

Modelagem Cinética e Estimação Paramétrica da Desativação Catalítica por Coque na Decomposição de Metano

Augusto Santini Baratto, Ramon Vinícius Santos de Aquino, Bruno Francisco Oechsler
Universidade Federal de Santa Catarina; Centro Tecnológico, augustosantiini@gmail.com

Campina Grande - PB

INTRODUÇÃO

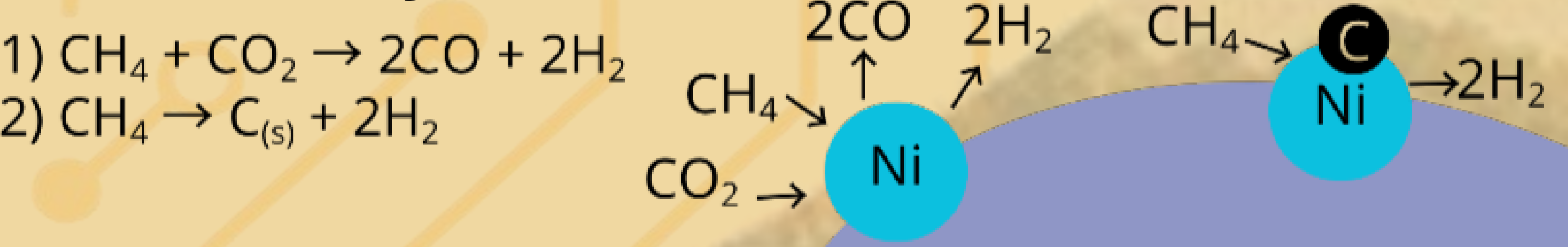


Figura 1 – Esquema de Reações Fonte: Os Autores (2026).

- Testes experimentais demandam alto custo e tempo.
- A **modelagem** surge para **prever** a vida útil do catalisador (Acevedo, 2006).
- Objetivo:** implementar em Python um **modelo transiente** acoplado a uma função de atividade baseada no acúmulo de coque e **estimar parâmetros cinéticos** a partir de dados experimentais.

METODOLOGIA

- Modelagem de um **reator diferencial**, isotérmico (550°C), em regime transiente a parâmetros concentrados, assumindo gás ideal e resistências difusivas desprezíveis (Fogler, 2009; Aquino et al., 2025).

