

Modelagem e Simulação da Reação de Bi-reforma do Metano em Reator de Leito Fixo

Leonardo Galuppo Dalazem^{1*}, Filipe Kalil da Silva Naves¹, Yasmin Milena Loth Bueno¹, Thales Uchoa da Costa Sobrinho¹, Carlos Eduardo Borba¹.

¹Universidade Estadual do Oeste do Paraná;

*Autor correspondente: leonardo.dalazem@unioeste.br

Resumo/Abstract (Helvética, tam. 12)

RESUMO

A bi-reforma do metano ganha destaque no cenário atual pelo consumo de CH₄ e CO₂, dois gases do efeito estufa, para a produção de gás de síntese com razões H₂/CO flexíveis. Este processo requer um catalisador ativo e estável em um ambiente com diversidade de compostos e altas temperaturas e pressões (T = 800-1100 K e P = 3-8 bar). Nesse sentido, a modelagem e simulação da bi-reforma do metano permite avaliar os indicadores de eficiência do processo para diferentes condições de operação, sendo relevante no cenário de aumento de escala. Neste trabalho, foi desenvolvido e simulado um modelo da bi-reforma em reator de leito fixo, considerando fenômenos de transferência de massa, energia e quantidade de movimento. Os resultados das simulações mostraram que a produção de H₂ ocorre predominantemente nas seções iniciais do reator, onde as reações de reforma possuem maiores taxas. Além disso, as simulações demonstraram grandes variações de temperatura e pressão ao longo do leito. As conversões de CH₄, CO₂ e H₂O na temperatura de 1123 K e pressão de 8 bar foram 94, 87 e 84 % respectivamente. O estudo demonstra a influência das condições operacionais e de alimentação nos indicadores do processo.

Palavras-chave: Gás de síntese, Aumento de escala, Catalisador.

ABSTRACT

Methane bi-reforming has gained prominence in the current scenario due to the consumption of CH₄ and CO₂—two major greenhouse gases—for the production of synthesis gas with flexible H₂/CO ratios. This process requires an active and stable catalyst capable of operating in a chemically diverse environment under high temperatures and pressures (T = 800–1100 K and P = 3–8 bar). In this context, modeling and simulation of the bi-reforming process allow the evaluation of efficiency indicators under different operating conditions, playing a key role in scale-up scenarios. In this study, a fixed-bed reactor model for methane bi-reforming was developed and simulated, accounting for mass, energy, and momentum transport phenomena. Simulation results showed that hydrogen production occurs predominantly in the initial sections of the reactor, where reforming reactions have the highest rates. Moreover, the simulations revealed significant variations in temperature and pressure along the catalytic bed. CH₄, CO₂, and H₂O conversions at 1123 K and 8 bar were 94%, 87%, and 84%, respectively. The study demonstrates the influence of operating and feed conditions on process performance indicators.

Keywords:

Syngas,

Scale-up,

Catalyst.

Introdução

O processo de bi-reforma do metano consiste em uma rota catalítica que emprega um conjunto de reações, incluindo a reforma a vapor (SRM), reforma a seco (DRM), reforma a vapor completa (SMRC) e a reação de deslocamento gás-água (WGS) em um único reator, visando à produção de gás de síntese. A obtenção de gás de síntese (mistura de H₂ e CO) com razão molar H₂/CO = 2 é especialmente atrativa para a produção de combustíveis renováveis via síntese Fischer-Tropsch, o que tem despertado crescente interesse nos últimos anos (1).

Nesse contexto, a bi-reforma do metano surge como uma rota tecnológica promissora para a conversão dos principais componentes do biogás, metano (CH₄) e dióxido de carbono (CO₂), ambos gases de efeito estufa, em gás de síntese com a razão molar ideal para a síntese Fischer-Tropsch. A bi-reforma envolve um conjunto de reações altamente endotérmicas ($\Delta H \geq 200$ kJ/mol), realizadas na presença de vapor d'água (H₂O), CO₂ e CH₄, sob condições operacionais específicas (T = 800–1100 K e P = 3–8 bar), visando à formação do gás de síntese com H₂/CO \approx 2 (2). Algumas das reações envolvidas estão apresentadas na Tabela 1.

