



Solubilidade de asfaltenos e modelos termodinâmico: uma análise bibliométrica com ênfase no modelo UNIFAC
Asphaltene solubility and thermodynamic models: a bibliometric analysis with emphasis on the UNIFAC model

Júlia Almeida de Abreu Moraes^{1,*}, Josinaldo de Oliveira Dias², Audrei Gimenez Barañano², Mariana Ricken Barbosa³, Silvio Luiz de Mello Junqueira⁴.

¹ Aluna do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal do Espírito Santo – Ufes, campus Alegre, ES, Brasil

² Professor(a) do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal do Espírito Santo – Ufes, campus Alegre, ES, Brasil

³ Professora do Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Espírito Santo – Ufes, campus Alegre, ES, Brasil

⁴ Professor do Departamento Acadêmico de Mecânica, Universidade Tecnológica Federal do Paraná – UTFPR, campus Curitiba, PR, Brasil

*Autor para correspondência, E-mail: julia.abreumoraes14@gmail.com

Received: 15 July 2028 | Accepted: 30 August 2026 | Published online: 02 September 2026

Resumo: A precipitação de asfaltenos constitui um dos principais desafios operacionais da indústria de petróleo e gás, podendo ocasionar obstrução de tubulações, formação de borras orgânicas e aumento dos custos de produção. Apesar dos avanços na modelagem termodinâmica, não foram encontrados estudos bibliométricos que mapeiem de forma sistemática a evolução dos modelos preditivos, sua influência científica, as redes de colaboração e as tendências emergentes, especialmente envolvendo o modelo UNIFAC. Assim, este trabalho realizou uma análise bibliométrica da produção científica sobre solubilidade de asfaltenos e modelos termodinâmicos no período de 2016 a 2026. A busca foi conduzida na base Scopus por meio de estratégia sistemática, resultando em 238 artigos. Os metadados foram processados no pacote Bibliometrix, na linguagem R, complementados por análises gráficas em *Python*, contemplando indicadores de produtividade, impacto científico, redes de colaboração, coocorrência de palavras-chave e evolução temática. Os resultados evidenciaram crescimento contínuo da produção científica, predominância de periódicos especializados em energia e engenharia química, baixa ocorrência de estudos envolvendo o modelo UNIFAC e reduzida integração entre modelagem termodinâmica e técnicas de *Machine Learning*. Conclui-se que abordagens híbridas, associando fundamentos termodinâmicos e métodos orientados por dados, representam uma promissora oportunidade para pesquisas futuras. Palavras-chave: Asfaltenos; Solubilidade; Modelos Termodinâmicos; UNIFAC; Bibliometria.

Abstract: Asphaltene precipitation is one of the major operational challenges in the oil and gas industry, as it can lead to pipeline blockage, the formation of organic deposits and increased production costs. Despite advances in thermodynamics modeling, no bibliometric studies were found that systematically map the evolution of predictive models, their scientific impact, collaboration networks and emerging research trends, particularly those involving the UNIFAC model. Therefore, this study conducted a bibliometric analysis of the scientific literature on asphaltene solubility and thermodynamic models published between 2016 and 2026. A systematic search was performed in the Scopus database, resulting in a dataset of 238 articles. The metadata were processed using Bibliometrix package in R programming language and complemented by graphical analyses performed in Python. The analysis included productivity indicators, scientific impact, collaboration networks, keyword co-occurrence and thematic evolution. The results revealed a continuous growth in scientific output, a predominance of journals specializing in energy and chemical engineering, a limited number of studies involving the UNIFAC model, and limited integration between thermodynamic modeling and machine learning techniques. It is concluded that hybrid approaches

combining thermodynamic principles with data-driven methods represent a promising dirextion for future research.

Keywords: Asphaltenes; Solubility; Thermodynamic Models; UNIFAC; Bibliometrics.