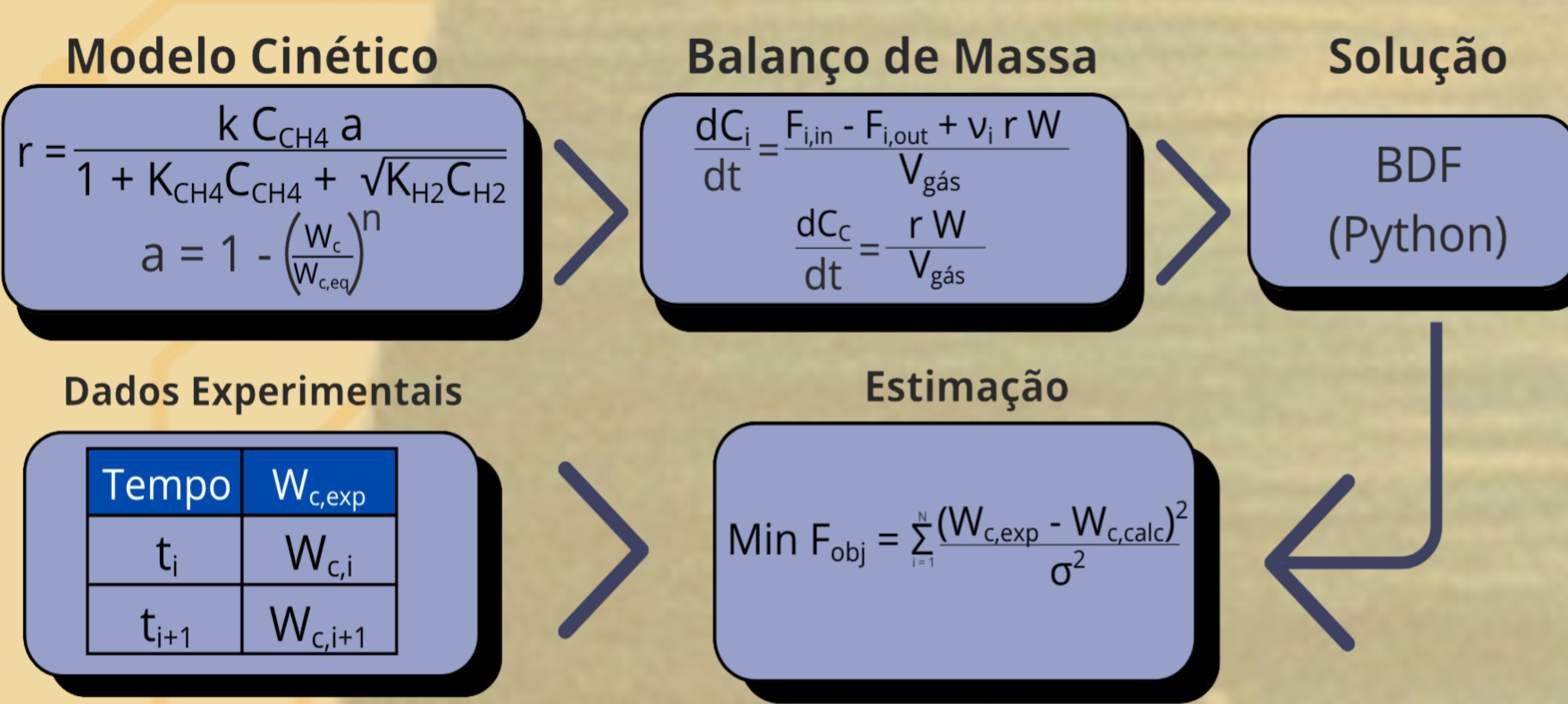


Figura 2 – Equacionamento Fonte: Os Autores (2026).

- Onde i se refere ao CH_4 e H_2 , e v ao coeficiente estequiométrico
- Variância experimental fixada** em $1,2 \times 10^{-4}$ (incerteza instrumental).

RESULTADOS E DISCUSSÃO

- Consistência estatística do ajuste foi testada e **aprovada no teste qui-quadrado** com 95% de confiança.

