的丙烯腈吨数
丙烯的直接氨氧化	
燃烧用于能源回收/喷焰燃烧的次级产品（缺省）	1.00
燃烧用于能源回收/喷焰燃烧的乙腈	0.83
回收为产品的乙腈和氰化氢	0.79

来源：欧洲 IPPC 局，2003（IPPC LVOC BAT 文档，第 11.3.1.1 节，表 11.2，第 274 页和第 11.3.1.2 节，第 275 页）。

表 3.22 中的排放因子基于平均（缺省）丙烯原料消耗因子（生产每吨丙烯腈产生 1.09 吨丙烯原料），对应于大约 70% 的初级产品产量因子。缺省 CO₂ 排放因子基于丙烯原料到次级产品乙腈的变换（生产每吨丙烯腈产生 18.5 千克）以及丙烯到次级产品氰化氢的变换（生产每吨丙烯腈产生 105 千克），且基于 IPPC LVOC BAT 文档（欧洲 IPPC 局，2003）中报告的特定过程丙烯腈产量数据以及特定过程原料消耗量数据。但是注意可以配置和操作丙烯腈生产过程以生产更多或更少的次级产品。缺省 CO₂ 排放因子基于的假定为，丙烯腈生产过程的次级产品（乙腈和氰化氢）以及主要吸收器泄放气体中的碳氢化合物产品经燃烧用于能源回收或喷焰燃烧生产 CO₂ 且不作为产品回收，或不经燃烧处理散发到大气中。对于过程废气能源回收或喷焰燃烧系统，CO₂ 排放因子不包括辅助燃料（例如天然气）的任何燃烧中的 CO₂ 排放。

如果没有次级产品是否回收出售的有关活动数据，则缺省假定为次级产品经燃烧用于能源回收或喷焰燃烧产生 CO₂ 且缺省初级产品过程产量因子为 70%。

对于次级产品（乙腈和氰化氢）是否回收出售且不经喷焰燃烧产生 CO₂ 或燃烧用于能源回收的过程，初级产品和次级产品的总合过程产量因子为 85%。

如果没有丙烯原料消耗量的活动数据，则通过应用缺省原料消耗量因子（生产每吨丙烯腈消耗 1.09 吨丙烯原料），可以从丙烯腈生产活动数据中估算丙烯原料消耗量。

甲烷排放

丙烯腈生命周期分析数据汇总报告了丙烯腈产量的 CH₄ 排放因子（生产每吨丙烯腈产生 0.18kg CH₄），参照欧洲塑料制造商协会（APME）生命周期分析报告（Boustead, 1999）。丙烯腈过程操作的 CH₄ 排放因子基于 1990 到 1996 年收集的德国、意大利和英国等欧洲丙烯腈工厂的生命周期分析数据。通过将此缺省排放因子应用到丙烯腈生产数据，可以估算丙烯腈生产中的 CH₄ 排放。

碳黑

二氧化碳排放

通过将过程和特定原料排放因子应用于碳黑生产活动数据，可以估算碳黑生产中 CO₂ 的排放。对于炉黑过程、热黑过程和乙炔黑过程及其关联的原料，单独的排放因子在表 3.23 中提供，且为初级原料和次级原料提供了单独的排放因子。排放因子基于的假定为过程排放经过热处理过程。

一系列初级和次级碳黑原料值已列入下列的表 4.11：关于大量无机化工（LVIC）固体和其它工业（欧洲 IPPC 局，2005 年 6 月；在本章中指的是 IPPC LVIC BAT 草案）中最佳可用技术的总污染防治和控制（IPPC）参考文档草案。表 3.23 中 CO₂ 排放因子基于一系列值的平均值。初级和次级原料消耗量转换为碳黑原料碳含量平均值的碳消耗量。CO₂ 排放因子的计算依据过程的碳输入（初级和次级原料）以及过程中的碳输出（碳黑），使用碳黑碳含量的平均值。

过程配置	吨 CO ₂ /生产的碳黑吨数		
	初级原料	次级原料	原料总量
炉黑过程（缺省过程）	1.96	0.66	2.62
热裂炭黑法	4.59	0.66	5.25
乙炔炭黑过程	0.12	0.66	0.78

来源：欧洲 IPPC 局，2005（IPPC LVOC BAT 草案，表 4.11 数据）

甲烷排放

表 3.24 提供了碳黑生产过程的 CH₄ 排放。碳黑的 IPPC LVIC BAT 文档草案报告了碳黑生产过程中未燃烧尾气的 CH₄ 含量以及碳黑生产过程中产生尾气的估算速率。根据生产每吨碳黑产生 10 000 Nm³ 尾气以及将报告的 CH₄ 浓度平均值乘以 0.425% 除以容积，未受控制的 CH₄ 排放因子为生产每吨碳黑产生 28.7 kg CH₄。对于一氧化碳，碳黑过程喷焰燃烧系统的燃烧喷焰效率在 IPPC LVIC BAT 草案中报告为 99.8%，并假定 CH₄ 具有相同的效率。采用燃烧控制之后碳黑生产的 CH₄ 排放因子是生产每吨碳黑产生 0.06 kg CH₄。根据公司数据，每吨碳黑产生 0.11 kg CH₄ 的总合 CH₄ 排放因子，以澳大利亚 2003 年温室气体排放和汇估算方法（AGO，2005）进行报告。根据使用 BAT（Thermische Nachverbrennung als Stand der Technik）废气燃烧之后的测量数据，德国三家碳黑生产工厂报告称，普通的 CH₄ 排放因子为生产每吨碳黑产生 0.03 kg CH₄。

过程配置	千克 CH ₄ /生产的碳黑吨数 (碳黑过程尾气)
无热处理	28.7
热处理 [缺省过程]	0.06

来源：欧洲 IPPC 局，2005（IPPC LVOC BAT 草案，表 4.8，第 209 页；表 4.10，第 213 页，第 4.3.2.3 节，第 210 页）。

方法 2

方法 2 基于质量平衡计算，因此没有与此方法关联的排放因子。

方法 3

对于方法 3，特定工厂的 CO₂ 排放可使用公式 3.20-公式 3.22 估算，特定工厂的 CH₄ 排放可使用公式 3.26 或公式 3.27-公式 3.29 估算。当测量不连续时，排放因子可能与测量之间排放估算的年产量有关。

3.9.2.3 选择活动数据

获得活动数据的数据集一般方面在第1卷第2章中讨论。当使用方法3时，特定工厂活动数据应从生产工厂中获得。到蒸汽裂解装置和喷焰燃烧系统的总流程直接测量以及气体碳含量的分析，为排放估算提供最准确的基础。

特定工厂能源平衡和/或碳平衡还可用于推导特定工厂排放因子。各种跨工厂边界的能源以及碳流程使其成为密集型数据，但仍然非资源密集型方法。当原料消耗数据难以获得时，销售数据和国家统计局资料可能提供化学物质的近似产量。

甲醇

可从特定原料（例如天然气）消耗量和产品（甲醇）产量活动数据以及碳质量平衡计算中，计算甲醇生产的CO₂排放。

乙烯

可从特定原料消耗量和产品产量活动数据以及碳质量平衡计算中，计算乙烯生产的CO₂排放。为了创建乙烯生产过程的完整质量平衡并实施乙烯生产的方法2，所有原料以及过程的所有初级产品和次级产品的产量及处置量应使用活动数据来确定。如果活动数据可用于乙烯生产，但不可用于蒸汽裂解过程中次级产品的生产时，可使用表3.25和公式3.18中的缺省因子估算次级产品的产量。但是使用这些缺省因子的准确性低于使用所有初级产品和次级产品的特定活动数据，且会增加估算的不确定性，因为蒸汽裂解装置的性能可能会因具体现场条件而有所差异。例如，在德国操作的蒸汽裂解装置报告的现场具体数据表明，正常运行条件下碳氢化合物的损耗是每吨碳氢化合物原料产生8.5 kg（BASF，2006），而表3.25中显示的碳氢化合物的缺省值是每吨碳氢化合物原料产生5 kg。如果活动数据不可用于所有次级产品，则可采用方法1来代替方法2。

蒸汽裂解过程产生的次级产品可能回收且运输到石化工厂或石油提炼厂，以重用材料、作为原料在蒸汽裂解过程内回收、或燃烧用于能源回收。通常C₄₊次级产品经回收作为原料或恢复用于材料重用（BASF，2006）。能源回收时次级产品燃烧中CO₂排放分配的说明见本卷第1章中的框1.1。如果活动数据不可用于处置C₄₊次级产品，则缺省假定为C₄₊次级产品经回收和转移到其它过程以重用材料。如果数据不可用于通过蒸汽裂解过程处置CH₄产品，则缺省假定为CH₄在蒸汽裂解过程中经燃烧用于能源回收且从此过程中造成CO₂排放。

石化工业内使用的蒸汽裂解装置可能直接从相邻的石油提炼厂中获得乙烯生产过程的石化原料。根据原料和过程操作条件，蒸汽裂解装置还可能生成碳氢化合物副产品的“返流”，即返回到相邻提炼厂用于进一步处理。石油提炼厂来自加工返流的任何CO₂排放未包括在蒸汽裂解装置乙烯生产过程的过程CO₂排放因子中，但是在过程的原料和碳流程分析中予以考虑。

表 3.25
乙烯蒸汽裂解原料-产品矩阵

产品	原料	kg 产品/吨原料					
		石油精	汽油	乙烷	丙烷	丁烷	其它
高值化学物质		645	569	842	638	635	645
乙烯		324	250	803	465	441	324
丙烯		168	144	16	125	151	168
丁二烯		50	50	23	48	44	50
芳烃		104	124	0	0	0	104
燃料级产品和返流		355	431	157	362	365	355
氢气		11	8	60	15	14	11
甲烷		139	114	61	267	204	139
回收裂解之后的乙烷和丙烷		0	0	0	0	0	0
其它 C4		62	40	6	12	33	62
C5/C6		40	21	26	63	108	40
C7+ 非芳烃		12	21	0	0	0	12
<430C		52	26	0	0	0	52
>430C		34	196	0	0	0	34
损耗		5	5	5	5	5	5
小计		1 000	1 000	1 000	1 000	1 000	1 000

来源：Neelis, M; Patel, M; de Feber, M; Copernicus Institute, 2003年4月, 表 2.2, 第 24 页

二氯乙烷和氯乙烯单体

可从特定原料（乙烯）消耗量和产品（二氯乙烷）产量活动数据以及碳质量平衡计算中，计算二氯乙烷和氯乙烯单体生产中的 CO₂ 排放。

环氧乙烷

可从特定原料（乙烯）消耗量和产品（环氧乙烷）产量活动数据以及碳质量平衡计算中，计算环氧乙烷生产的 CO₂ 排放。

丙烯腈

如果活动数据不可用于次级产品（乙腈和氰化氢）的生产，则表 3.26 和公式 3.19 中的缺省值可适用于初级产品产量的活动数据，以估算次级产品产量。

表 3.26
丙烯腈生产过程的次级产品生产因子

次要产品	kg 次级产品/生产的丙烯腈吨数
乙腈	18.5
氰化氢	105

注：本表中的次级产品产量基于丙烯原料中的丙烯腈产量。如果使用除丙烯之外的原料，则不采用本表中的因子。为了将方法 2 质量平衡方法应用到丙烯之外其它原料的丙烯腈生产中，需要开发特定过程因子。

来源：欧洲 IPPC 局，2005（IPPC LVOC BAT 文档，第 11.3.4 节，第 27 页）。

如果没有与乙腈产品回收有关的可用活动数据，则可以假定不作为产品回收且经燃烧为 CO₂ 用于能源回收。如果没有与乙腈主要吸收器泄放气体热处理的有关活动数据，则可以假定泄放气体经热处理且燃烧为 CO₂，且不会在不受控制的情形下泄放到大气中。

碳黑

可从特定初级原料（例如碳黑原料）和次级原料（例如天然气）消耗量和产品（碳黑）产量活动数据以及碳质量平衡计算中，计算碳黑生产中的 CO₂ 排放。

3.9.2.4 完整性

估算石化和碳黑过程中的 CO₂ 排放时，在 IPPU 或能源部门存在重复计算或漏算的风险。石化和碳黑工厂生产甲醇和非甲醇碳氢化合物副产品，这些副产品可经燃烧用于能源回收，这种能源回收可报告在国家能源统计资料的“其它”燃料或某些类似类别下。如果“其它”燃料燃烧中的 CO₂ 排放包括经燃烧用于能源回收的工业过程烟气，则为了避免 CO₂ 排放的重复计算，需要对能源统计资料或石化生产的 CO₂ 排放计算做某些调整。

甲醇

可能从生物（可再生）源中生产甲醇。这些生物甲醇可能纳入甲醇国家生产统计资料中，这样会造成化石燃料（例如天然气）衍生甲醇时 CO₂ 排放的高估，除非对甲醇生产活动数据进行某些调整。

乙烯

可以从石化提炼过程或蒸汽裂解装置之外其它石化过程中生产乙烯。这些乙烯可能纳入乙烯国家生产统计资料中，这样会造成蒸汽裂解装置衍生乙烯时 CO₂ 排放的高估，除非对乙烯生产活动数据进行某些调整。