1 Introdução

O petróleo é uma mistura complexa de diferentes moléculas, em que os asfaltenos representam a fração mais pesada e polar (Islam et al., 2018). Os asfaltenos são definidos de forma estrutural por sua classe de solubilidade, sendo componentes solúveis em hidrocarbonetos aromáticos, como o tolueno, mas insolúveis em alcanos de cadeia pequena, como o pentano e o heptano (Hasan et al., 2024). Devido à sua natureza complexa, que inclui anéis policondensados e cadeias alquílicas periféricas, os asfaltenos tendem a formar nanoagregados e clusters em solução (Islam et al., 2018).

A precipitação de asfaltenos constitui um dos desafios operacionais mais críticos para a indústria petrolífera global, podendo ocorrer durante a produção, transporte ou processamento devido a mudanças nas propriedades físico-químicas do fluido, sendo elas composição, temperatura e pressão (Efimov et al., 2023). Esse fenômeno resulta frequentemente na formação de borras oleosas no fundo de tanques de armazenamento e na obstrução de tubulações, gerando perdas econômicas e impactos ambientais negativos (Hasan et al., 2024). Buscando diminuir esses problemas, o desenvolvimento de modelos termodinâmicos robustos é essencial para prever o início da precipitação e o comportamento de fases em sistemas de hidrocarbonetos (Islam et al., 2018).

No decorrer dos últimos anos, diversas abordagens foram aplicadas para descrever o comportamento termodinâmico dos asfaltenos, incluindo modelos baseados na teoria de soluções regulares, equações de estado e métodos de contribuição de grupos, como o UNIFAC (Efimov et al., 2023). Modelos híbridos e preditivos, como o NRTL-SAC e o COSMO-SAC em que SAC significa Segment Activity Coefficient (Coeficiente de Atividade por Segmento), demonstram eficácia na correlação de dados experimentais, permitindo representar as interações moleculares sem a necessidade de conhecer a estrutura química exata de cada componente do petróleo (Islam et al., 2018).

Ainda que o uso dos modelos termodinâmicos seja fundamental para prever a estabilidade de sistema asfáltênicos e mitigar perdas econômicas, a diversidade estrutural desse "grupo de moléculas" dificulta uma representação teórica universal e precisa (Islam et al., 2018). Portanto, o desafio reside na complexidade de prever o comportamento de fases sob condições variadas, especialmente durante a mistura de componentes incompatíveis, o que exige o aperfeiçoamento constante das ferramentas de modelagem utilizadas atualmente.

Embora os modelos termodinâmicos para a precipitação de asfaltenos tenham sido investigados, não foram identificados estudos bibliométricos específicos que mapearam sistematicamente a evolução dos modelos preditivos, sua influência científica, colaborações em pesquisa e tendências computacionais emergentes. Diante dessa quantidade de dados, torna-se difícil acompanhar as inovações e tendências de modelagem apenas por meio de revisões tradicionais. Este método permite mapear o progresso científico, identificando as instituições e autores mais influentes, além de apontar lacunas como modelos subexplorados (Ucella-Filho et al., 2022). Assim, a pesquisa fornece um roteiro para futuras investigações, auxiliando na tomada de decisão mais eficientes.

Sendo assim, esta pesquisa visa realizar uma análise bibliométrica detalhada da produção científica global na modelagem termodinâmica de asfaltenos no período de 2016 a 2026, visando identificar tendências emergentes. Por meio da análise quantitativa de 238 artigos, busca-se identificar regiões, instituições, periódicos e autores mais influentes, além de apontar lacunas científicas críticas relacionadas à eficácia de modelos como UNIFAC e PC-SAFT, na previsão da precipitação de asfaltenos. Além disso, este trabalho pretende oferecer um plano estratégico para pesquisas subsequentes, contribuindo para o estabelecimento de colaborações acadêmicas e para a melhoria de procedimentos industriais com o objetivo de reduzir problemas operacionais no complexo industrial de petróleo e gás natural.

2 Metodologia

Esta pesquisa configurou-se como um estudo de caráter exploratório e descritivo, que tem como alicerce uma revisão bibliográfica sistemática com apoio de técnicas de bibliometria computacional. Entendendo as frentes tecnológicas relacionadas à modelagem termodinâmica de asfaltenos no período de 2016 a 2026, sendo a busca realizada em maio de 2026 e os artigos considerados que foram publicados até essa data. A Figura 1 detalha a estruturação dos procedimentos metodológicos.