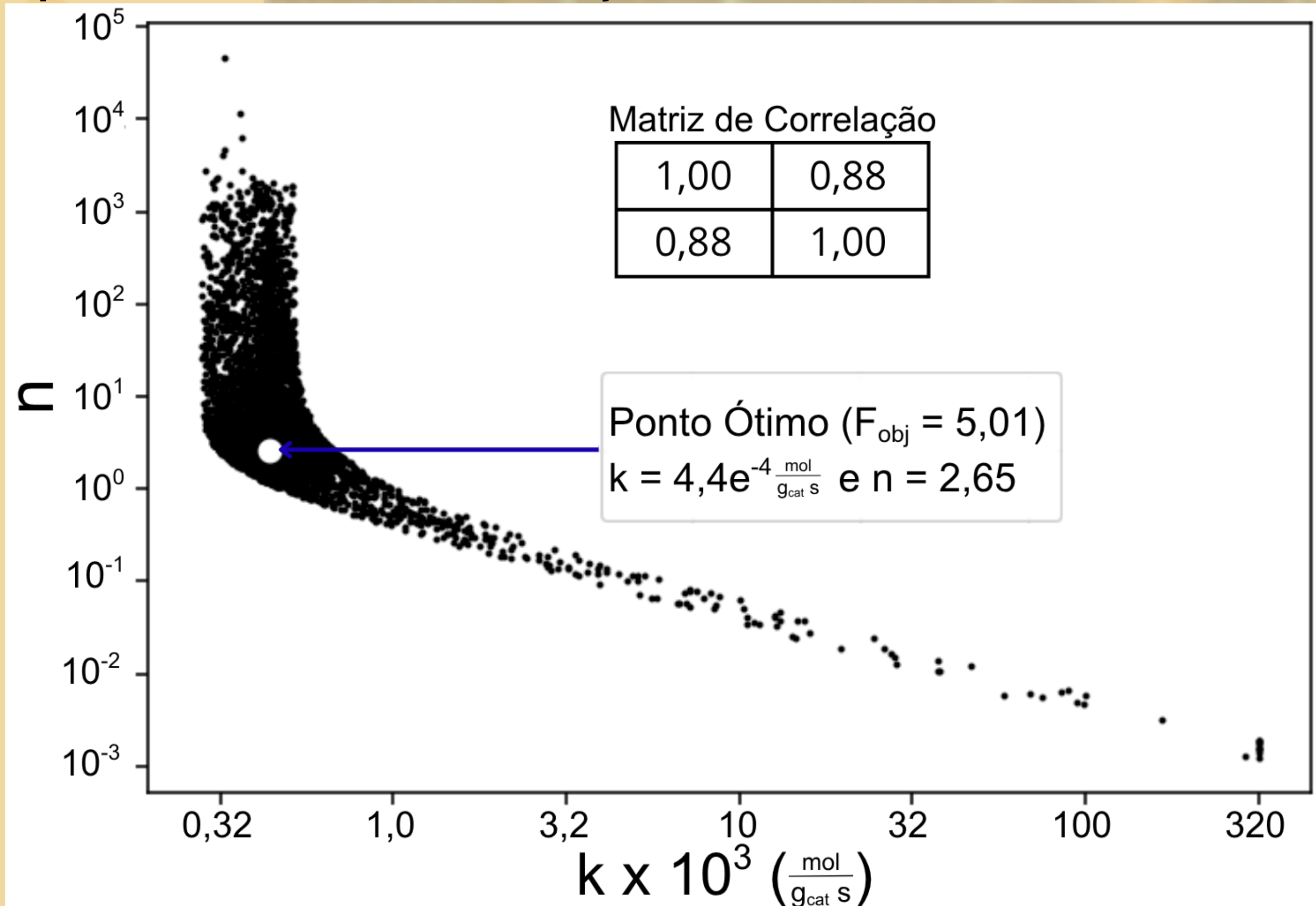


Figura 3 – Região de Confiança Fonte: Os Autores (2026).

- Resíduos do modelo comportam-se como ruído gerado por **flutuações experimentais**.
- A geometria não elíptica evidencia o **alto acoplamento** entre a constante cinética de reação (k) e o decaimento (n).