二氯乙烷和氯乙烯单体

二氯乙烷是用于制造氯乙烯单体和其它产品的中间石化产品。二氯乙烷生产的活动数据可能不完整，因为二氯乙烷可能会在总合 EDC/VCM 工厂中直接转化为氯乙烯单体。因此在工业覆盖率方面，氯乙烯单体生产活动数据比二氯乙烷生产活动数据更加完整。但是当氯乙烯单体活动数据用作二氯乙烷的替代物时，还可能出现与完整性有关的问题，因为不是所有二氯乙烷均用于制造氯乙烯单体。因此若要计算其它产品生产中二氯乙烷的使用率，需要对氯乙烯单体的活动数据进行调整。根据北美和欧洲数据，对于氯乙烯单体之外的产品，二氯乙烷使用率将为二氯乙烷总产量的 5%。

环氧乙烷

环氧乙烷是用于制造乙二醇和其它产品的中间石化产品。环氧乙烷生产的活动数据可能不完整，因为环氧乙烷可能会在总合 EO/EG 工厂中直接转化乙二醇。环氧乙烷还可能在总合工厂中转化为其它产品（例如胺、醚等）。因为全世界环氧乙烷产量中只有 70% 用于制造乙二醇，所以在工业覆盖率方面，环氧乙烷化学产品的生产活动数据可能没有环氧乙烷生产活动数据完整。

碳黑

可能存在少量生物（可再生）源中的碳黑生产，例如动物黑和骨黑。这些生物碳黑可能纳入碳黑国家生产统计资料，这会导致在化石燃料衍生碳黑中高估 CO₂ 排放。还可能是石油提炼厂物理边界内的碳黑生产，而不是化工内的碳黑生产。预期石油提炼厂内生产的碳黑要纳入国家碳黑生产统计资料，因此石油提炼厂内碳黑生产中的 CO₂ 排放应作为工业过程排放与化工内碳黑生产中的其它排放一起报告。

对于碳黑原料消耗活动数据，可能在完整性方面有所缺漏。源自煤焦油产品、废气或乙腈中碳黑原料的活动数据可能不可获得，如果使用更高的碳平衡方法，这会导致 CO₂ 排放的低估。

3.9.2.5 建立一致的时间序列

石化和碳黑生产中的排放应使用所有年代相同方法和类型的活动数据进行估算。使用特定工厂测量活动数据从石化和碳黑生产中构建排放的时间序列会给出最准确的当前排放。但是有关喷焰燃烧和逃逸排放的活动数据对于前几年很可能不可用。如果没有出现技术升级，则根据与石化生产有关的最近测量数据计算特定工厂排放因子时可能会提供合理的结果。石化生产通常会合并到生产多个化学产品的工业联合体中，或与相邻的工业工厂交换能源和化学流程，碳黑可能在石油提炼厂内生产。当根据原料消耗量构建时间序列时应十分小心，确保活动数据包括时间序列中每年的相同的流程。另外使用最近工厂特定排放中开发的排放因子进行方法 1 类型的计算要根据方法 2 计算时，可能采用碳平衡计算。调查发现原料

选择中的变化以及一年和两年内生产的初级和次级化学产品的变化。排放估算中漏算的重建和重新计算应遵循第1卷第5章中的指南。

3.9.3 不确定性评估

本节讨论了适用于每个过程的每个排放因子和活动数据的不确定性评估。前面几节中表格内包括的排放因子和活动数据的不确定性范围在表 3.27 中汇总。

甲醇

在确定包括生产的甲醇数量、高层方法、每年消耗的天然气和其它原料量等活动数据方面，甲醇生产的排放估算中有很多不确定性与难度有关。天然气和其它原料消耗量可能每年仅在国家能源统计资料中报告，不会超过甲醇生产的消耗量。如果天然气消耗量活动数据不可用，则只有除高层碳平衡方法之外的排放因子方法适用。如果活动数据不可用于甲醇生产其它原料的消耗量，则可以假定国家甲醇所有产量均来自天然气原料。但是此假定会引入某些不确定性。而且，在生产过程中将 CO_2 用作补充原料的甲醇生产工厂中，活动数据可能不可用于 CO_2 原料年消耗量。

乙烯

在确定蒸汽裂解过程（例如乙烷、石油精）中原料的类型、数量和特征以及过程（例如乙烯、丙烯）中产品的类型、数量和特征时，乙烯生产活动数据中的不确定性与难度有关。原料消耗量和产品产量仅可以每年在国家能源统计资料 and 商品统计资料中报告，不会超过乙烯生产的原料消耗量或蒸汽裂解乙烯生产过程中的产品产量。对乙烯生产实施碳平衡计算的能力取决于特定原料消耗量的活动数据以及蒸汽裂解过程特定产品的产量。如果只有国家每年乙烯产量的活动数据可用，则可以假定国家/地区的缺省原料并应用缺省排放因子。这种情况下，通过使用缺省原料的缺省产量表，将实施原料分析。但是，考虑到原料之间排放因子和产量因子中的大范围变异，特定原料消耗数据的不可用性会对排放计算和原料分析引入明显的不确定性。如果特定原料消耗活动数据可用，则可以对引起不确定性的每种原料实施单独的排放估算和原料分析。但是理想情况下，活动数据将可用于特定原料消耗量和特定产品产量，允许实施更高层次的碳平衡计算方法。

另一个不确定性来源与确定以下数据的难度有关：蒸汽裂解乙烯过程配置其他详情，包括石化工厂到[潜在相邻]石油提炼厂蒸汽裂解过程的产品返流以及副产品能源回收或喷焰燃烧的流程。提炼厂返流活动数据的不可获性将对原料分析引入不确定性。

二氯乙烷和氯乙烯单体

二氯乙烷的不确定性来源包括确定以下数据难度：环氧乙烷生产所用的特定过程以及生产过程中乙烯原料消耗量的活动数据。如果只有二氯乙烷的活动数据，则可以使用缺省[平衡]过程产品产量因子和过程的缺省排放因子，实施排放计算。但是，考虑到氯化过程、直接氧化过程和平衡过程的排放因子和产量因子中的变异，过程中特定乙烯原料消耗数据的不可获性会对排放计算引入大量不确定性。

环氧乙烷

环氧乙烷不确定性的主要来源是，难于确定环氧乙烷生产中乙烯原料消耗量的活动数据。如果没有乙烯消耗量活动数据，则只有除高层碳平衡方法之外的排放因子方法可适用。如果只有国家每年环氧乙烷产量的活动数据可用，则可以假定缺省产品产量并应用缺省排放因子。这种情况下，通过使用缺省产品产量因子，实施原料分析。但是，考虑到报告的产品产量因子和环氧乙烷过程的排放因子的范围，特定乙烯原料消耗数据的不可获性会对排放计算引入大量不确定性。

丙烯腈

丙烯腈的不确定性来源包括难于确定：丙烯腈生产的特定过程配置，生产过程中丙烯原料消耗量的活动数据，以及过程中丙烯腈和乙腈生产的活动数据。如果只有丙烯腈生产的活动数据，则可以使用缺省过程配置（假定没有乙腈回收）和过程的缺省排放因子，实施排放计算。但是，假定为乙腈不从过程中回收将在排放和原料计算中，则会引入大量不确定性，且可能导致排放高估和丙烯腈过程中原料流程的低估。关于丙烯腈生产过程中丙烯腈和乙腈的国家生产活动数据，将允许对回收乙腈中国家丙烯腈产量的百分比应用特定过程排放因子。但是理想情况下，丙烯消耗的活动数据以及丙烯腈生产过程中丙烯腈、乙腈和氰化氢生产的活动数据，将允许采用更高层的方法，这会减少不确定性。

碳黑

碳黑生产活动数据中的不确定性与确定以下数据的难度有关：初级和次级原料到碳黑过程的类型、数量和特征，以及碳黑生产所用的过程类型和过程中碳黑产品的特征。初级和次级原料消耗量和碳黑产量在国家能源统计资料 and 商品统计资料中可能仅按年度报告，每个碳黑生产过程中碳黑生产的原料消耗量没有分类。碳黑的大多数全世界产量是炉黑过程生产的，因此如果没有按过程分列的原料消耗活动数据，则可以假定所有碳黑产量来自炉黑过程，而没有引入大量不确定性。

另外如果有初级碳黑原料消耗的活动数据，则此数据可以按通用术语“碳黑原料”报告，而无须表明此原料是石油提炼厂内生产的基于石油的原料，还是冶金焦生产中产生的基于煤焦油的原料。还可能没有其它初级碳黑原料（例如乙腈）的活动数据。还可能有作为次级碳黑原料的天然气消耗量的特定活动数据，然而可能没有可用于碳黑生产的其它次级原料（例如焦炉煤气）的活动数据。特定初级和次级原料消耗量数据的不可获性会对原料分析增加不确定性。

对碳黑生产实施碳平衡计算的能力取决于，消耗量活动数据的可用性以及初级和次级原料的特征。如果只有国家每年碳黑产量的活动数据，则可以假定缺省原料特征和产品产量，且可能应用缺省排放因子。但是，考虑到原料特征和来源中的变化，特定原料消耗量和组成部分活动数据的不可获性会对排放和原料计算引入大量不确定性。如果特定原料消耗量和特征活动数据以及关联的碳黑产量活动数据可用，则可以使用更高层方法对每种原料和每个过程实施单独的碳平衡和原料分析，这会减小不确定性。

不确定性范围

表 3.27 提供了每个过程的方法 1 排放因子、方法 2 活动数据以及方法 3 活动数据的不确定性范围。对于每个因子或活动数据，准备不确定性估算中所用的数据来源或专家判断来源确定在此表中。通过评估可用数据的范围，可以实施专家判断引出。在许多情况下，仅有若干工厂的特定过程数据；相对较大的不确定性范围产生于相对少量可用数据，以及石化及碳黑工厂中过程配置和原料使用效率的预期变化。

方法	参考	因子	不确定性范围	来源
方法 3		所有物质的燃料燃烧与气体成分样本的直接测量	- 5% 到 + 5%	根据 2005 年 1 月国家工业讨论，第 3.9 节主要作者的专家判断。
方法 1	表 3.12	甲醇生产 CO ₂ 排放因子	-30% 到+30%	第 3.9 节主要作者的专家判断。
方法 1	表 3.13	甲醇生产原料消耗因子	-30% 到+30%	第 3.9 节主要作者的专家判断。
方法 1		甲醇生产的甲醇排放因子	-80% 到+30%	根据 Methanex 工厂数据，第 3.9 节主要作者的专家判断。
方法 1	表 3.14	乙烯生产 CO ₂ 排放因子	-30% 到+30%	IPPC LVOC BAT 文档，图 7.10
方法 1	表 3.15	乙烯生产中 CO ₂ 排放因子的地理调节因子	-10% 到+10%	第 3.9 节主要作者的专家判断。
方法 1	表 3.16	乙烯生产的甲烷排放因子	-10% 到+10%	第 3.9 节主要作者的专家判断。
方法 1	表 3.17	二氯乙烷/氯乙烯生产过程泄放 CO ₂ 排放因子	-20% 到+10%	IPPC LVOC BAT 文档、表 12.6 和表 12.7
方法 1	表 3.17	二氯乙烷/氯乙烯生产过程 CO ₂ 排放因子	-50% 到+20%	IPPC LVOC BAT 文档、表 12.6 和表 12.7
方法 1	表 3.18	二氯乙烷/氯乙烯单体过程原料消耗因子	-2% 到+2%	IPPC LVOC BAT 文档，第 12.3.1 节，第 300 页
方法 1	表 3.19	二氯乙烷/氯乙烯单体过程 CH ₄ 排放因子	-10% 到+10%	IPPC LVOC BAT 文档，第 12.3.1 节，表 12.4，第 300 页
方法 1	表 3.20	环氧乙烷生产原料消耗与 CO ₂ 排放因子	-10% 到+10%	Expert judgement by Lead Authors of Section 3.9.
方法 1	表 3.21	环氧乙烷生产 CH ₄ 排放因子	-60% 到+60%	IPPC LVOC BAT 文档，表 9.6，第 233 页；表 9.8，第 236 页；表 9.9，第 236 页
方法 1	表 3.22	丙烯腈生产 CO ₂ 排放因子	-60% 到+60%	IPPC LVOC BAT 文档，第 11.3.1.1 节，表 11.2，第 274 页

方法	参考	因子	不确定性范围	来源
方法 1		丙烯腈生产 CH ₄ 排放因子	-10% 到+10%	Boustead, 2003b (欧洲塑料工业方法 I 的生态轮廓。Boustead, 为 APME 准备的报告, 2003 年 7 月, 第 40 页)
方法 1	表 3.23	碳黑生产 CO ₂ 排放因子	-15% 到+15%	IPPC LVIC BAT 草案, 表 4.11, 第 214 页
方法 1	表 3.24	碳黑生产 CH ₄ 排放因子	-85% 到+85%	IPPC LVIC BAT 草案, 表 4.8, 第 209 页
方法 2	表 3.25	乙烯蒸汽裂解原料-产品矩阵	-10% 到+10%	第 3.9 节参加作者的专家判断
方法 2	表 3.26	丙烯腈生产过程的次级产品生产因子	-20% 到+20%	第 3.9 节主要作者的专家判断。

3.9.4 质量保证/质量控制（QA/QC）、报告和归档

3.9.4.1 质量保证/质量控制

排放因子和活动数据的质量保证/质量控制涉及改善质量或更好理解排放估算不确定性的方法。*优良作法*是实施质量控制，检查第1卷第6章中概述的方法1。如果使用方法2或方法3确定排放，则可以使用更加广泛的质量控制检查和质量保证程序。对于第1卷第4章确定的*关键类别*，鼓励清单编制者采用较高质量保证和质量控制方法。

方法1和方法2活动数据的评估

方法1和方法2均取决于石化和碳黑生产活动数据和/或原料消耗量活动数据的应用。预期这些活动数据每年差异不应大于 $\pm 10\%$ ，除非国家的总体经济产出出现显著变化、构建了新的石化生产能力或其它同类因素。如果每年活动数据的差异超过 $\pm 10\%$ ，则*优良作法*是评估和记录造成差异的特定国家条件。

方法1排放因子的评估

为石化和碳黑生产开发特定国家排放因子并采用方法1的清单编制者，应评估所估算的排放因子是否在本指南方法1提供的缺省排放因子和特定过程排放因子的范围之内。如果排放因子超出本指南中报告的因子范围，则必须调查其原因（例如，过程配置与本指南中报告的排放因子有所不同；原料是本指南中未考虑的唯一材料）。清单编制者还应确保，特定国家排放因子与过程化学分析中得出的值保持一致。例如，对于天然气的甲醇生产，生成的 CO_2 碳含量采用排放因子估算后应近似等于天然气原料碳含量和甲醇产品碳含量之间的差值。如果排放因子在估算的范围之外，则*优良作法*是评估和记录说明差异的特定工厂条件。另外*优良作法*是使用纳入本指南的方法1排放因子的清单编制者，实施质量控制检查，以评估排放因子的数据特征是否符合采用此排放因子的国家内石化和碳黑生产过程的特征。

方法 2 质量平衡计算的评估

方法 2 质量平衡方法的应用取决于过程流程的识别和特征。对于方法 2，不能识别所有含碳过程流程或这些过程流程的流速或碳含量错误特征，会导致估算的 CO₂ 排放与实际 CO₂ 排放有明显偏差。方法 2 质量平衡计算结果的质量通常较依赖于活动数据的质量，而不是方法 1 计算结果的质量，因为总体上需要将大量活动数据应用到方法 2，而不是方法 1。因此，*优良作法*是评估和记录应用到方法 2 的每个活动数据的质量以及应用方法 2 之前活动数据的完整性。如果数据质量或完整性被视为不足以应用方法 2，则应采用方法 1。

方法 3 特定工厂数据的评估

方法 3 基于特定工厂排放数据的应用。对于清单编制者，*优良作法*是对清单中使用的特定工厂排放估算进行审计。这涉及评估特定工厂数据是否能代表工厂排放，如果特定工厂的特定工厂数据应用到国家清单，则评估特定工厂数据是否能代表整个国家的石化和碳黑生产过程。特定工厂数据的审计将涉及以下评估：

- 特定工厂测量方法的文档记录；
- 特定工厂测量结果的文档记录；
- 排放估算方法和计算；
- 过程原料和产品
- 排放计算中采用的活动数据；
- 过程技术和配置的文档记录；
- 假定列表；

如果获得特定工厂数据的特定过程被视为不代表生产相同石化产品的国家内其它工厂（例如如果原料不同或过程配置不同），则特定工厂数据不得应用到总合清单，而是仅应用到特定工厂的活动数据。如果收集各工厂的排放量测量数据，清单编制者应确保该测量是按国家或国际认可的标准进行，且将质量控制方法应用到排放测量。工厂所用的质量控制程序应直接参考并纳入质量控制计划。如果测量做法同质量控制标准不一致，或如果测量程序和结果记录不充分，则清单编制者应重新考虑特定工厂数据的使用。

3.9.4.2 报告和归档

石化生产过程生成的烟气燃烧中的燃烧排放归入生产这些产品的 IPPU 部门源类别，作为工业过程排放报告。然而，如果 IPPU 部门源类别生成的任意部分烟气燃烧在不同 IPPU 部门源类别内，或燃烧在能源部门源类别内，则对应的排放作为燃料燃烧排放报告，而不作为工业过程排放报告。这意味着，如果在产生烟气的 IPPU 部门源类别内出现燃烧排放，则这些排放作为工业过程排放报告并归入 IPPU 部门源类别中。然而，如果烟气在过程外转移到 IPPU 部门中的另一个源类别或 IPPU 的某个源类别，则烟气的燃烧排放在此源类别内作为燃料燃烧排放报告。当计算烟气燃烧中的总排放时，转移到且在能源部门中报告的数量以及转移到且在不同 IPPU 部门源类别中报告的数量，应在 IPPU 部门源类别计算和能源部门源类别计算中明确量化。如果开发特定国家排放因子，则应按照排放因子如何开发以及如何在排放因子计算中应用提供相应的数据，包括根据排放因子和计算来报告生产过程配置。

甲醇

生产的甲醇量、甲醇生产中消耗的天然气原料量和甲醇生产中消耗的补充 CO₂ 原料量在获得时应予报告。如果使用缺省排放因子，则应在报告的文档中给予说明，如果不使用缺省过程配置，应报告甲醇生产过程配置。

乙烯

乙烯生产中消耗的每种原料量以及乙烯和作为产品生产及回收的每种其他初级产品量，在在获得时应予报告。如果使用缺省排放因子，则应在报告的文档中注明这点，如果不使用国家/地区的缺省过程配置和缺省原料，应报告乙烯生产过程配置和原料。

二氯乙烷

二氯乙烷生产中生产的二氯乙烷量和消耗的乙烯原料量，在可获得时应予报告。如果使用缺省排放因子，则应在报告的文档中给予说明，如果不使用缺省过程配置，应报告甲醇生产过程配置。

环氧乙烷

环氧乙烷生产中生产的环氧乙烷量和消耗的乙烯原料量，在可获得时应予报告。如果使用缺省排放因子，则应在报告的文档中给予说明，如果不使用缺省过程配置，应报告甲醇生产过程配置。

丙烯腈

丙烯腈生产中消耗的丙烯原料量以及作为产品生产和回收的丙烯腈、乙腈和氰化氢量将在可用时进行报告。如果使用缺省排放因子，则应在报告的文档中注意这点，且如果不使用缺省过程配置，应报告丙烯腈生产过程配置。

碳黑

碳黑生产中生产的碳黑量以及消耗的每种初级和次级原料量和特征（碳含量），在可获得时应予报告。如果使用缺省排放因子，则应在报告的文档中给予说明，如果不使用缺省过程配置，应报告甲醇生产过程配置。