Apesar de seu potencial, a bi-reforma apresenta desafios técnicos significativos, como a deposição de carbono nos catalisadores e a elevada demanda energética do processo (3). Nesse cenário, a modelagem e simulação de processos tornam-se ferramentas fundamentais, pois permitem a avaliação do desempenho do processo, a identificação de condições operacionais ótimas, a redução de custos experimentais e o suporte ao escalonamento industrial. Além disso, essas ferramentas possibilitam a análise do efeito de diferentes catalisadores no desempenho do processo, a partir das taxas de reação características de cada material catalítico (4, 5).

Os catalisadores desenvolvidos para a bi-reforma são essenciais para a superação dos desafios técnicos associados. Neste trabalho, pretende-se elaborar um modelo matemático que descreve a bi-reforma para a simulação em estudos futuros, que envolverão catalisadores compostos por suportes de óxido de cério dopados com 0%, 10% e 20% de ferro, sintetizados pela rota de Pechini e com níquel impregnado por via úmida como metal ativo.

O níquel é amplamente utilizado devido ao seu baixo custo e à capacidade de atuar em diferentes estados de oxidação, o que favorece sua participação em múltiplas etapas da reação catalítica, promovendo altas conversões dos reagentes (8). Para mitigar problemas como a baixa estabilidade térmica e a desativação catalítica, serão utilizados suportes à base de cério dopado com ferro, dada sua habilidade em manter ciclos redox reversíveis entre os pares Ce^{3+}/Ce^{4+} e Fe^{2+}/Fe^{3+} , promovendo a formação de vacâncias de oxigênio que facilitam a mobilidade desse elemento na rede cristalina (9).

Diante disso, o objetivo deste trabalho é realizar a modelagem e simulação de um reator de bi-reforma em leito fixo, avaliando o efeito das condições operacionais sobre a produção de gás de síntese com razão molar $H_2/CO \approx 2$, em escala industrial.

Tabela 1. Reações químicas envolvidas na bi-reforma do metano

Reações	Equação da reação	ΔH_{rxn}° (kJ/mol)
Reforma a vapor do metano	$CH_4 + H_2O \rightleftharpoons CO + 3H_2$	206.0
Reforma a vapor completa	$CH_4 + 2H_2O \rightleftharpoons CO_2 + 4H_2$	164.7
Reforma a seco do metano	$CH_4 + CO_2 \rightleftharpoons 2CO + 2H_2$	247.1
Deslocamento água-gás	$H_2O + CO \rightleftharpoons CO_2 + H_2$	-41.1
Decomposição do metano	$CH_4 \rightleftharpoons C + 2H_2$	74.6
Redução do CO	$CO + H_2 \rightleftharpoons C + H_2O$	-131.3
Redução do CO ₂	$CO_2 + 2H_2 \rightleftharpoons C + 2H_2O$	-90.1

Experimental

Modelo matemático

O modelo matemático foi desenvolvido para a bi-reforma do metano, em reator de leito fixo, tendo as seguintes considerações:

- Sistema pseudo-homogêneo;
- O processo está no estado estacionário;
- O reator é não isotérmico e não isobárico.
- A etapa limitante do processo é dada pela cinética intrínseca.
- Mistura radial perfeita no volume de controle.
- Variações radiais nas variáveis dependentes do modelo são desprezíveis, visto que $L/Dp > 50$ (6).
- A porosidade do leito empacotado é constante ao longo da direção axial e radial.
- Efeitos difusionais foram desprezados.
- Assumiu-se gás ideal devido as altas temperaturas.
- As partículas de catalisador são de forma e tamanho uniforme.
- Resistências a troca de calor convectiva e condutiva não variam significativamente com as variáveis do processo ($U_{tc} \approx \text{constante}$).
- Reator tubular encamisado, com sistema de aquecimento (camisa) a temperatura constante.
- CH_4 , CO_2 , H_2 , CO e H_2O são os componentes químicos avaliados no reator.
- As reações químicas avaliadas pelo modelo são: reforma a vapor (SRM), reforma a seco (DRM), reforma a vapor completa (SRMC) e deslocamento água-gás (WGS).
- Desprezou-se a formação de Coque.