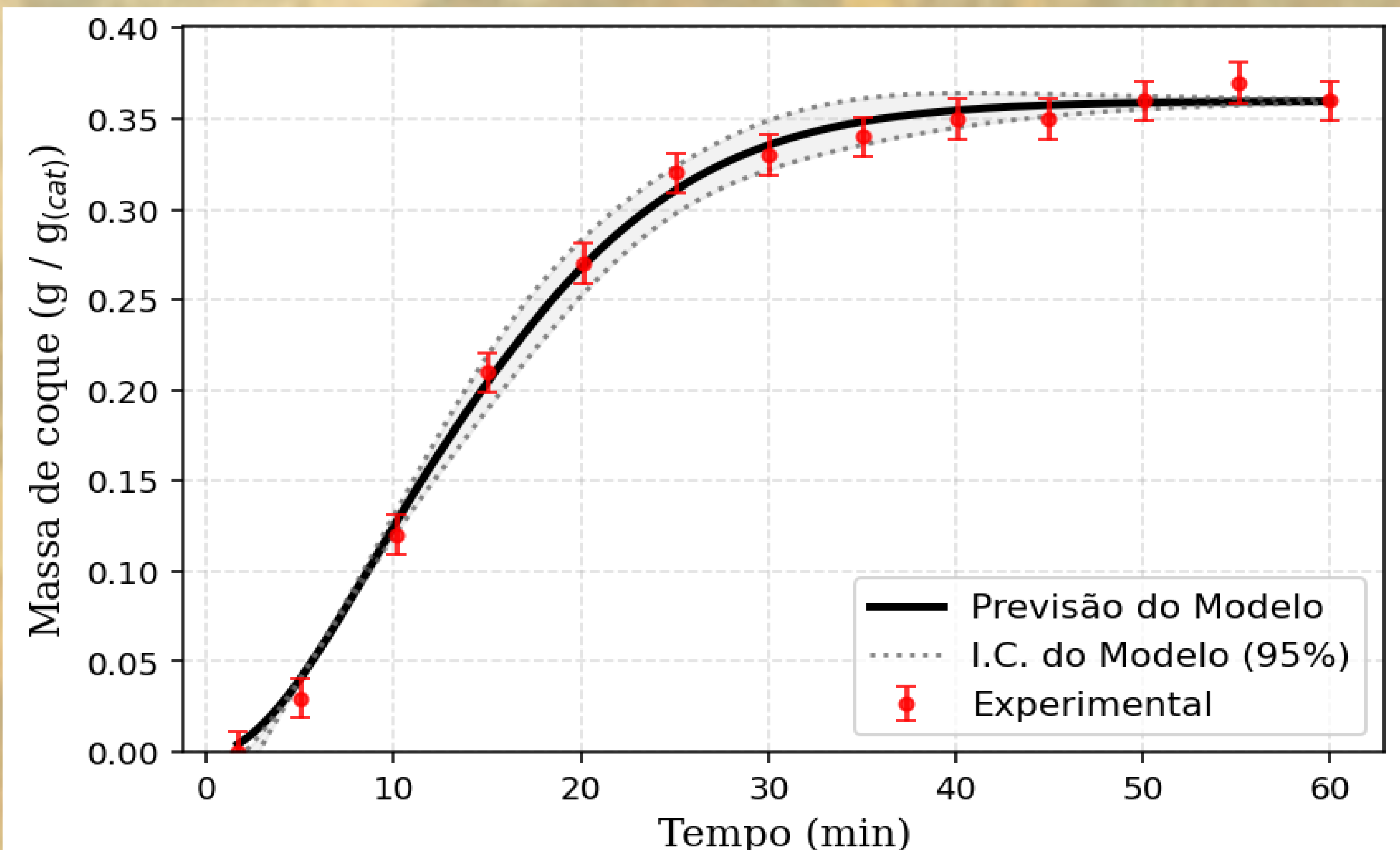


Figura 4 – Massa de Coque ao Longo do Tempo Fonte: Os Autores (2026).

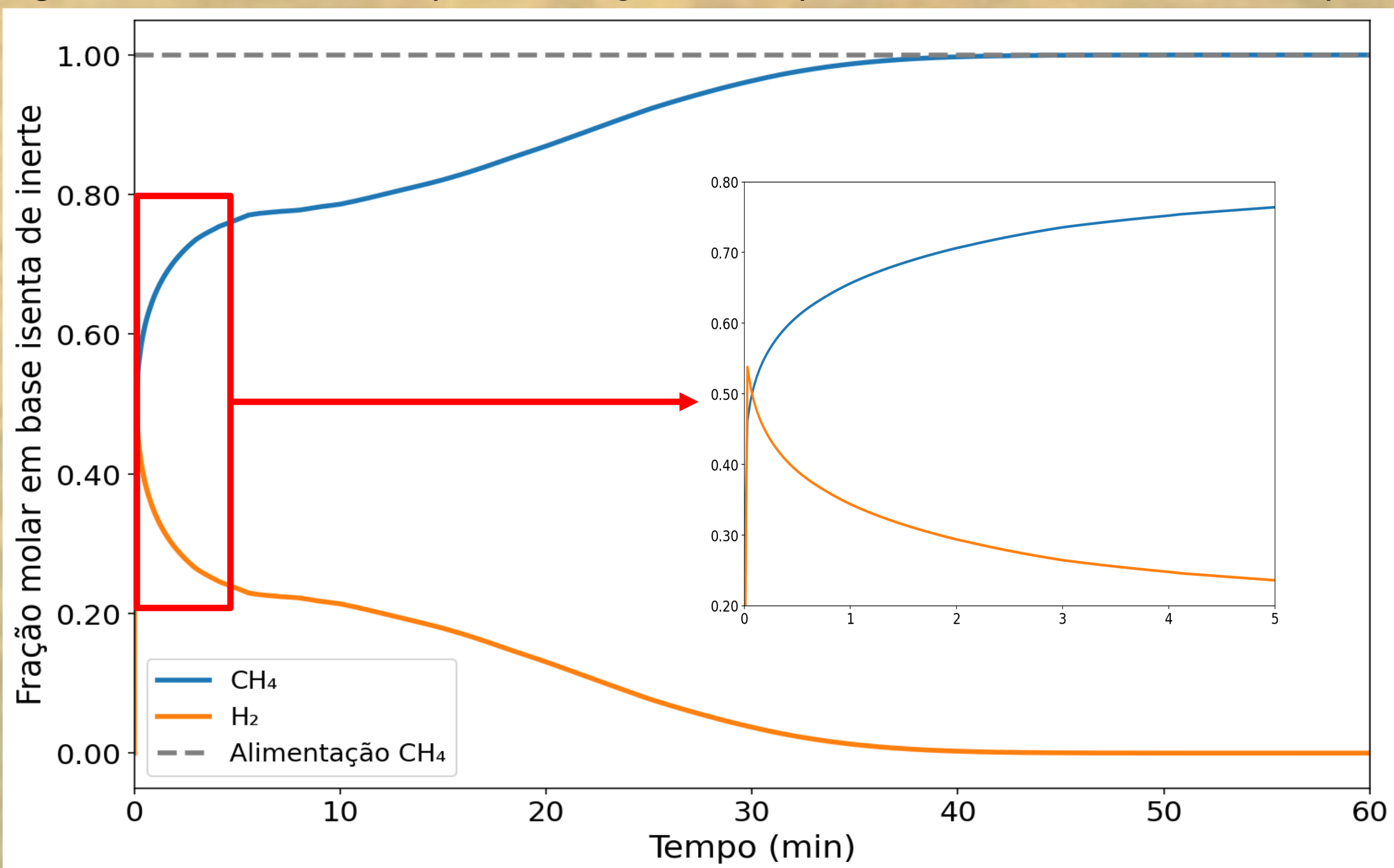


Figura 5 – Frações Molares Em Base Isenta de Inerte Fonte: Os Autores (2026).