附件 3.9A 原料产品流程图

图 3.11 甲醇生产原料-产品流程图

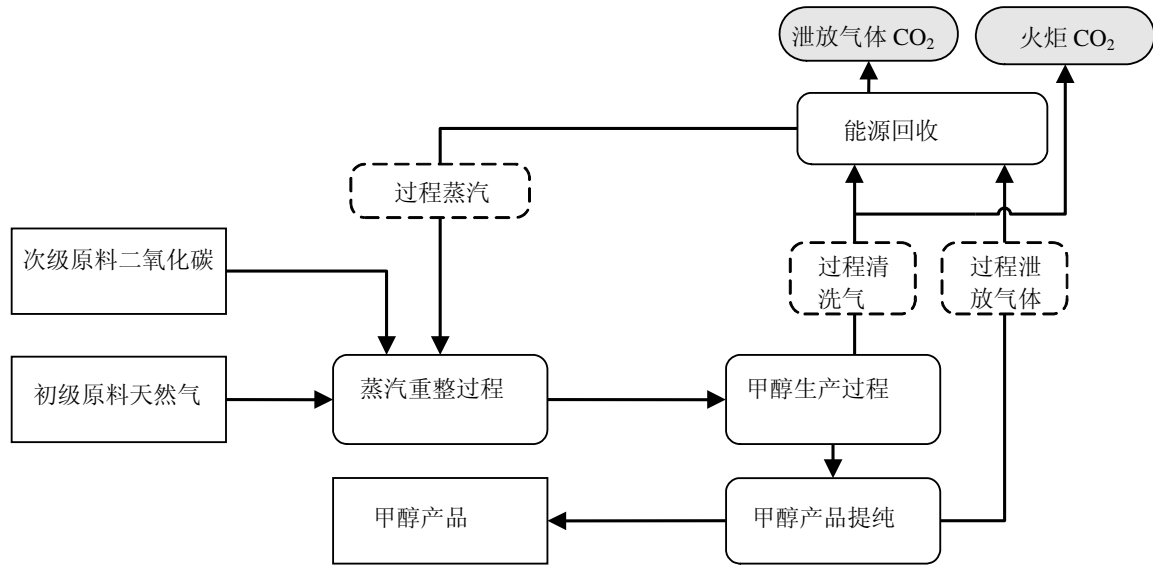


图 3.12 二氯乙烯生产原料-产品流程图

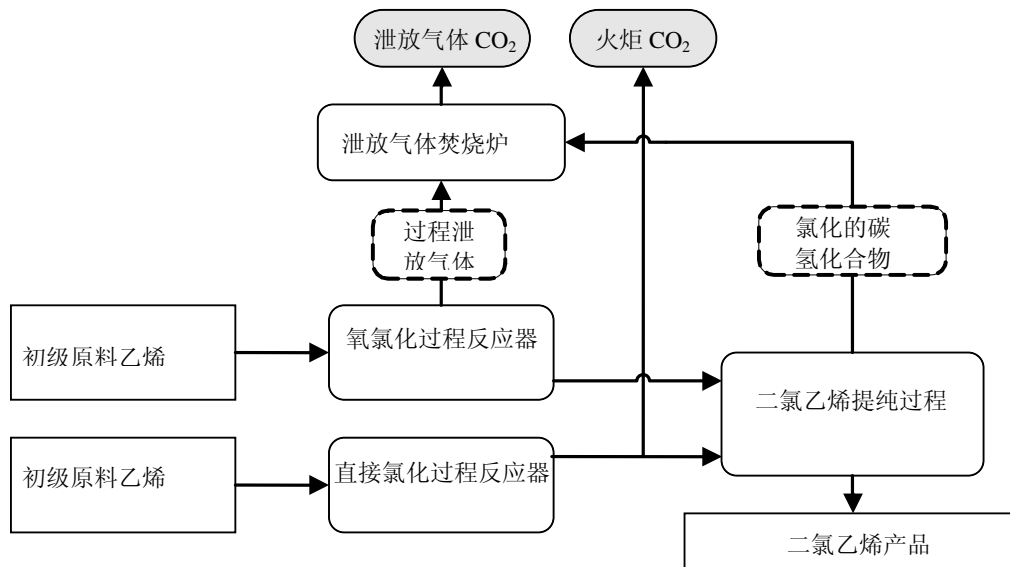


图 3.13 环氧乙烷生产原料-产品流程图

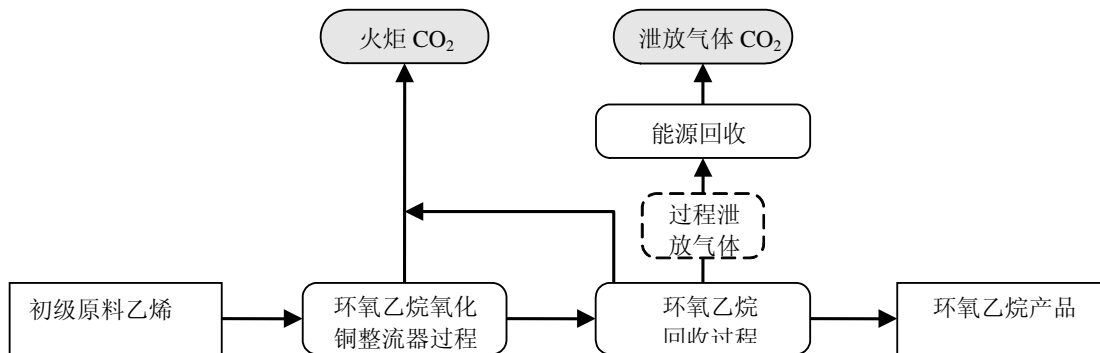


图 3.14 丙烯腈生产原料-产品流程图

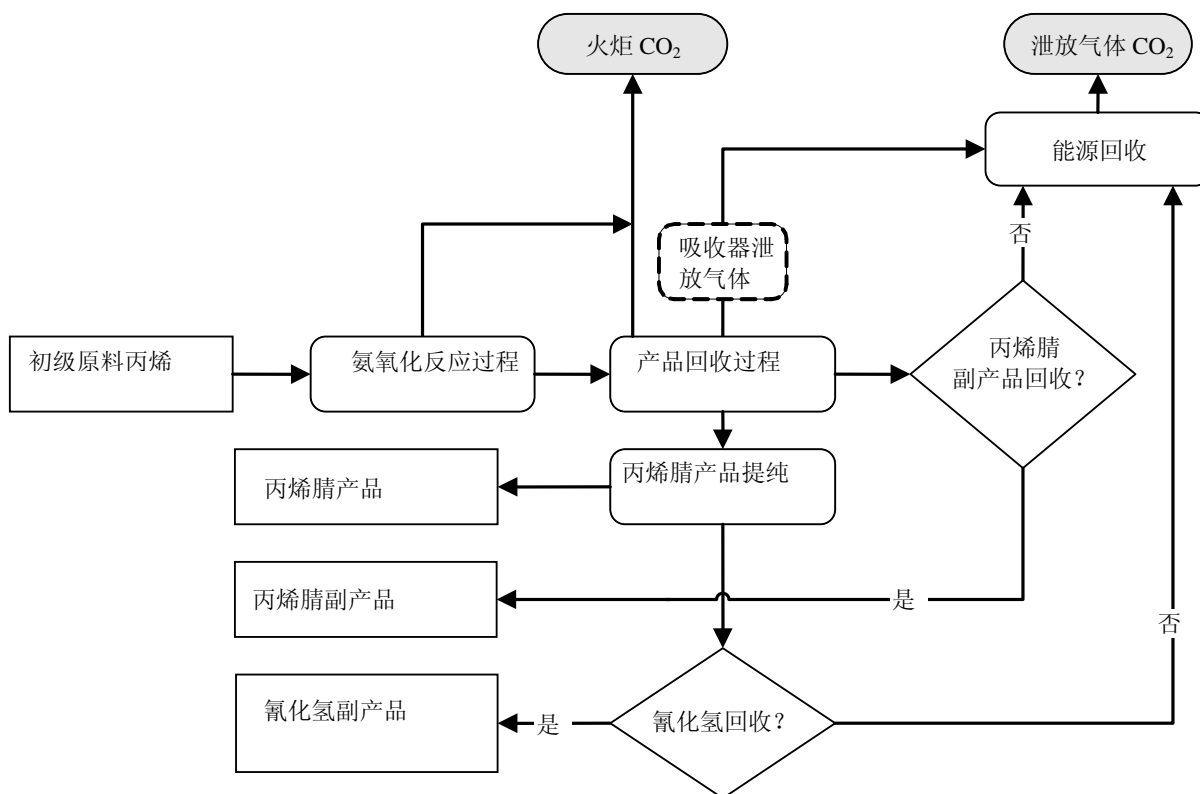
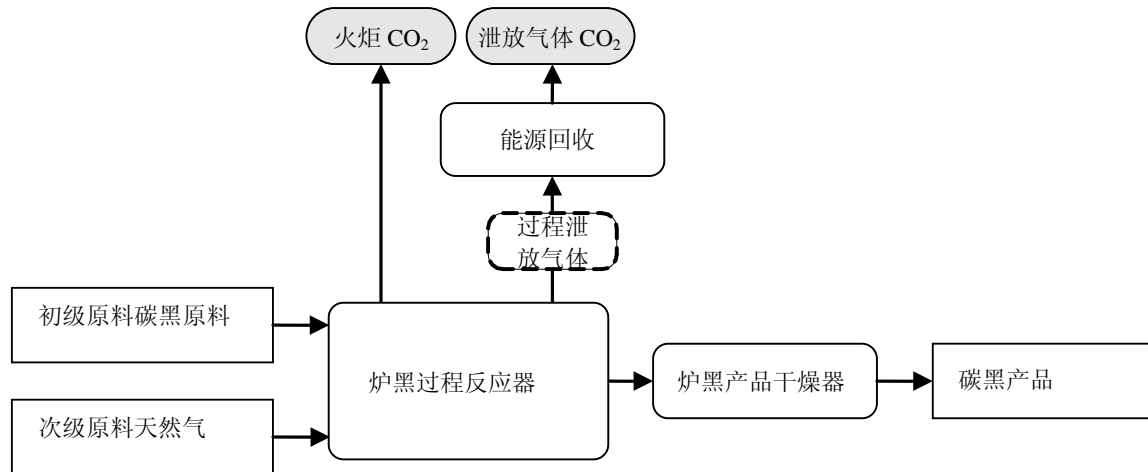


图 3.15 碳黑生产原料-产品流程图



3.10 氟化物生产

3.10.1 来自HCFC-22生产的HFC-23排放

3.10.1.1 引言

三氟胸苷（HFC-23 或 CHF_3 ）在一氯二氟甲烷（HCFC-22 或 CHClF_2 ）生产期间作为副产品生成。³ 诸如 HFC-23（和其它 HFC、PFC 和 SF_6 ）等材料不能通过含水（酸性、中性或碱性）洗刷过程中大量去除，将释放大气中。估计在 1990 年从 HCFC-22 工厂中释放的 HFC-23 最多达 HCFC-22（美国 EPA，2001）产量的 4%，当时缺少减排措施。全球有少量 HCFC-22 生产工厂，因此存在 HFC-23 排放源的几个离散点。虽然此处说明的方法可适用于任何氟化温室气体的副产品排放时，但它是专门为 HFC-23 写就的。第 3.10.2 节说明了总体上氟化副产品排放和“逃逸排放”的方法。

3.10.1.2 方法学问题

方法选择

在估算 HCFC-22 工厂的 HFC-23 排放时，有两大类测量方法。这些在 IPCC（2000）、DEFRA（2002a 和 2002b）、EFCTC（2003）和 UN（2004）中说明，已经转换为下文所述的方法 2 和方法 3。使用这些任一方法的国家排放是各个设施的排放之和。方法 1（缺省）可应用到单个工厂，或如果通过去除没有减排时，可应用到 HCFC-22 的国家总产出。计算 HFC-23 排放不是简单的机械性，而是需要有关生产和散发 HFC-23 的过程操作的信息，以便可以采用最合适的方法和因子。因此，*优良作法*是尽可能与工厂管理人员建立联系，以便获得必要的数据库。

方法 1 相对简单，涉及将缺省排放因子应用到生产的 HCFC-22 数量。此方法可应用于工厂级别或国家级别。方法 2 和方法 3 仅适用于工厂级计算，因为这些计算取决于仅来自工厂中的可用数据。如果某些工厂可以采用方法 3 数据，则方法 1 或方法 2 可以应用到其余的部分，确保完全包含所有情况。

*优良作法*是通过国家内的所有 HCFC-22 工厂的测量参数求和，从而估算国家排放。方法 3 工厂排放测量是最准确的，其次是基于工厂效率的方法 2。直接测量比方法 1 明显更准确，因为直接测量可以反应每个生产设施的特定条件。在大多数情况下，准备方法 3 估算所需的数据应可用，因为优良业务作法所用的设施对最终过程泄放执行定期或周期抽样，或在过程本身内作为例行操作的一部分。如果特定工厂数据不可获得，且此子类未定为关键类下重要子类，则应仅采用方法 1（缺省）（参见第 1 卷第 4.2

³ HCFC-22 在若干不同的应用场合中用作制冷剂，在泡沫吹制中作为混合成分，在制造合成聚合物中作为化学原料。

节)。使用过程优化的现代工厂将需要将准确的 HFC-23 生成数据作为此优化的一部分，因此在大多数情况下，特定工厂数据仅可用于大多数国家。

*优良作法*的方法选择取决于国家的具体情况。图 3.16 中的决策树说明 *优良作法*是将这些指南中的方法根据具体的国情应用。

减排程序包括在离散设施中去除 HFC-23，在此情况下只有去除设施不运作时才会出现排放。这些层级方法提供了对产生的 HFC-23 数量的估算，最终排放的生量份额取决于去除设施未运转的时长。对于使用 HFC-23 去除等减排技术的设施，还要例行实施减排效率的验证。*优良作法*是，在通过每家工厂的过程记录来验证减排时，从国家估算中减去减排的 HFC-23 排放。

方法 1

在方法 1 中，缺省因子用于从每个设施（按蒙特利尔议定书报告的用于潜在分散使用和单独报告给臭氧秘书处的原料使用）的 HCFC-22 生产总量中估算 HFC-23 的产量（或潜在排放）。参见公式 3.30。

公式 3.30
方法 1 计算使用缺省因子（生产的）HCFC-22 中的 HFC-23

$$E_{\text{HFC-23}} = EF_{\text{缺省}} \cdot P_{\text{HCFC-22}}$$

其中：

$E_{\text{HFC-23}}$ = HCFC-22 生产中的副产品 HFC-23 排放，kg

$EF_{\text{缺省}}$ = HFC-23 缺省排放因子，kg HFC-23/kg HCFC-22

$P_{\text{HCFC-22}}$ = HCFC-22 总产量，kg

特定工厂测量数据不可获得时，如果缺省条件是所有估算的 HFC-23 产量释放到大气中，则可以使用此方法。

方法 2

在方法 2 中，HFC-23 排放因子从过程效率记录中推导得出，用于公式 3.31 中所示的计算中。这是材料平衡方法，取决于预期 HCFC-22 产量和实际产量之间的差值计算，然后将此差值分配到原材料的损耗、产品的损耗（HCFC-22）和转化成副产品，包括 HFC-23。对于每个工厂，这些参数是不同的，因此对于报告到国家数据中的每个设施应单独评估。

公式 3.31
方法 2 计算使用过程效率中计算的因子（生产的）HCFC-22 中的 HFC-23

$$E_{\text{HFC-23}} = EF_{\text{计算的}} \cdot P_{\text{HCFC-22}} \cdot F_{\text{释放的}}$$

其中：

$E_{\text{HFC-23}}$ = HCFC-22 生产中的副产品 HFC-23 排放，kg

$EF_{\text{计算的}}$ = HFC-23 计算的排放因子，kg HFC-23/kg HCFC-22

$P_{\text{HCFC-22}}$ = HCFC-22 总产量，kg

$F_{\text{释放的}}$ = 此流未处理释放到的大气中的年度比例，比例形式

排放因子可从碳效率（公式 3.32）和氟效率（公式 3.33）中计算，公式 3.31 中使用的值通常应是这两个值的平均值，除非存在可充分记录的重要考虑事项（例如某个效率度量的不确定性很低）。每年平均碳和氟平衡效率是良好管理的 HCFC-22 工厂的特性，通常由工厂操作人员获得或可从过程计算记录的检测中获得。类似地，如果存在泄放处理系统，其运作的时长和处理 HCFC-22 工厂中的泄放流量应从记录中获得。

HCFC-22 总产量包括用作化学原料以及作为潜在分散使用出售的材料。

公式 3.32
计算碳平衡效率中的 HFC-23 排放因子

$$EF_{\text{碳平衡}} = \frac{(100 - \text{CBE})}{100} \cdot F_{\text{效率损耗}} \cdot FCC$$

其中：

$EF_{\text{碳平衡}}$ = 从碳平衡效率中计算的 HFC-23 排放因子，kg HFC-23/kg HCFC-22

CBE = 碳平衡效率，百分比

$F_{\text{效率损耗}}$ = 将效率损耗分配到 HFC-23 的因子，比例形式

FCC = 此组成成分的碳含量因子 (= 0.81), kg HFC-23/kg HCFC-22

和

$$\text{公式 3.33} \\ \text{计算氟平衡效率中的 HFC-23 排放因子} \\ EF_{\text{氟平衡}} = \frac{(100 - FBE)}{100} \cdot F_{\text{效率损耗}} \cdot FCC$$

其中:

$EF_{\text{氟平衡}}$ = 从氟平衡效率中计算的 HFC-23 排放因子, kg HFC-23/kg HCFC-22

FBE = 氟平衡效率, 百分比

$F_{\text{效率损耗}}$ = 将效率损耗分配到 HFC-23 的因子, 比例形式

FCC = 此组成成分的氟含量因子 (=0.54), kg HFC-23/kg HCFC-22

将效率损耗分配到 HFC-23 的因子对每个工厂是特定的, 如果使用此计算方法, 则本来应由过程操作人员建立。缺省情况下, 此值为 1; 效率中的所有损耗是由于 HFC-23 的联产。实际上, 通常这是最重要的效率损耗, 远大于原材料或产品的损耗。

碳和氟含量的因子从 HFC-23 和 HCFC-22 的分子成分中计算, 通用于所有 HCFC-22 工厂, 碳为 0.81, 氟为 0.54。

方法 3

方法 3 可能是最准确的。此处提供的方法 3 给出了等价的结果, 这些结果之间的选择将取决于各个设施的可用信息。每种情况下, 国家排放是工厂特定排放之和, 每个排放均可以使用方法 3 来确定, 以估算泄放到大气中气流的组成成分和流速 (在方法 3a 同时采用直接和连续, 在方法 3b 中通过连续监控与排放有关的过程参数, 在方法 3c 中通过连续监控反应器内产品流量中的 HFC-23 浓度):

$$\text{公式 3.34} \\ \text{方法 3A 计算单个过程流中的 HFC-23 排放 (直接方式)} \\ E_{\text{HFC-23}} = \sum_i \sum_j \int_t C_{ij} \cdot f_{ij} \quad [\int_t \text{意味着应随着时间此数量应相加求和。}]$$

其中:

$E_{\text{HFC-23}}$ = HFC-23 总排放: 随着时间 t , 合并排放质量流程 f 和浓度为 C 的每个工厂中所有 i 工厂和所有 j 流量之和 (请参见公式 3.37, 了解有关单独过程流量中“即时”HFC-23 排放的计算)。

或在使用替代方法时:

$$\text{公式 3.35} \\ \text{方法 3B 计算单个过程流中的 HFC-23 排放 (替代方法)} \\ E_{\text{HFC-23}} = \sum_i \sum_j \int_t E_{ij} \quad [\int_t \text{意味着应随着时间此数量应相加求和。}]$$

其中:

$E_{\text{HFC-23}}$ = HFC-23 总排放: $E_{i,j}$ 是每个工厂中的排放和替代方法确定的流量。(请参见公式 3.38 了解有关在单独过程流量中 HFC-23 排放的计算)。

或, 在使用反应器内产品流量内的 HFC-23 浓度时:

公式 3.36

方法 3c 计算单个过程流中的 HFC-23 排放（通过监控反应器产品）

$$E_{\text{HFC-23}} = \sum_i \int_t C_i \cdot P_i \quad [\int_t \text{意味着应随着时间此数量应相加求和。}]$$

其中：

$E_{\text{HFC-23}}$ = HFC-23 总排放； P_i 是工厂 i 的工厂反应器中 HCFC-22 产品的质量流程， C_i 是工厂 i 中与 HCFC-22 产品相关的 HFC-23 浓度（请参见公式 3.40 了解通过过程中测量在单个设施处计算 HFC-23 排放）。

方法 3a

方法 3a 基于单个工厂内对泄放浓度和流速的频繁或连续测量。因此排放到大气中的数量是下列各项的数学之积：流量中成分的质量浓度，总流量的流速（单位与质量浓度兼容）和此流量出现的时长：

公式 3.37

方法 3A 计算单个过程流中的瞬间 HFC-23 排放（直接方式）

$$E_{ij} = C_{ij} \cdot f_{ij} \cdot t$$

其中：

E_{ij} = 工厂 i 内过程流量 j 中的“瞬间”HFC-23 排放，kg

C_{ij} = 工厂 i 内过程流量 j 中泄放的实际气体流量内的 HFC-23 浓度，kg HFC-23/kg 气体

f_{ij} = 工厂 i 内过程流量 j 中气体流量的质量流程（通常用容积方式测量并使用标准过程工程方法转化成质量流程），kg 气体/小时

t = 测量这些参数且这些参数保持不变的时长，小时

如果任何 HFC-23 从泄放流量中回收用作化学原料且因此去除，则应从排放中扣除；如果排放包括在第 7 章的方法计算的数量内，则在可能排放的位置回收使用的材料可以在此处扣除。因为排放直接以此方法测量，所以没有必要对回收的材料制定独立的术语，与方法 3b 和方法 3c 不同。

释放的 HFC-23 总量是这些测量的瞬间释放的年度总和。当泄放流量在去除装置中处理以去除 HFC-23 时，其周期不应计入此计算。如果必须估算每个设施的销毁数量，操作人员应根据工厂运作时间和释放周期之间的差值（上述的 t ）对其进行计算。

方法 3b

在许多情况下，测量不是连续的，然而会在密集的过程调查或工厂试验期间获得，且试验的结果可用作替代数据以计算正常工厂运转期间的排放。这种情况下，副产品的排放速率与更易于（或准确）测量的参数有关，例如原料流速。这些方法必须满足以下条件：

- 本不应存在影响工厂测量点上游的主要过程设计、建设或运作变化，因此可能会表示出排放与无效生产之间的关系。（另请参见框 3.14）
- 排放和工厂运作速率之间的关系必须在试验期间与其不确定性一起确立。

对于几乎所有情况下，工厂运转的速率是合适的替代数据，排放的 HFC-23 数量取决于工厂当前运转速率和释放泄放流程的时长。

公式 3.38

方法 3B 计算单个过程流量中的 HFC-23 排放（替代方法）

$$E_{ij} = S_{ij} \cdot F_{ij} \cdot POR_{ij} \cdot t - R_{ij}$$

其中：

E_{ij} = 工厂 i 内泄放流量 j 的 HFC-23 质量排放，kg

S_{ij} = 每单位替代数量在工厂 i 内的泄放流量 j 中 HFC-23 的标准质量排放，例如过程运转速率（在以下公式 3.39 中说明），kg/“单位”

F_{ij} = 排放速率的测量标准质量排放速率与工厂实际运转速率关联的无量纲因子。在许多情况下，产生的比例对运转速率不敏感，且 F_i 保持一致（即，排放速率与运转速率成比例）。在其它情况下，排放速率是运转速率的更复杂函数。在所有情况下，应通过度量不同运转速率 HFC-23 产量，在工厂试验期间推导出 F_i 。当排放与运转速率有关的简单函数不能从测试中确定时，替代方法视为不适合，而是期望采用连续的测量。

POR_{ij} = 当前过程运转速率，适用于工厂 i 内随着时间 t 求平均值得出的泄放流量 j ，“单位/小时”。在建立标准排放速率的工厂试验和现行运行排放估算（如以下公式 3.39 所述）之间，此参数的单位必须保持一致。

t = 每年泄放的实际总持续时间，或如果过程未连续运转的期间，单位为小时。年排放量是当年所有期间之和。在去除系统中处理泄放流量的周期不应在此处计算。

R_{ij} = 工厂 i 内泄放流量 j 回收的 HFC-23 数量，用作化学原料且在此处销毁，kg。如果按本卷第 7 章中 ODS 替代物的方法计算的数量包括了这些排放，则经回收可用于潜在排放区域的材料可以在此处计算。

公式 3.39

方法 3B 计算替代方式的标准排放

$$S_{T,ij} = C_{T,ij} \cdot f_{T,ij} / POR_{T,ij}$$

其中（对于每个测试 T）：

S_{ij} = 工厂 i 内泄放流量 j 中 HFC-23 的标准质量排放，kg/单位（单位与公式 3.38 中的因子兼容，参见以下 $POR_{T,ij}$ ）

$C_{T,ij}$ = 试验期间工厂 i 内泄放流量 j 中 HFC-23 的平均质量比例浓度，kg/kg

$f_{T,ij}$ = 试验期间工厂 i 内泄放流量 j 的平均质量流速，kg/小时

$POR_{T,ij}$ = 试验期间工厂 i 内的替代数量（例如过程运转速率），单位/小时单位取决于对工厂 i 泄放流量 j 所采用的替代数量（例如原料的 kg/小时或 m^3 /小时）

方法 3c

相对简单的程序是监控与 HCFC-22 量相对的反应系统产品中 HFC-23 的浓度。当推算监控的 HCFC-22 的浓度和质量流程数学之积时，这为估算释放的 HFC-23 数量提供了基础。如果没有进行减排的泄放处理，则这是简单的程序。然而存在减排时，必须表明这会实际处理可能释放到大气中的所有流量，包括直接气体泄放和含水流量的除气作用。尤其是后者可能未被传递到去除设施。如果所有潜在泄放流量未被处理，但仍无法使用此方法。

公式 3.40

方法 3c 通过过程中测量计算单个设施中的 HFC-23 排放

$$E_i = C_i \cdot P_j \cdot t_F - R_i$$

其中：

E_i = 单个设施 i 中的 HFC-23 排放，kg

C_i = 设施 i 处反应器产品中 HFC-23 的浓度，kg HFC-23/kg HCFC-22

P_j = 应用此浓度时设施 i 处产生的 HCFC-22 质量，kg

t_F = 此 HFC-23 实际泄放到大气期间的比例，而不是销毁的比例，比例形式

R_i = 从设施 i 中回收的 HFC-23 数量，用作化学原料且因此销毁，kg

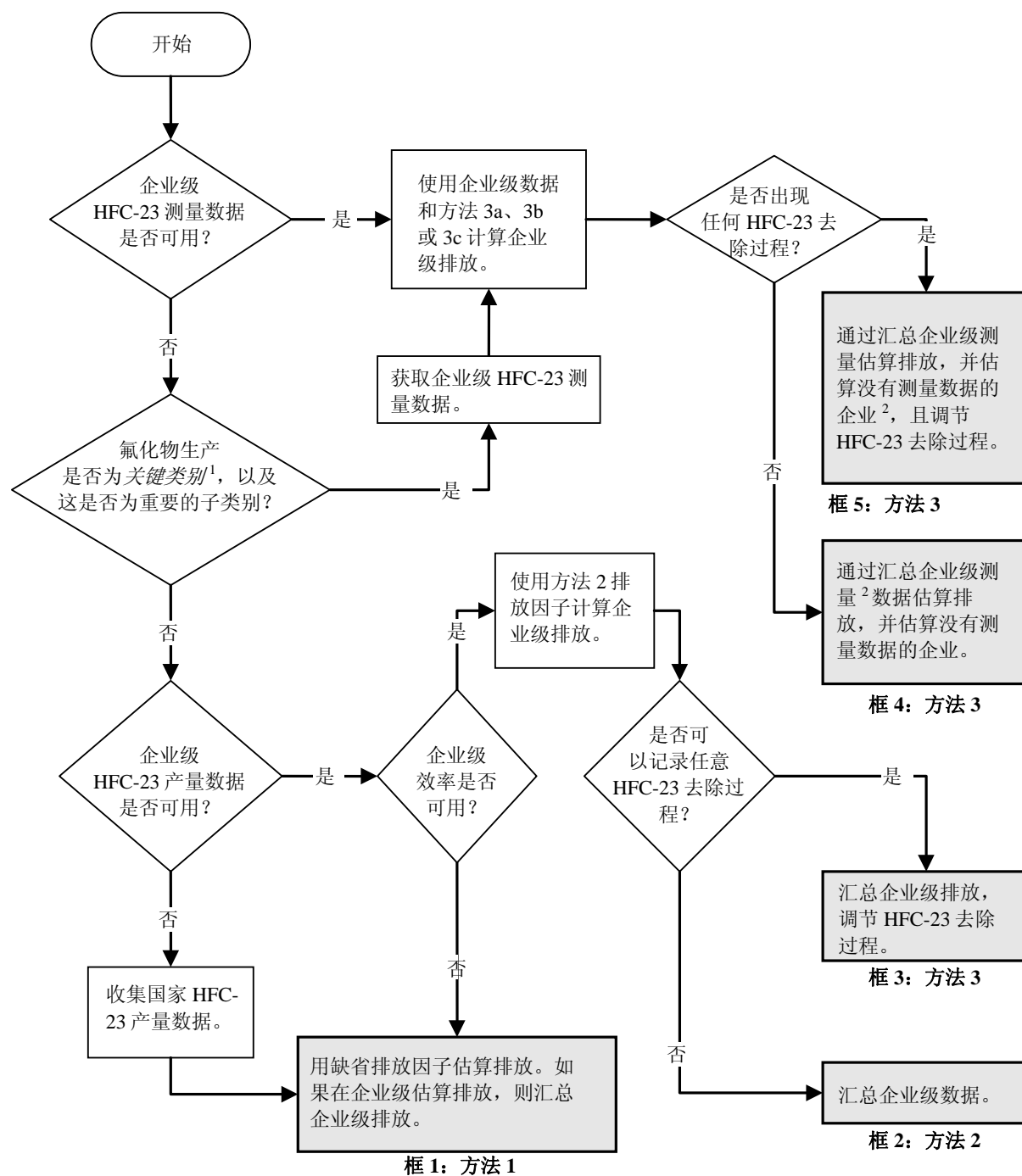
如果本卷第 7 章中方法计算的数量内包括了这些排放，则经回收可用于潜在排放区域的材料可以在此处计算。

释放到大气中的 HFC-23 总量是单个释放期间和单个反应系统中数量之和。

回收用作化学原料的 HFC-23 应从此处估算的总量内减去。

总之，方法 1 相对简单，涉及将缺省排放因子应用到生产的 HCFC-22 数量。此方法可应用于工厂级别或国家级别。方法 2 和方法 3 仅适于工厂级计算。如果某些工厂可以采用方法 3 数据，则方法 1 或方法 2 可以应用到其余的部分，确保完全包含所有情况。然后使用各个来源的产量加权不确定性以及标准统计技术，计算国家排放中的不确定性。与此方法无关，减排量应从每个工厂的总估算中减去，以在国家排放中将它们相加之前，确定净排放。

图 3.16 HCFC-22 生产中 HFC-23 排放的决策树（或氟化物生产中的其它类似副产品排放）



注:

1 有关关键类别和决策树使用的讨论, 请参见第 1 卷第 4 章“方法选择和类别识别”(参见 4.1.2 节有关有限资源部分)。

2 如果某些企业可以采用方法 3 数据, 则方法 1 或方法 2 可以应用到剩余的部分, 确保完全包含所有情况。

优良作法是在可能的情况下使用方法。直接测量比方法 1 明显更准确, 因为直接测量可以反应每个生产设施的特定条件。在大多数情况下, 准备方法 3 估算所需的数据应可用, 因为优良业务作法所用的设施对最终过程泄放执行定期或周期抽样, 或在过程本身内作为例行操作的一部分。对于使用 HFC-23 去除等减排技术的设施, 还要例行实施减排效率的验证。如果特定工厂数据不可用且此子类未在关键类下标识为重要子类(这种情况很少), 则应仅采用方法 1(缺省)(参见第 1 卷第 4.2 节)。

选择排放因子

方法 3 内有若干测量选项与抽样的位置和频率有关。总之，HFC-23 排放的直接测量可能提供最高的准确性，然而生产过程区域本身内参数的连续或频繁测量可能更加实际有效，可以达到同样的准确度。在两种情况下，测量的频率必须足够的高，以表示过程中的变化（例如催化剂的整个生命期间）。与测量频率的问题归纳在框 3.14 有关抽样和代表性的一般建议纳入第 1 卷第 2 章。

如果特定工厂测量或抽样不可获而使用方法 1，则应使用缺省排放因子，假定没有减排方法。对于 1995 年之前运营的工厂，缺省排放因子为 0.04 kg HFC-23/kg HCFC-22（4%）（IPCC，1996；USEPA，2001）。当没有测量数据且在缺少 HFC-23 的回收或去除的典型 HCFC-22 工厂中 HFC-23 的输出时，采用此缺省排放因子。此值与 1978-1995 年期间 HFC-23 浓度的大气观测值（Oram 等，1998 年）保持一致。当大量 HFC-23 要经回收且转换成 Halon 1301（McCulloch，1992）且在有大量产量的若干国家中需要减排作法时，这些表示全球平均排放等价于生产的 HCFC-22 总量的 2%。

通过过程优化，可以将产量减少到 0.014-0.03 kg HFC-23/kg HCFC-22（1.4%到 3%），然而不可能按这种方式完全消除 HFC-23 的形成（IPCC，2000）。而且，减少的范围非常依赖于过程设计和经济环境（减少 HFC-23 的措施通常可以减少过程输出）。在优化过程中，HFC-23 产量和排放将总是已经测量；没有这些测量数据不可能优化过程操作，且在单个工厂内缺省值没有意义。然而通过优化单个工厂已经改善了采用的技术工艺，此技术本应构建到最近工厂的设计中，说明缺省排放因子为 0.03 kg HFC-23/kg HCFC-22（3%）。这些缺省值具有很大不确定性（50%区域）。若要获得更准确的评估，应通过方法 2 或方法 3 确定实际排放，如果有必要，则使用本卷第 7 章中提供的指南将实际排放分配到前几年。

表 3.28
HFC-23 缺省排放因子

技术	排放因子 (kg HFC-23/生产的 kg HCFC-22)
陈旧、未优化的工厂（例如 20 世纪 40 年代到 1990/1995）	0.04
最近设计的工厂，没有专门优化	0.03
全球平均排放（1978 - 1995） ⁴	0.02
<i>比较：</i>	
优化的大型工厂——需要 HFC-23 的测量（方法 3）	最低为 0.014
有效捕获和去除 HFC-23 的工厂（方法 3）	最低为 0

框 3.14
工厂测量频率

每年 HFC-23 排放估算的准确度和精度取决于样本数（样本收集的频率）和流速测量的准确度以及离散流量测量可以表示泄放总量的程度。因为生产过程不是完全静态的，所以过程变化越大，工厂需要测量的频率就越高。总之，只要工厂做出任何重要的过程改变，抽样和分析均应重复。选择抽样频率之前，工厂应设置准确度的目标，并使用统计工具确定达到目标所需的样本大小。例如，HCFC-22 生产商的研究表明每天一次的抽样足以获得极其准确的年度估算。必要时应修正此准确度目标，以考虑可用的资源。（RTI，Cadmus，1998）

选择活动数据

当使用方法 1 时，生产数据应直接从生产商处获得。生产商可以用若干方式确定生产级别，包括运输重量和使用流量计测量容积-次数-密度。这些数据应考虑当前的所有 HCFC-22 产量，不管是销售还是用作

⁴ 全球平均值是从 HFC-23 大气浓度中的变化计算得出的。此值不能区分出企业排放之间的差别，企业排放范围从 HCFC-22 产量的 0%到 4%不等。

内部原料，且工厂应说明如何确定 HCFC-22 生产速率。在某些情况下，生产商可能会认为工厂生产数据为机密。对于国家级活动数据，业已需要按照蒙特利尔议定书提交 HCFC-22 生产数据。

完整性

应可能获得完整的抽样数据，因为每个国家只有少量 HCFC-22 工厂，且每个工厂操作人员的标准作法是监控过程效率和 HFC-23 损耗，因而要采用方法 2。用于减排 HFC-23 的热氧化剂去除效率通常较高（>99%），重要的是确定排出气体的成分，确保计算采用了此点氟化温室气体的排放。

建立一致的时间序列

HCFC-22 生产的 HFC-23 排放估算应使用整个时间序列和合适排放因子的相同方法。如果时间序列中任何年限的数据对于方法 3 不可用，则可以根据第 1 卷第 5 章中提供的指南填补这些空缺。

3.10.1.3 不确定性评估

方法 1

与其它方法不同，当不确定性基于测量和统计资料时，通过专家判断评估方法 1 不确定性，根据不同制造设施中排放变化的知识，可以将方法 1 的误差视为大约 50%。此量级的误差完全超出活动中的不确定性。

方法 2

通过对生产质量和效率中单独不确定性求平方根和，计算方法 2 结果的不确定性，假定碳和氟不确定性相同。碳和氟效率中的不确定性明显不同时（足以引起计算排放的材料差异），应在整个计算过程中使用具有较低不确定性的值。

方法 2 推导值的不确定性要大于方法 3 的预期，不过可以量化。通常对于生产大约 4% HFC-23 的工厂，碳效率大约是 95%，而氟效率是 92%。如果这些效率测量值在 1% 内，则方法 22 HFC-23 估算中的误差将小于 20%。这种程度准确度的估算效率将需要严格的计算步骤，且所有原材料和销售产品应在设施内外称重。这种状况设置了总合活动的预期准确度（用于方法 1 和方法 2）；采用按重量的生产优良计算和测量，应可以将活动误差减小到低于 1%。

方法 3

对于 HFC-23，方法 3 明显比测量的方法 2 或缺省的方法 1 更准确。对于 HFC-23 排放，泄放流量的常规方法 3 抽样可以在 95% 的置信级别内获得 1-2% 的准确度，方法 3（替代方法）结果的不确定性可能是同样。在两种情况下，不确定性可能按统计方式从输入参数的不确定性中计算，因为这些方法不依赖于排放因子或活动，细分不确定性的概念不具有有效性。

估算的不确定性表示为变化的系数（百分比），对于每个这些流量，存在测量的浓度和流速不确定性以及流动期间的不确定性。组合不确定性可以通过分析方式确定，应使用第 1 卷第 3 章中所述的标准方法来计算。

3.10.1.4 质量保证/质量控制（QA/QC）、报告和归档

质量保证/质量控制

优良作法是实施第 6 章第 1 卷概述的质量控制检查以及排放估算的专家评审。亦可以采用第 1 卷的 6 章介绍的附加质量控制核查和质量保证程序，尤其是当运用较高级方法时，这种排放源类别的估算更是如此。对于第 1 卷第 4 章确定的关键类别，鼓励清单编制者采用较高质量保证和质量控制方法。

除第 1 卷的指南外，与该排放源类别相关的具体程序概述如下。

对采用不同方法估算的排放量进行比较

清单编制者应根据使用方法 1 缺省因子和生产数据确定的排放估算，比较报告的工厂排放估算。如果只有国家生产数据可用，则应比较总合的工厂排放与国家缺省排放。如果比较中发现明显差异，则应回答以下问题：

1. 是否存在与任何单独工厂排放有关的不准确性（例如极端局外点可能考虑不合理的排放量）？

2. 特定工厂排放因子是否彼此明显不同？
3. 特定工厂生产速率是否与发布的国家级生产速率一致？
4. 对于明显的差异是否有任何其它解释，例如控制的影响、报告生产的方式或可能未记录的假定？

直接排放测量检查

- 清单编制者应确认在工厂测量时采用国际认可的标准方法。如果测量作法不符合此标准，则应仔细评估这些排放数据的使用。如果一些地方有更高的测量标准而且执行了质量保证和质量控制，那么排放量估算的不确定性还可相应调低。
- 每个工厂的质量保证/质量控制过程应经过评估，以确定样本数量和样本收集的频率是否适合过程本身中给出的变率。
- 可能的情况下，清单编制者应与其它测量或计算系统进行比较，验证所有测量和计算的数据。例如过程本身内的排放测量可以用泄放流量的测量数据定期验证。清单编制者应验证减排系统使用率和效率。
- 采用工厂测量技术和结果的周期性外部审计，还可以比较工厂间隐含的排放因子并计算主要差值。

报告和归档

优良作法是按照第1卷6.11节的概述，记录和归档生产国家排放清单估算需要的所有信息。

以下列出一些与此源类别相关的具体文档和报告的例子：

- 为了提供完整的透明报告，HCFC-22生产中HFC-23的排放应作为单项报告，而不是与其它HFC排放一起纳入。
- 文档还应包括：
 - (i) 方法学说明；
 - (ii) HCFC-22工厂数；
 - (iii) HCFC-22产量（如果是多个生产商）；
 - (iv) 存在减排技术；
 - (v) 过程说明、操作参数；和
 - (vi) 相关排放因子。

保密性

- 使用方法2和方法3意味着，HFC-23的工厂排放将与HCFC-22的产量分别报告。通过分离HFC-23排放和HCFC-22产量，有关HFC-23的排放数据无法被视为商业机密，因为它未揭示出HCFC-22的产量级别，没有单独制造设施的详细和保密知识。
- 将方法1应用到HCFC-22的全国总产量能使其从发布的HFC-23排放中计算，如果少于三个生产商，则这些生产数据可能被视为机密商业信息。这些情况下，应采取措施，例如通过汇总所有HFC排放以保护机密信息。出于透明原因，不管何时汇总，均应纳入HCFC-22生产的定性讨论。
- 当国家排放计算为单个设施之和且已经使用不同方法计算时，不可以单独从这些数据重新计算HCFC-22产量，不应存在与保密性有关的任何问题。

3.10.2 来自其它氟化合物生产的排放

3.10.2.1 引言

大量含氟温室气体可能作为氟化物生产的副产品排放到大气中。例如在最近国家清单中，报告了氟化物工厂SF₆、CF₄、C₂F₆、C₃F₈、C₄F₁₀、C₅F₁₂和C₆F₁₄等大量副产品排放（UNFCCC，2005）。其它示例包括从CFC-11和CFC-12的生产中释放副产品CF₄，或从核燃料周期中六氟化铀的生产内释放SF₆。

生产和分销期间出现的化学物质排放或相关化学物质生产期间作为副产品的排放（HCFC-22 生产中的 HFC-23 在上述第 3.10.1 节中有专门叙述）。还可能有正在生产的材料排放；即所谓的“逃逸排放”。副产品和逃逸排放的计算方式相同。在本节中，与使用有关的排放不会专门探讨，仅算入与消耗有关的排放（参见本卷中的第 4.5、6、7 和 8 章）。通常，氟化物可能从化学过程中释放，涉及广泛的技术和过程⁵：

- 氟化物液体和聚合体生产中使用的调聚反应过程
- 生成氟化物液体的四氟乙烯的感光氧化作用
- 经常在 SF₆ 生产中使用的直接氟化作用
- 卤素交换过程，制作低熔点 PFC，例如 C₂F₆ 和 CF₄，HFC 134a 和 245fa
- 通过直接氟化作用制造 NF₃
- 六氟化硫的生产
- 氟化单体的生产，例如四氟乙烯和六氟丙烯
- 氟化农用化学品的生产
- 氟化麻醉剂的生产

卤素交换过程广泛用于 HFC 生产，而大多数 PFC 和 SF₆ 需要通过电气化学方式生成的化学元素氟。在‘电气化学氟化过程’中，氟未被隔离，但在电气化学装置中制作预期产品。在其它过程中，氟被隔离在后续过程中使用，作为元素气体或载体系统的成分，例如 CoF₃。按照化学性质和数量，每个过程将具有不同类别的排放，因此常见的缺省排放功能相对价值很小。有必要明确每个国家内潜在的排放性工厂，因此在决策树中这是第一步（图 3.17）。这些工厂的共同因子是使用无水氟化氢，无水氟化氢是卤素交换过程和使用元素氟过程中氟的来源。因此无水氟化氢的产量和输入量可用作跟踪氟化物重要生产商的一种方式。然后进一步的查询（参见图 3.17）可以说明，是否存在大量氟化物温室气体排放。

3.10.2.2 方法学问题

方法选择

优良作法是使用图 3.17 中所示的决策树来选择方法。如果 2B9 类氟化物生产确定为关键，则此子类判定为重要，清单编制者应考虑排放是否为化学物质子集的生产中所主导，重点应放在与这些化学物质生产有关的更加复杂的数据收集工作上。这些氟化物温室气体的主要生产商数量很少：对于 SF₆，全球大约有 6 家公司，全世界共有大约 10 套生产设施（Preisegger, 1999）。在不久的将来可能这个数字会有少量增长，尤其是在发展中国家。然而，编制国家生产商的调查应该不会很难。

方法 1

在方法 1 中，缺省排放因子或从特定国情中推导出的类似数值，可用于估算各个 HFC、PFC、SF₆ 和其它氟化温室气体的与国家生产有关的排放。

公式 3.41
方法 1 计算生产相关的排放

$$E_k = EF_{\text{缺省},k} \cdot P_k$$

其中：

E_k = 氟化温室气体 k 的生产相关的排放，kg

$EF_{\text{缺省},k}$ = 缺省排放因子，kg/kg

P_k = 氟化温室气体 k 的总产量，kg

通过提供每个 HFC、PFC 和 SF₆ 国家总排放的单个数值，可以绕开在报告特定组成数据时引起保密性问题。如果通过第三方收集数据且仅作为此小计值报告，可能会更加简便。

⁵ 此清单是解说性清单。

方法 2

计算 HCFC-22 工厂的 HFC-23 排放时使用的基于过程效率的方法，对于其它类型的工厂使用价值不高。这是部分由于预期这些其它副产品排放中的效率较低；效率测量中的不确定性可能远大于副产品排放因子。而且一系列副产品可能造成过程低效（与只有一种副产品占主导地位的 HCFC-22 不同）。然而对于每个过程应存在生产效率数据，在缺少更严格的估算时，对于这些排放是否属于**关键类别**（对于这种情况，规定用方法 3）下的重要子类，在量化决策中可能使用从过程失效中估算的排放量。

方法 3

方法 3 可能是最准确的估算，且是**每种**副产品氟化温室气体的工厂特定排放之和，其确定采用标准方法估算，在使用任何减排技术之后实际排放到大气中气体流量的成分和流速。这种情况下：

公式 3.42

方法 3 直接计算生产相关的排放

$$E_k = \sum_i \sum_j \int_t C_{ijk} \cdot f_{ijk} \quad [\int_t \text{意味着应随着时间此数量应相加求和。}]$$

其中：

E_k = 氟化温室气体 k 的生产相关的总排放：随着时间 t 散发的质量流量 f 和浓度 C 进行合并，所有 i 工厂和每个工厂中所有 j 流量之和。

或，在使用替代方法时，例如副产品的排放速率被校正为更易于（或准确）的可测量参数（例如原料流速），如第 3.10.1 节的公式 3.35 所述：

公式 3.43

方法 3 替代计算生产相关的排放

$$E_k = \sum_i \sum_j \int_t E_{ijk} \quad [\int_t \text{意味着应随着时间此数量应相加求和。}]$$

其中：

E_k = 氟化温室气体 k 的生产相关的总排放： E_{ijk} = 从每个工厂和替代方法确定的流量中产生的氟化温室气体 k 的排放，如第 3.10.1 节公式 3.38 和公式 3.39 所述

注意，流量一般可按容积方式测量，且应根据理想气体定律、温度、压力和组成成分转化为质量流量（kg/小时），同样浓度应转化为可兼容的单位（例如 kg/kg）。

这种情况下，对于采用或不采用减排技术期间，应分别计算这些流速、浓度和持续时间，只有得出实际排放的值才能相加求和并进行报告。

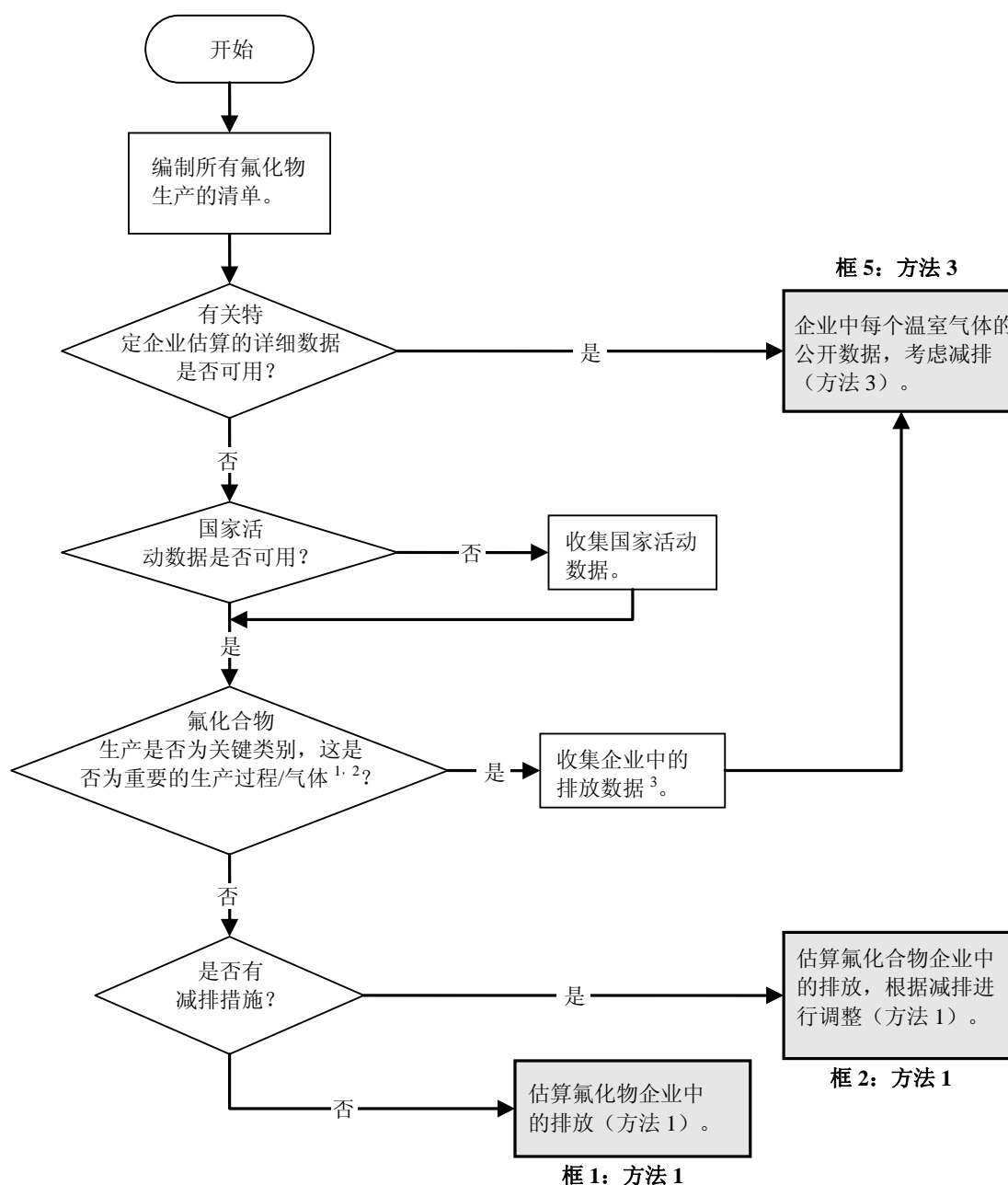
选择排放因子

方法 3 依赖于对释放到大气中单种材料数量的测量，方法 2 或方法 3 均不会依赖排放因子。对于方法 1，如果缺少减排措施，根据提供给 AFEAS（2004）的数据，对于 HFC 和 PFC 建议采用 0.5% 的产量作为缺省排放因子，不计算材料运输和转移中的损耗。有很多物质均可能出现潜在排放。然而，AFEAS 数据表明，生产特定氟化物期间损耗的成分一般具有辐射强迫性质，类似于期望氟化物的性质。因此对于**关键类别**下不重要子类别的来源，逃逸和副产品排放是相同的，将采用 0.5% 的排放因子。

对于 SF_6 ，根据德国的经验，建议对于主要最终使用不需要高度提纯的 SF_6 气体（例如电气设备、绝缘窗）的国家，采用的缺省排放因子为 SF_6 总产量的 0.2%（Preisegger, 1999）。根据日本的经验，如果国内主要使用需要高度提纯的 SF_6 气体（例如半导体生产），则缺省值应是 8%，因为在回气缸中处理残留气体（即，不用或不回收但残留在容器内的比例）期间会出现处理损耗（Suizu, 1999）。如果国家数据可用，则应使用这些数据，尤其是没有在此处专门列出的其它材料更是如此。

缺省排放因子基于没有采用减排措施的情形。如果排放到大气中的气体量因诸如泄放流量的热氧化过程而出现减少，则应调节排放量以计算氧化剂的去除效率和使用的时长。根据 HFC-23 的去除经验，建议缺省的去除效率 100%，而去除过程的联机时间对排放有很大影响，应进行记录。

图 3.17 生产过程中氟化温室气体排放的决策树（适用于逃逸排放和副产品排放）



注:

1 有关关键类别和决策树使用的讨论, 请参见第 1 卷第 4 章“方法选择和类别识别”(参见 4.1.2 节有关有限资源部分)。

2 此时可以使用方法 2 明确这是否为节中所述的关键类别, 这种方式仅用于方法 2。

3 为了保密, 只有在进行国家研究时才可以由第三方收集数据。

选择活动数据

另外, 活动数据在基于测量数据的方法 3 和方法 2 估算内不起作用。对于方法 1, 活动是生产期望氟化物的每年质量。

回收

已用气体的回收使用可以由新气体的生产商或其它回收使用公司实施。在处理和提纯已用气体和回收气体时可能出现排放。没有特定排放因子。因此*优良作法*是对新产量使用相同的缺省因子。

完整性

对于某些清单编制者，确定少量生产商，特别是回收公司，可能是一项复杂的任务。然而基于这些氟化温室气体的国家质量平衡的初始估算，应确定这些实体的生产相关排放是否会对国家总排放做出很大贡献。

建立一致的时间序列

生产过程氟化化合物的副产品和逃逸排放估算应使用整个时间序列和合适排放因子的相同方法。如果时间序列中任何年限的数据对于方法3不可用，则可以根据第1卷第5章中提供的指南填补这些空缺。

3.10.2.3 不确定性评估

对于方法1，如要报告国家数据并按统计方式与缺省排放因子不确定性进行组合，则需要确定活动数据中的不确定性。通常，在运转良好的设施中，活动数据中的缺省不确定性应为1%，假定保持严格的计算记录且按重量监控生产。实际排放因子范围从超过缺省值很多到零。因此缺省排放因子的缺省不确定性设置为100%，例如 0.5 ± 0.5 （%）。

对于方法3排放，测量的不确定性应单独确定，（使用标准统计方法）总合之后可提供本次估算的总不确定性。此方法等同于HCFC-22中HFC-23所述的方法。在方法2中，应评估单个化合物中效率测量和损耗分配的不确定性。因为这些很可能会产生比方法3更大的不确定性，使用方法2可能仅限于评估副产品氟化物排放是否是*关键类别*下的重要子类别。

3.10.2.4 质量保证/质量控制（QA/QC）、报告和归档

质量保证/质量控制

*优良作法*是实施第6章第1卷概述的质量控制检查以及排放估算的专家评审。亦可以采用第1卷的6章介绍的附加质量控制核查和质量保证程序，尤其是当运用较高级方法时，这种排放源类别的估算更是如此。对于第1卷第4章确定的*关键类别*，鼓励清单编制者采用较高质量保证和质量控制方法。

对采用不同方法估算的排放量进行比较

清单编制者应根据总合的生产商级别数据得出的估算与根据国家生产数据和推荐的缺省排放因子得出的估算进行比较。清单编制者应与生产商合作调查明显的差异，确定是否存在未说明的差异。

报告和归档

如果制造商数量有限，可能会出现保密性问题。在这些情况下，有必要对国家总排放提出汇总程度更高的报告。如果调查回复不能作为公共信息发布，则需要由第三方评审调查数据以支持数据验证工作。

*优良作法*是按照第1卷6.11节的概述，记录和归档生产国家排放清单估算需要的所有信息。不可能在国家清单报告中纳入所有文档记录。然而，清单应包括使用的方法汇总以及源数据参考，以使报告的排放估算保持透明，且计算步骤可具有可追溯性。

参考文献

第3.2 - 3.8节

- Ashford, R.D. (1994) . Ashford's Dictionary of Industrial Chemicals, Wavelength Publications Ltd, London England.
- Austin, G.T. (1984) . Shreve's Chemical Process Industries, Fifth Edition, McGraw-Hill, Inc., USA.
- Babusiaux, P. (2005) . Note on production of Glyoxal and Glyoxylic acid, Clariant, Lamotte, France.
- Bockman, O. and Granli, T. (1994) . 'Nitrous oxide from agriculture'. *Norwegian Journal of Agricultural Sciences*, Supplement No. 12. Norsk Hydro Research Centre, Porsgrunn, Norway.
- Bouwman, A.F., van der Hoek, K.W. and Olivier, J.G.J. (1995) . 'Uncertainties in the global source distribution of nitrous oxide'. *Journal of Geophysical Research*, 100:D2, pp. 2785-2800, February 20, 1995.
- Burtscher, K. (1999) . Personal communication between Kurt Burtscher of Federal Environment Agency of Austria and plant operator of chemical industry in Linz, Austria, 1999.
- Chemlink (1997) . Website <http://www.chemlink.com.au/titanium.htm>. Chemlink Pty Ltd ACN 007 034 022. Publications 1997.
- Choe J.S., Gook, P.J. and Petrocelli, F.P. (1993) . Developing N₂O abatement technology for the nitric acid industry. Paper presented at the 1993 ANPSG Conference, Destin, Florida, USA, 6 October, 1993.
- Cook, P. (1999) . Personal communication between Phillip Cook of Air Products and Chemicals, Inc., USA, and Heike Mainhardt of ICF, Inc., USA. March 5, 1999.
- Cotton, F.A. and Wilkinson, G. (1988) . Advanced Inorganic Chemistry, 5th Edition, ISBN 0-471-84997-9. Wiley, New York, USA.
- de Beer, J., Phylipsen, D. and Bates, J. (2001) . Economic Evaluation of Sectoral Emission Reduction Objectives for Climate Change: Economic Evaluation of Carbon Dioxide and Nitrous Oxide Emission Reductions in Industry in the EU – Bottom-up Analysis, Contribution to a Study for DG Environment, European Commission by Ecofys Energy and Environment, AEA Technology Environment and National Technical University of Athens.
- Environment Canada (1987) . Review of the Canadian Fertiliser Industry and Evaluation of Control Technology, Conservation and Protection Report EPS 2/AG/1.
- EFMA (2000a) . European Fertilizer Manufacturers' Association, Best Available Techniques for Pollution Prevention and Control in the European Fertilizer Industry: Production of Ammonia, Booklet No. 1 of 8, European Fertilizer Manufacturers' Association, Brussels.
- EFMA (2000b) . European Fertilizer Manufacturers' Association, Best Available Techniques for Pollution Prevention and Control in the European Fertilizer Industry: Production of Nitric Acid, Booklet No. 2 of 8, European Fertilizer Manufacturers' Association, Brussels.
- EFMA (2000c) . European Fertilizer Manufacturers' Association, Best Available Techniques for Pollution Prevention and Control in the European Fertilizer Industry: Production of Urea and Urea Ammonium Nitrate, Booklet No. 5 of 8, European Fertilizer Manufacturers' Association, Brussels.
- EIPPCB (2004a) . European Integrated Pollution Prevention and Control Bureau, Draft Reference Document on Best Available Techniques in the Large Volume Inorganic Chemicals, Ammonia, Acids and Fertilisers Industries, Draft March 2004, European Commission Directorate General JRC, Joint Research Centre, Institute for Prospective Technological Studies, Spain.
- EIPPCB (2004b) . European Integrated Pollution Prevention and Control Bureau, Draft Reference Document on Best Available Techniques in the Large Volume Inorganic Chemicals-Solid and Others Industry, Draft August 2004, European Commission Directorate General JRC, Joint Research Centre, Institute for Prospective Technological Studies, Spain.
- Hocking, M. B. (1998) . Handbook of Chemical Technology and Pollution Control, Academic Press USA.

- IPCC (1997) . Revised 1996 IPCC Guidelines for National Greenhouse Inventories. Houghton J.T., Meira Filho L.G., Lim B., Tréanton K., Mamaty I., Bonduki Y., Griggs D.J. Callander B.A. (Eds) . Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC) , IPCC/OECD/IEA, Paris, France.
- Japan Environment Agency (1995) . Study of Emission Factors for N₂O from Stationary Sources.
- Kirk-Othmer (1999) . Concise Encyclopedia of Chemical Technology, Fourth Edition, John Wiley & Sons, Inc. USA.
- Lowenheim, F.A. and Moran, M.K. (1975) . Faith, Keyes, and Clark's Industrial Chemicals, Fourth Edition, John Wiley & Sons, Inc. USA.
- Olivier, J. (1999) . Personal communication between Jos Olivier of National Institute of Public Health and the Environment (RIVM) , The Netherlands and Heike Mainhardt of ICF, Inc., USA. February 2, 1999.
- Olsen, S.E. (1991) . Kalsiumkarbid og CO₂, STF34 A91142. SINTEF.
- Perez-Ramirez, J., Kapteijn, F., Shoffel, K. and Moulijn, J. A. (2003) . 'Formation and control of N₂O in nitric acid production: Where do we stand today?', *Applied Catalysis B: Environmental* 44, pp.117-131, Elsevier Science B.V.
- Raanes, O. (1991) . Silisiumkarbid og CO₂, STF34 A91134. SINTEF 1991.
- Reimer, R.A., Slaten, C.S., Seapan, M., Koch, T.A. and Triner, V.G. (1999) . 'Implementation of Technologies for Abatement of N₂O Emissions Associated with Adipic Acid Manufacture. Proceedings of the 2nd Symposium on Non-CO₂ Greenhouse Gases (NCGG-2) , Noordwijkerhout, The Netherlands, 8-10 Sept. 1999, Ed. J. van Ham *et al.*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, pp. 347-358.
- Reimer, R., (1999a) . Personal communication between Ron Reimer of DuPont, USA and Heike Mainhardt of ICF, Inc., USA. February 8, 1999.
- Reimer, R., (1999b) . Personal communication between Ron Reimer of DuPont, USA and Heike Mainhardt of ICF, Inc., USA. May 19, 1999.
- Reimschuessel, H. K. (1977) . 'Nylon 6 Chemistry and Mechanisms', *Journal of Polymer Science: Macromolecular Reviews*, Vol. 12, 65-139, John Wiley & Sons, Inc.
- Scott, A. (1998) . 'The winners and losers of N₂O emission control'. *Chemical Week*, February 18, 1998.
- Thiemens, M.H. and Trogler, W.C. (1991) . 'Nylon production; an unknown source of atmospheric nitrous oxide'. *Science*, 251, pp. 932-934.
- U.S. EPA (1985) . Criteria Pollutant Emissions Factors. Volume 1, Stationary Point and Area Sources. AP-42 4th Edition (and Supplements A and B) . U.S. Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, North Carolina, USA.
- van Balken, J.A.M. (2005) . Personal communication from J.A.M. van Balken (European Fertilizer Manufacturers Association) .

第3.9节

- AGO (2005) . Australian Methodology for the Estimation of Greenhouse Gas Emissions and Sinks 2003: Industrial Processes, Australian Government, Department of the Environment and Heritage, Australian Greenhouse Gas Office, 2005, Table 4, Page 18.
- BASF (2006) . Personal Communication from Silke Schmidt, BASF Aktiengesellschaft, Ludwigshafen, Germany to Robert Lanza, ICF Consulting, Inc., Washington, DC, USA, January 9, 2006.
- Boustead, I. (1999) . Eco-Profiles of Plastics and Related Intermediates, published by APME, Brussels, 1999.
- Boustead, I. (2003a) . Eco-Profiles of the European Plastics Industry: Olefins. A Report for the European Association of Plastics Manufacturers (APME) , Brussels, July 2003, Table 7, Page 9. http://www.apme.org/dashboard/business_layer/template.asp?url=http://www.apme.org/media/public_documents/20030820_114355/olefinsreport_july2003.pdf&title=Microsoft+Word+%2D+olefins%2Edoc&k euze1=&keuze2=&keuze3=&invulstrook=olefin+AND+eco%2Dprofile

- Boustead, I. (2003b) . Eco-Profiles of the European Plastics Industry, Methodology: A Report for APME, Brussels, July 2003. http://www.apme.org/media/public_documents/20010817_141031/method.pdf
- Boustead, I. (2005) . ETHYLENE DICHLORIDE: A report by I Boustead for The European Council of Vinyl Manufacturers (ECVM) & PlasticsEurope, March 2005.
- DOE (2000) . Energy and Environmental Profile of the U.S. Chemical Industry, U.S. Department of Energy Office of Industrial Technologies, May 2000, Section 3.1.4, Page 92.
- DSM (2002) . DSM Responsible Care Progress Report 2001 ; Safety, Health and Environmental Management at DSM, 2002
- EEA (2005) . EMEP/CORINAIR. Emission Inventory Guidebook – 2005, European Environment Agency, Technical report No 30. Copenhagen, Denmark, (December 2005) . Available from web site see: <http://reports.eea.eu.int/EMEP-CORINAIR4/en>
- European IPPC Bureau (2005) . Integrated Pollution Prevention and Control (IPPC) Draft Reference Document on Best Available Techniques in the Large Volume Inorganic Chemicals (LVIC) – Solid and Others Industry, EK/EIPPCB/LVIC-S_Draft_2, Draft, June 2005. <http://eippcb.jrc.es/pages/FActivities.htm>
- European IPPC Bureau (2003) . Integrated Pollution Prevention and Control (IPPC) Reference Document on Best Available Techniques in the Large Volume Organic Chemical (LVOC) Industry, February 2003. <http://eippcb.jrc.es/pages/FActivities.htm>
- FgH-ISI (1999) . Fraunhofer-Institut für Systemtechnik und Innovationsforschung. C-Ströme Abschätzung der Material –Energie und CO₂ Ströme für Modellsysteme in Zusammenhang mit dem nichtenergetischen Verbrauch, orientiert am Lebensweg – Stand und Szenarienbetrachtung, Karlsruhe, 1999. Cited in Neelis, M ; Patel, M ; de Feber, M ; 2003. Improvement of CO₂ Emissions Estimates from the Non-energy Use of Fossil Fuels in the Netherlands. Report Number NW&S-E-2003-10, Copernicus Institute, Department of Science, Technology, and Society, Utrecht, The Netherlands, April 2003
- Hinderink, *et al.* (1996) . Exergy Analysis with Flowsheeting Simulator – II Application Synthesis Gas Production from Natural Gas, Chemical Engineering Science, Volume 51, No. 20, Page 4701-4715, 1996. Cited in Neelis, M ; Patel, M ; de Feber, M ; 2003. Improvement of CO₂ Emissions Estimates from the Non-energy Use of Fossil Fuels in the Netherlands. Report Number NW&S-E-2003-10, Copernicus Institute, Department of Science, Technology, and Society, Utrecht, The Netherlands, April 2003
- Houdek, J.M., Andersen, J. (2005) . “On Purpose“ Propylene – Technology Developments, UOP LLC. Presented at the ARTC 8th Annual Meeting, Kuala Lumpur, April 29, 2005, Figure 1, Page 3 and Page 4.
- Kirk Othmer (1992) . Encyclopedia of Chemical Technology, 4th Edition, Volume 4, 1992. Carbon Black. Page 1054.
- Lurgi (2004a) . Lurgi Mega Methanol. Lurgi Oel-Gas-Chemie
- Lurgi (2004b) . Integrated Low Pressure Methanol Process: Synthesis Gas Production by Combined Reforming of Natural Gas or Oil Associated Gas. Lurgi Oel-Gas-Chemie. http://www.lurgi-oel.de/lurgi_oel/english/nbsp/main/info/methanol_combined_reforming.pdf
- Lurgi (2004c) . Integrated Low Pressure Methanol Process: Synthesis Gas Production by Conventional Steam Reforming of Natural Gas or Oil Associated Gas. Lurgi Oel-Gas-Chemie. http://www.lurgi-oel.de/lurgi_oel/english/nbsp/main/info/methanol_conventional_reforming.pdf
- Methanex (1996) . Methanex Corporation Climate Change Voluntary Challenge and Registry Program Action Plan, September 1996. <http://www.vcr-mvr.ca/registry/out/C969-METHANEX-W52.PDF>
- Methanex (2003) . Global Environmental Excellence Report 2002, Methanex Corporation, 2003
- Neelis, M., Patel, M. and de Feber, M. (2003) . Improvement of CO₂ Emissions Estimates from the Non-energy Use of Fossil Fuels in the Netherlands, Report Number NW&S-E-2003-10, Copernicus Institute, Department of Science, Technology, and Society, Utrecht, The Netherlands, April 2003.
- Qenos (2003) . Annual Report on Manufacturing Operations at Qenos Olefins, Plastics, Resins, and Elastomers Sites to Altona Complex Neighborhood Consultative Group, April 2003, Qenos Pty. Ltd.
- Qenos (2005) . 2004 Annual Report on Manufacturing Operations at Qenos Olefins, Plastics, Resins, and Elastomers Sites to Altona Complex Neighborhood Consultative Group, April 2005, Qenos Pty. Ltd.

-
- SFT (2003a) . Self-reporting of emissions to the Norwegian Pollution Control Authority based on direct measurements at Statoil Tjeldbergodden Methanol Plant. (In Norwegian) .
- SFT (2003b) . Self-reporting of emissions to the Norwegian Pollution Control Authority based on direct measurements at Nordetyl ethylene Plant. (In Norwegian) .
- Struker, A. and Blok, K. (1995) . Sectorstudie organische chemie, National Energy Efficiency Data Informatie Systeem (NEEDIS) , Patten, December 1995. Cited in Neelis, M ; Patel, M ; de Feber, M ; 2003. Improvement of CO2 Emissions Estimates from the Non-energy Use of Fossil Fuels in the Netherlands, Report Number NW&S-E-2003-10, Copernicus Institute, Department of Science, Technology, and Society, Utrecht, The Netherlands, April 2003

第 3.10.1 节

- Defra (2002a) . Protocol C1: Measurement of HFCs and PFCs from the Manufacture of HF, CTF, HCFC-22, HFC-125 and HFC-134a, in *Guidelines for the Measurement and Reporting of Emissions by Direct Participants in the UK Emissions Trading Scheme*, UK Department for Environment, Food and Rural Affairs, Report No. UKETS (01) 05rev1, Defra, London, 2002.
- Defra (2002b) . Protocol C9: Measurement of HFCs and PFCs from Chemical Process Operations, UK Department for Environment, Food and Rural Affairs, *as above*, London, 2002.
- EFCTC (2003) . *Protocol for the Measurement of HFC and PFC Greenhouse Gas Emissions from Chemical Process Operations*, Standard Methodology, European Fluorocarbon Technical Committee, Cefic, Brussels, 2003.
- IPCC (1997) . Revised 1996 IPCC Guidelines for National Greenhouse Inventories. Houghton J.T., Meira Filho L.G., Lim B., Tréanton K., Mamaty I., Bonduki Y., Griggs D.J. Callander B.A. (Eds) . Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC) , IPCC/OECD/IEA, Paris, France.
- IPCC (2000) . Good Practice Guidance and Uncertainty Management in National Greenhouse Gas Inventories. Penman J., Kruger D., Galbally I., Hiraishi T., Nyenzi B., Emmanuel S., Buendia L., Hoppaus R., Martinsen T., Meijer J., Miwa K., Tanabe K. (Eds) . Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC) , IPCC/OECD/IEA/IGES, Hayama, Japan.
- McCulloch A. (1992) . Global Production and Emissions of Bromochlorodifluoromethane and Bromotrifluoromethane (Halons 1211 and 1301) , *Atmos. Environ.*, 26A (7) , 1325-1329.
- Oram D.E., Sturges, W.T., Penkett, S.A., McCulloch, A. and Fraser, P.J. (1998) . Growth of fluoroform (CHF₃, HFC-23) in the background atmosphere, *Geophys. Res. Lett.*, 25 (1) , 35-38.
- RTI, Cadmus, (1998) . 'Performance Standards for Determining Emissions of HFC-23 from the Production of HCFC-22', *draft final report* prepared for USEPA, February 1998.
- UN (2004) . Approved baseline methodology, 'Incineration of HFC 23 waste streams', AM0001/Version 02, CDM – Executive Board, United Nations Framework Convention on Climate Change, 7 April 2004
- U.S. EPA (2001) . Inventory of U.S. Greenhouse Gas Emissions and Sinks: 1990-1999. United States Environmental Protection Agency, Report No. EPA 236-R-01-001, Washington, U.S.A., 2001.

第 3.10.2 节

- AFEAS (2004) . *Production, Sales and Estimated Atmospheric Emissions of CFCs, HCFCs and HFCs*, Alternative Fluorocarbons Environmental Acceptability Study, Arlington, U.S.A., 2004. Available at www.afeas.org.
- Preisegger, E. (1999) . Statement on experiences of Solvay Fluor und Derivate GmbH, Hannover, Germany regarding an emission factor at the IPCC expert group meeting on *Good practice* in Inventory Preparation, Washington D.C. Jan, 1999.
- Suizu, T. (1999) . Partnership activities for SF₆ gas emission reduction from gas insulated electrical equipment in Japan. *Proc. Joint IPCC/TEAP Expert Meeting on Options for the Limitation of Emissions of HFCs and PFCs*, Petten, Netherlands, 26-28 May 1999. ECN, Petten.
- UNFCCC (2005) . Belgium's Greenhouse Gas Inventory (1990-2003) , National Inventory Report 2005, submitted under the United Nations Framework Convention on Climate Change, April 2005. http://unfccc.int/national_reports/annex_i_ghg_inventories/national_inventories_submissions/items/2761.php.