Utilizando as considerações citadas acima, balanços de massa, energia e quantidade de movimento foram realizados para um volume de controle tubular infinitesimal, resultando nas equações a seguir.

- Balanço de massa para o componente j .

$$\frac{d(v C_j)}{dz} = \frac{\rho(1-\epsilon)}{\epsilon} \sum_{i=1}^{N_r} \vartheta_{ji} r_i \quad (1)$$

Onde v representa a velocidade de escoamento do fluido no leito, e C_j a concentração do componente j . Enquanto ρ e ϵ são a densidade do catalisador e a porosidade do leito, respectivamente. ϑ_{ji} representa o coeficiente estequiométrico do componente j na reação i , r_i a taxa da reação i , e N_r o número de reações químicas envolvidas.

- Balanço de energia do sistema.

$$\frac{d(v \sum_{j=1}^{N_c} C_j H_j)}{dz} = -\frac{\rho(1-\epsilon)}{\epsilon} \sum_{i=1}^{N_r} r_i \Delta H_{r_i} - \frac{4 U_{tc}}{D \epsilon} (T - T_w) \quad (2)$$

Na equação (2), H_j , ΔH_{r_i} , U_{tc} , e D são as notações utilizadas respectivamente para a entalpia do componente j ,

entalpia da reação i , coeficiente global de troca térmica, e diâmetro do leito. Além disso, T representa a variável temperatura, função da posição z no leito catalítico, e T_w a temperatura da camisa de aquecimento do reator.

(c) Balanço de quantidade de movimento.

$$\frac{dP}{dz} = -\frac{v}{D_p} \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3} \left(\frac{150(1-\varepsilon)\mu_{mist}}{D_p} + 1.75 \rho_{mist} v \right) \quad (3)$$

Onde D_p , μ_{mist} , e ρ_{mist} denotam o diâmetro da partícula de catalisador, a viscosidade de mistura do fluido, e a densidade da mistura do fluido. P é a pressão, variável dependente da posição z do leito catalítico.

(d) Equação de estado.

$$P = R T \sum_{j=1}^{N_c} C_j \quad (4)$$

N_c é o número de componentes presentes no Sistema.

(e) Relações constitutivas.

- I. Capacidade calorífica específica
- II. Massa molar de mistura
- III. Viscosidade de mistura
- IV. Densidade de mistura

(f) Condições de contorno.

$$C_j(z=0) = C_{j,in} \quad (5)$$

$$T(z=0) = T_{in} \quad (6)$$

$$v(z=0) = v_{in} \quad (7)$$

$$P(z=0) = R * T_{in} * \sum_{i=1}^{N_c} C_{j,in} \quad (8)$$

As condições de contorno na entrada do reator denotam as variáveis dependentes, concentração, temperatura, velocidade e pressão, como constantes previamente definidas em um $z=0$, dadas por $C_{j,in}$, T_{in} , v_{in} , e P_{in} respectivamente.

Taxas de reação

As leis de velocidade utilizadas neste modelo foram retiradas dos trabalhos de Xu & Froment (1989) e de Verykios (2002). Xu & Froment (1989) estudaram a cinética das reações SRM, WGS, e SMRC adotando um mecanismo de Langmuir-Hinshelwood e utilizando parâmetros cinéticos estimados a partir do catalisador Ni/MgAl₂O₃ (4). Verykios (2002) propôs a cinética da DRM utilizando catalisadores de Ni-La₂O₂CO₃ e uma taxa de reação dada pelo mecanismo de reação na superfície do catalisador (5). As taxas de reação utilizadas estão apresentadas nas Equações (9), (10), (11) e (13).

(a) SRM (R1).

$$r_1 = \frac{k_1}{p_{H_2}^{2.5}} \frac{\left(p_{CH_4} p_{H_2O} - \frac{p_{H_2}^3 p_{CO}}{K_1} \right)}{Den^2} \quad (9)$$

(b) WGS (R2).

$$r_2 = \frac{k_2}{p_{H_2}} \frac{\left(p_{CO} p_{H_2O} - \frac{p_{H_2} p_{CO_2}}{K_2} \right)}{Den^2} \quad (10)$$

(c) SMRC(R3).

$$r_3 = \frac{k_3}{p_{H_2}^{3.5}} \frac{\left(p_{CH_4} p_{H_2O}^2 - \frac{p_{H_2}^4 p_{CO_2}}{K_3} \right)}{Den^2} \quad (11)$$

Onde k_1 , k_2 , k_3 , representam as constantes cinéticas, sendo p a pressão parcial do respectivo componente subscrito e, Den representa o termo de adsorção, definido pela equação 12.

$$Den = 1 + K_{CO} p_{CO} + K_{H_2} p_{H_2} + K_{CH_4} p_{CH_4} + \frac{K_{H_2O} p_{H_2O}}{p_{H_2}} \quad (12)$$

(d) DRM (R4).

$$r_4 = \frac{K_{D1} K_{D2} K_{D3} p_{CH_4} p_{CO_2}}{K_{D1} K_{D2} p_{CH_4} p_{CO_2} + K_{D1} p_{CH_4} + K_{D2} K_{D3} p_{CO_2}} \quad (13)$$

Em que K são os coeficientes de adsorção dos componentes subscritos. Os parâmetros das leis de velocidade estão apresentados na tabela 2.

Tabela 2. Notações e valores dos parâmetros e variáveis utilizados no modelo matemático

Parâmetro	Equação/Valor	Unidade	Fonte
k_1	$3.735e17 \cdot \exp(-2.24e5/(RT))$	mol Pa ^{0.5} /(kg s)	(4)
k_2	$5.469 \cdot \exp(-67130/(RT))$	mol/(kg Pa s)	(4)
k_3	$9.018e16 \cdot \exp(-2.43e5/(RT))$	mol Pa ^{0.5} /(kg s)	(4)
K_1	$1.026e10 \cdot \exp(26830/(T)+30.11)$	Pa ²	(4)
K_2	$\exp(4400/(T)-4.063)$	-	(4)
K_3	$K_1 \cdot K_2$	Pa ²	(4)
K_{CO}	$8.12e-10 \cdot \exp(70650/T)$	Pa ⁻¹	(4)
K_{H_2}	$6.034e-14 \cdot \exp(82900/(RT))$	Pa ⁻¹	(4)
K_{CH_4}	$6.536e-9 \cdot \exp(38280/(RT))$	Pa ⁻¹	(4)
K_{H_2O}	$1.77e5 \cdot \exp(-88280/(RT))$	-	(4)
K_{D1}	$2.61e-3 \cdot \exp(-4300/T)$	mol/(kg Pa s)	(5)
K_{D2}	$5.17e-8 \cdot \exp(8700/T)$	Pa ⁻¹	(5)
K_{D3}	$535 \cdot \exp(-7500/T)$	mol/(kg s)	(5)

Resolução e simulação do modelo

O sistema de equações que compõe o modelo é dado pelas equações (1) a (4), e pelas condições de contorno (equações (5) a (8)). Ao todo, o sistema é composto por 8 equações independentes, dadas pelo balanço de massa de

cada um dos 5 componentes, balanço de energia, balanço de quantidade de movimento e equação de estado. As variáveis dependentes da posição no reator são: concentração de cada um dos 5 componentes, a temperatura, a velocidade e a pressão. A resolução do modelo matemático foi realizada no software matemático Maple, utilizando o método de Runge-Kutta-Feldberg Fenberg 4° e 5° ordem. O modelo foi simulado nas condições listadas na tabela 3.

Tabela 3. Parâmetros de operação utilizados nas simulações

Parâmetros	Valores
Comprimento do leito	6 m
Diâmetro do leito	0.0254 m
Diâmetro da partícula de catalisador	1 mm
Densidade do catalisador	1200 kg/m ³
Porosidade do leito	0.7
Temperatura de alimentação	913-1123 K
Temperatura da camisa	913-1123 K
Pressão de alimentação	8 atm
Fração molar de CH ₄ na alimentação	0.29-0.44
Fração molar de CO ₂ na alimentação	0.1-0.44
Fração molar de H ₂ O na alimentação	0.26-0.6
Vazão volumétrica de alimentação	45 NL/min
Coefficiente global de troca térmica	60 W/(m ² K)

Resultados e Discussão

Através das simulações avaliou-se o reator de bi-reforma em leito fixo, quanto aos perfis de concentração, temperatura e pressão ao longo do leito, razão molar de H₂/CO e conversão dos reagentes na saída do leito em diferentes temperaturas.

Perfil de concentração

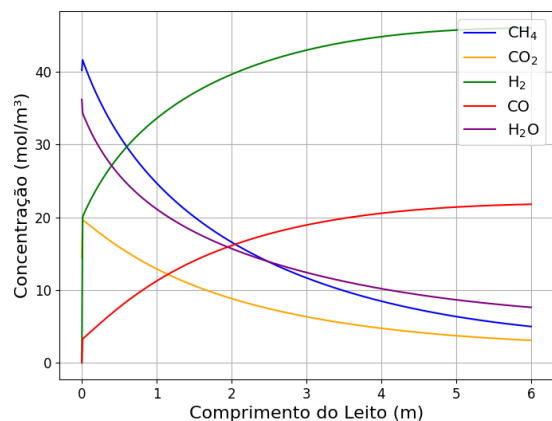


Figura 1. Perfil de concentração dos componentes ao longo do leito catalítico. Condições de alimentação: 1073 K ($T_{in}=T_w$), 8 atm, CH₄:CO₂:H₂O = 0.44:0.16:0.4, 45 NL/m³.

A concentração dos componentes ao longo do leito catalítico apresentada pela Figura 1 foi obtida utilizando a simulação do modelo nas condições de alimentação de temperatura e pressão de 1073 K e 8 atm, e nas demais condições de operação citadas na Tabela 2. Na entrada do reator, H₂ e CO são formados rapidamente pelas reações de reforma, principalmente pela SRM, enquanto a reação de WGS no sentido reverso forma CO₂ e a reação reversa de reforma a vapor completa produz metano. Ao longo do reator H₂ e CO continuam sendo produzidos, enquanto CH₄, H₂O e CO₂ são convertidos, através das reações de DRM e SEM.

Perfil de temperatura e pressão

O perfil de temperatura ao longo do reator de bi-reforma é apresentado na Figura 2. Observa-se uma queda significativa da temperatura no início do reator, indo de 1073 K a 825 K, devido as reações altamente endotérmicas de reforma (SRM e DRM) que consomem energia do leito em uma taxa maior que a taxa de calor fornecida pela camisa. Ao longo do reator a temperatura aumenta, pelo efeito da camisa, até ultrapassar a temperatura de 1073 K na saída do reator, isto se deve ao fornecimento de calor ao meio reacional proporcionado pela reação WGS, que no sentido direto é exotérmica, ocorrendo em proporções maiores que as reações de reforma.

A pressão diminui ao longo do reator, devido a resistência ao escoamento proporcionada pelas partículas do catalisador e, o aumento da velocidade pelo aumento do número de moléculas formadas através das reações de reforma. As simulações evidenciaram elevada sensibilidade da perda de carga em função das variações no diâmetro das partículas catalíticas. O valor adotado para o tamanho de partícula corresponde a uma média dos dados reportados na literatura, referentes a estudos de modelagem e simulação e estudos experimentais de processos de reforma do metano em escala ampliada.

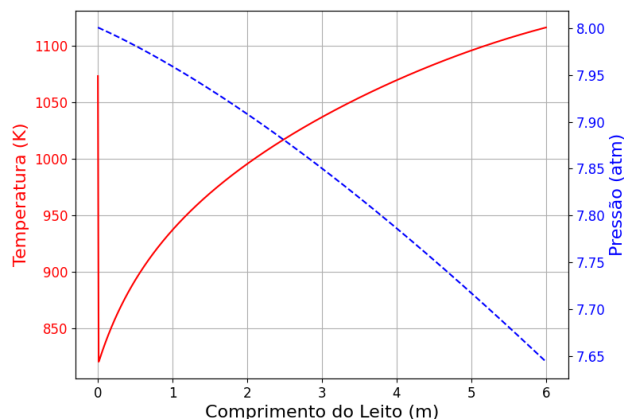


Figura 2. Perfil de temperatura e pressão ao longo do leito catalítico. Condições de alimentação: 1073 K ($T_{in}=T_w$), 8 atm, $CH_4:CO_2:H_2O = 0.44:0.16:0.4$, 45 NL/m³.

Perfil de razão molar de gás de síntese H_2/CO

No perfil da razão molar de gás de síntese H_2/CO , apresentado na Figura 3, observa-se a diminuição da razão molar desse gás ao longo do reator, uma vez que no início do reator as reações de reforma a vapor e a reforma a vapor completa produzem grande quantidade de H_2 quando comparada a quantidade de CO . No entanto, grandes quantidades de H_2 deslocam o equilíbrio químico da reação de WGS no sentido da formação de CO , diminuindo a razão H_2/CO ao longo do leito.

Rouhandeh e colaboradores (2025) estudaram a simulação e otimização da produção de metanol via bi-reforma do metano. Em seus resultados, obtiveram as condições ideais de alimentação e operação para a razão adequada de gás de síntese na produção de metanol, igual a 2.08. As condições encontradas são de 1073K, 5 bar, e $CH_4:CO_2:H_2O = 0.44:0.16:0.4$ (7). Nestas condições, a simulação do modelo desenvolvido neste trabalho atingiu a razão H_2/CO de 2.11, apresentando conformidade com o estudo de Rouhandeh e colaboradores (2025).

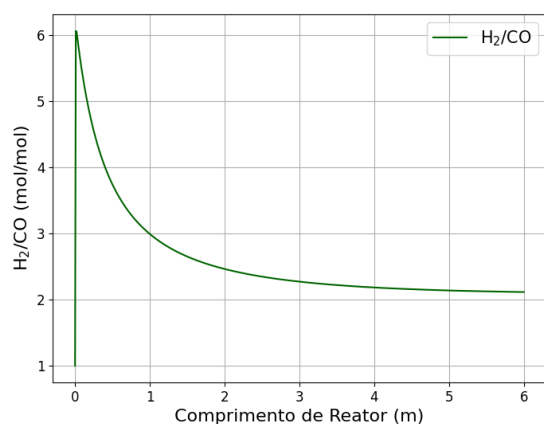


Figura 3. Perfil de razão H_2/CO ao longo do leito catalítico. Condições de alimentação: 1073 K ($T_{in}=T_w$), 8 atm, $CH_4:CO_2:H_2O = 0.44:0.16:0.4$, 45 NL/m³.

Razão molar de gás de síntese H_2/CO em função da temperatura

O efeito da temperatura na razão H_2/CO é apresentado pela figura 4. Em temperaturas baixas, a reação de WGS é favorecida, nestas condições, CO é consumido ao reagir com H_2O , formando H_2 , aumentando a razão H_2/CO . Com o aumento da temperatura tem-se o favorecimento das reações da reforma, que produzem grande quantidade de H_2 no sistema. No entanto, o excesso de H_2 e altas temperaturas favorecem o sentido inverso do equilíbrio químico da reação de WGS, proporcionando a reação do

H_2 com o CO_2 , formando H_2O e CO , diminuindo a razão H_2/CO pela produção de CO .