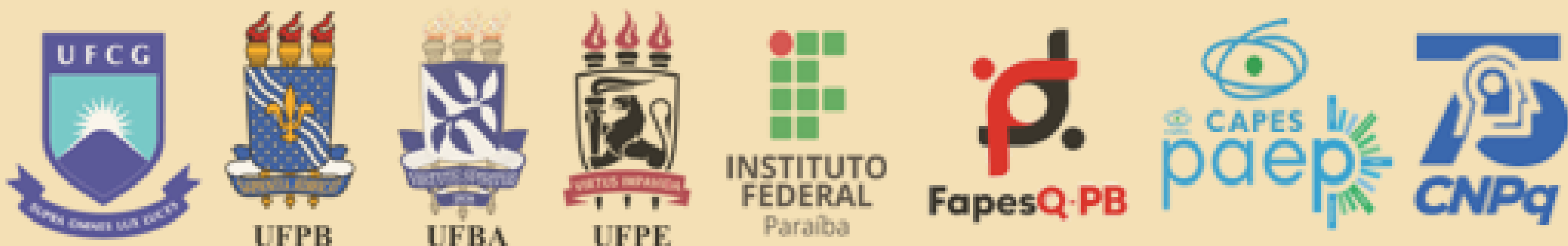
CONSIDERAÇÕES FINAIS

- O trabalho demonstrou a eficácia da modelagem e simulação transiente aplicadas à desativação catalítica por coque.
- A validação **estatística** por máxima verossimilhança foi **aprovada** no teste qui-quadrado com 95% de confiança.
- A análise revelou uma **alta correlação**, evidenciando o acoplamento entre a constante de reação e o expoente de desativação.
- A rotina desenvolvida em Python mostrou-se uma **ferramenta confiável** e segura no projeto de reatores para a Reforma Seca de Metano.

REFERÊNCIAS / AGRADECIMENTO

- O presente trabalho foi realizado com apoio financeiro do Programa de Recursos Humanos da Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis - PRH-ANP.
- L. E. G. Acevedo: Simulação e análise de um reator de reforma de metano para a produção de hidrogênio, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina, 2006.
- R. V. S. de Aquino, M. D. Mallmann, S. Arias, A. R. Rudke, J. G. A. Pacheco, S. R. S. Ferreira, B. F. Oechsler e R. de F. P. M. Moreira: Syngas production for steelmaking applications via dry reforming of methane using rare earth-containing aerogel catalysts: Evaluation of resistance to deactivation by coke deposition, Journal of the Energy Institute (123), 102275, 2025.
- H. S. Fogler: Elementos de Engenharia das Reações Químicas (4a. Ed.), LTC: 2009.
- Z. Li, Z. Huang, B. Han, Y. Wang, Z. Zhang, T. Tan, J. Xie e Y. Chen: Superior stability of Ca-La co-doped Ni/BN catalyst for biogas reforming to methanol syngas, Journal of the Energy Institute (121), 102154, 2025.
- R. Kumar, A. Kumar e A. Pal: Simulation modelling of hydrogen production from steam reforming of methane and biogas, Fuel (362), 130742, 2024.
- L. Salano, M. Vallerio, E. Moioi e F. Manenti: Industrial scale biogas reforming modelling and validation, Chemical Engineering Journal (510), 160871, 2025.
- V. S. Sandoval-Bohórquez, E. M. Morales-Valencia, C. O. Castillo-Araiza, L. M. Ballesteros-Rueda e V. G. Baldovino-Medrano: Kinetic Assessment of the Dry Reforming of Methane over a Ni-La2O3 Catalyst, ACS Catalysis (11), 11478–11493, 2021.
- M. Schwaab, E. C. Biscaia Jr., J. L. Monteiro e J. C. Pinto: Nonlinear parameter estimation through particle swarm optimization, Chemical Engineering Science (63), 1542–1552, 2008.

Apoio:



Agradecimento:



Realização:

