聚焦CO2加氢制甲醇：自热式反应器研发的三大挑战与破局路径

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/41696.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

聚焦CO2加氢制甲醇：自热式反应器研发的三大挑战与破局路径。传统甲醇合成通常在多管固定床反应器（MTFRs）中进行，依靠壳程冷却剂保障反应热安全管控。随着生产规模提升，传统MTFRs会出现热损失增加、冷却需求与投资成本显著攀升问题。自热式反应器可利用反应过量余热预热进料或驱动其他吸热过程，已在强放热反应中被证实有效，可有效解决传统反应器的上述局限。上海交通大学罗正鸿教授团队发表观点论文，指出了CO2加氢制甲醇自热式反应器研发与工业化过程中的三大核心挑战，提出虚拟孪生与数字孪生协同的破局策略。

核心观点

三大难题制约自热式CTM反应器工业化

多尺度全耦合建模难度大

自热式CTM反应器的催化建模，需要实现催化剂颗粒、床层、反应器三个尺度的传递现象与反应动力学的耦合匹配。CO2加氢制甲醇是中等放热及平衡受限过程，精准预测反应器内局部温度与浓度场，是维持反应稳定进行和保障甲醇高效生产的核心前提。目前常用的多孔介质模型计算效率高，但高度依赖精准的传递参数；颗粒解析法虽能精准捕捉局部传递效应，但计算成本极高，难以直接应用于工业级反应器设计。

操作固有多稳态导致温控难度高

多稳态是自热式反应器的固有特性，也是其稳定运行的核心挑战。在CO2加氢反应过程中，反应放热量随阿伦尼乌斯动力学呈非线性增长，而反应器的除热速率随温度近似呈线性变化，二者的速率不匹配，会导致反应器出现熄灭、不稳定、点火三种截然不同的运行状态。反应器空速的变化会直接改变操作区间，导致启动点火或工况动态波动等过程，会进一步加剧反应器内的温度控制难度，极易出现反应熄火或飞温的安全风险。

实验室到工业规模放大转化难度大

实验室规模通常采用短反应器，其反应行为呈现理想化特征，难以直接复制到工业级CTM体系中。在工业长管反应器中，气流热损失、径向温度与浓度梯度，极易导致中等放热的CO2加氢反应无法在长管全程维持稳定的反应温度；即使完成进料预热，预热不均、热惯性差异等问题，也

会导致部分管程反应自持稳定，部分管程温度低于点火温度，出现管间性能严重不均的问题，导致实验室小试的优异性能无法有效转化为工业产能。

破局之道

虚拟与数字双孪生策略

虚拟孪生 (Virtual Twin)：基于模拟的多尺度工具，用于高效探索CTM的催化剂颗粒形状、床层填充及管级设计。支持替代模型（Surrogate
Model）的开发，以解决全尺度模拟算力不足的问题。

数字孪生 (Digital Twin)：整合实时运行数据，进行分析与模型更新。

闭环反馈 (Closed-loop)：数据驱动的洞察将不断优化虚拟孪生模型，并指导反应器的最优操作（如温度控制、甲醇产量均匀化）。（来源：EngineeringJournals微信公众号）

相关论文信息：https://journal.hep.com.cn/fcse/EN/10.1007/s11705-026-2644-8

特别声明：本文转载仅仅是出于传播信息的需要，并不意味着代表本网站观点或证实其内容的真实性；如其他媒体、网站或个人从本网站转载使用，须保留本网站注明的“来源”，并自负版权等法律责任；作者如果不希望被转载或者联系转载稿费等事宜，请与我们接洽。
作者：罗正鸿等 来源：《工程·化学工程》

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发