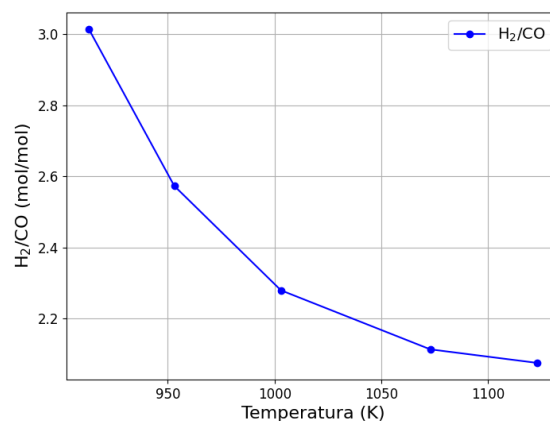


Figura 4. Efeito da temperatura de operação na razão de H_2/CO . Condições de alimentação: 1073 K ($T_{in}=T_w$), 8 atm, $CH_4:CO_2:H_2O = 0.44:0.16:0.4$, 45 NL/m³.

Conversões em função da temperatura

O efeito da temperatura na conversão dos componentes CH_4 , H_2O e CO_2 , na saída do reator é demonstrado pela figura 5. As conversões de CH_4 , H_2O e CO_2 aumentam com a temperatura, devido ao favorecimento das reações de reforma. Contudo a conversão de CO_2 é baixa em temperaturas menores que 950 °C, devido ao favorecimento da reação de WGS, que ocorre no sentido da formação de H_2 e CO_2 . Desta forma em temperaturas acima de 1050 K, a conversão de CO_2 é estabilizada devido ao equilíbrio das taxas de reações de DRM, SMRC e WGS.

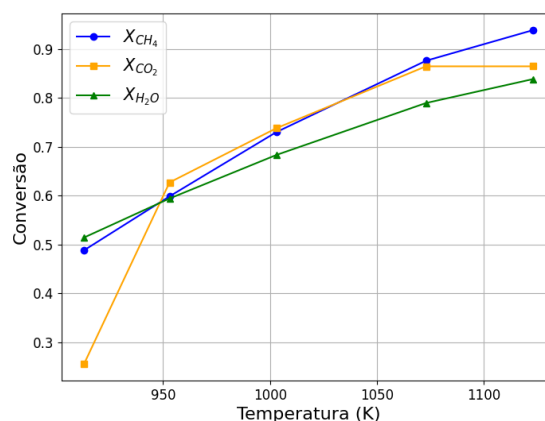


Figura 5. Efeito da temperatura na conversão dos reagentes. Condições de alimentação: 1073 K ($T_{in}=T_w$), 8 atm, $CH_4:CO_2:H_2O = 0.44:0.16:0.4$, 45 NL/m³.

Efeito da alimentação na razão molar de gás de síntese H_2/CO

A figura 6 (a) demonstra a simulação do efeito da quantidade de água alimentada no reator de leito fixo da bi-reforma na razão de gás de síntese produzido. Na figura, observa-se que a razão H_2/CO possui uma correlação positiva com o aumento da fração de H_2O . Esse comportamento é justificado pelo favorecimento da SRM e da SMRC, que possuem equilíbrios químicos favorecidos no sentido direto pelas maiores quantidades de vapor de água. Dessa forma, o metano presente no sistema é majoritariamente consumido por estas reações, que possuem maiores estequiometrias de formação H_2 quando comparadas as outras reações.

Já a figura 6 (b) denota o efeito da quantidade de CO_2 alimentado sobre a razão de gás de síntese, que de forma oposta ao aumento da quantidade de H_2O , diminui a razão H_2/CO . O aumento da fração de CO_2 no sistema favorece a DRM, que possui uma estequiometria de produção de H_2 e CO de 2:2. Logo o metano é majoritariamente consumido pela DRM, que produz grandes quantidades de CO quando comparado a outras reações, impactando na diminuição da razão de gás de síntese.

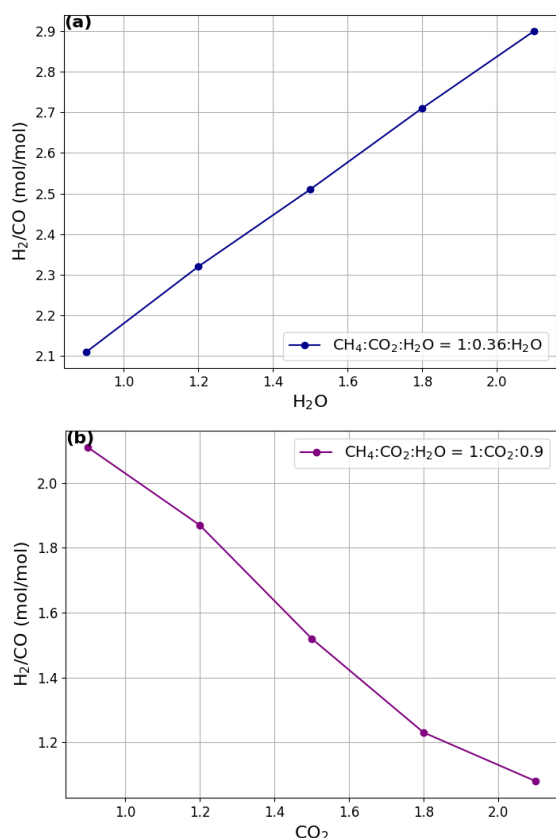


Figura 6. Efeito da proporção de H_2O (a) e CO_2 (b) na razão de H_2/CO . Condições de alimentação: 1073 K ($T_m=T_w$), 8 atm, 45 NL/m³.

Além disso, a composição de alimentação é um fator ligado a ocorrência de reações laterais, como a deposição

de carbono no catalisador (5), que não foram consideradas neste trabalho. Nesse sentido, o modelo desenvolvido apresentou algumas limitações, como a desconsideração de fatores de desativação do catalisador, e a utilização de dados cinéticos de dois catalisadores distintos, devido à ausência de dados cinéticos disponíveis na literatura para todas as reações envolvidas na bi-reforma utilizando um único catalisador.

Conclusões

As simulações do modelo da bi-reforma do metano em leito fixo demonstraram os efeitos das condições operacionais no processo. O perfil de concentração dos componentes ao longo do comprimento do reator revelou o impacto das altas taxas de reação da SRM no início do reator, onde observa-se grande produção de H_2 . Aliado a essa grande produção no início do reator, o perfil de temperatura demonstra grande queda, elucidando o caráter endotérmico da bi-reforma. O aumento da temperatura de operação provocou maiores conversões de CH_4 , CO_2 e H_2O devido ao favorecimento das reações de reforma. A utilização da razão de gás de síntese (H_2/CO) como um indicador de eficiência do processo demonstrou a flexibilidade de produção de gás de síntese da bi-reforma perante as variações nas condições de alimentação, como a temperatura e a quantidade de H_2O e CO_2 .

Agradecimentos

Agradecimento a toda a equipe de pesquisa do Laboratório de Biocombustíveis e Simulação de Processos (LaBioSimP) pelo incentivo, apoio e colaboração ao longo do desenvolvimento deste trabalho.

Referências

1. N.M.V. Ramos; O. Del-Mazo-Alvarado; A. Bonilla-Petriciolet; L.F.L. Luz Jr; M.L. Corazza, , *Chem. Eng. Process. Process Intensif.* **2024**, 199, 109758.
2. N. Kumar; M. Shojae; J.J. Spivey, *Curr. Opin. Chem. Eng.* **2015**, 9, 8–15.
3. R.B. Duarte; J.L.C.W. Pimenta; L.M.M. Jorge, *Int. J. Hydrogen Energy* **2024**, 85, 210–227.
4. J. Xu; G.F. Froment, *AIChE J.* **1989**, 35, 88–96.
5. X.E. Verykios, *Int. J. Hydrogen Energy* **2003**, 28, 1045–1063.
6. G.F. Froment; K.B. Bischoff, *Chemical Reactor Analysis and Design*, 2nd ed., John Wiley & Sons, New York, **1990**.
7. H. Rouhandeh; A. Behroozsarand, *Int. J. Hydrogen Energy*, **2025**, 101, 1161–1171.
8. S.M.W. ul Hasnain; *et al.*, *J. Clean. Prod.*, **2024**, 434, 139904.
9. T. Tsoncheva; *et al.*, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2022**, 14(1), 873–890.