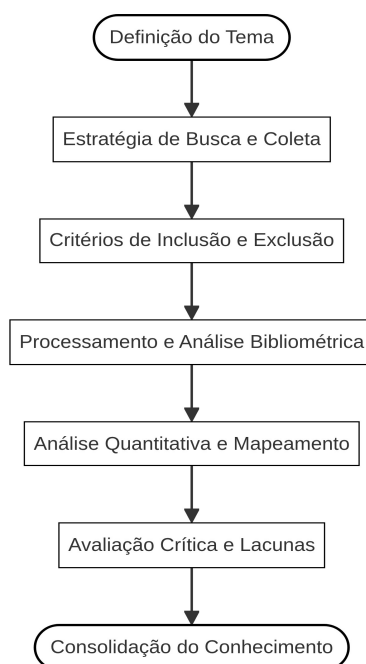


Figura 1. Etapas da metodologia.

2.1 Estratégia de busca e coleta de dados

A coleta de dados bibliográficos e etapa exploratória ocorreram nas bases científicas indexadas Web of Science e Scopus, reconhecidas por suas coberturas de publicações submetidas à revisão por pares. A Scopus foi selecionada para a etapa de coleta por apresentar o maior número de registros pertinentes aos descritores empregados, além de disponibilizar metadados compatíveis com as ferramentas bibliométricas utilizadas. Em maio de 2026 foram aplicadas as expressões "asphaltene" AND ("thermodynamic model" OR "UNIFAC") aplicada aos campos de título, resumo e palavras-chave.

2.2 Critérios de inclusão e exclusão

Para assegurar a especificidade da revisão, que abrangeu 238 artigos, adotou-se os critérios de incluir artigos originais e de revisão publicados entre 2016 a 2026 com ênfase em asfaltenos e em modelagem termodinâmica, principalmente UNIFAC. Além de critérios para excluir resumos de congressos sem texto completo, estudos voltados exclusivamente à caracterização experimental sem a implementação de modelos preditivos e registros duplicados.

2.3 Processamento e análise bibliométrica

Para o tratamento e a visualização dos dados obtidos, utilizou-se o pacote Bibliometrix na versão 0.3.0, desenvolvido para a linguagem de programação R, operando-se por meio da interface gráfica Biblioshiny. O tratamento e a análise dos dados foram organizados em fases subseqüentes, começando pela extração dos metadados (título, autores, ano, citações e periódico), os quais foram salvos em arquivo .csv. Na etapa de análise quantitativa, foram estimados indicadores de produtividade anual (*Annual Scientific Production*) para detectar picos de interesse científico, além de mensurar a importância das fontes por meio do fator de impacto e do *Journal Citation Reports* (JCR). Realizou-se o mapeamento de redes, incluindo a investigação da coocorrência de palavras-chave e das redes de colaboração entre instituições e países, visando identificar os principais clusters temáticos do campo.

Na fase final, procedeu-se à identificação das lacunas e à consolidação do conhecimento por meio de uma avaliação crítica que destacou research gaps, como a necessidade de modelos mais robustos para solventes específicos e problemas relacionados a misturas de petróleo incompatíveis, visando conciliar o progresso científico com as exigências operacionais de eficiência e sustentabilidade da indústria petrolífera.

A fim de aprimorar a visualização dos dados coletados, e com o apoio da interface Biblioshiny, foram realizadas adaptações nos gráficos por meio da linguagem de programação Python.

3 Resultados e discussões

A investigação a partir da pesquisa realizada no scopus, composta por 238 artigos publicados entre 2016 e 2026, revelou um campo de estudo em evolução constante e com base técnica consolidada (Lucas et al., 2023). A produção científica anual demonstrou crescimento sustentado, alcançando seu ponto máximo de produtividade por volta de 2020, que pode ser observado na Figura 2, segundo as métricas de *Annual Scientific Production* (Lucas et al., 2023). Esse interesse persistente decorre da necessidade da indústria petrolífera em atenuar problemas operacionais graves, como obstrução de tubulações e formações de borras orgânicas, que contém asfaltenos, em plataformas de petróleo (Kumar, 2023).

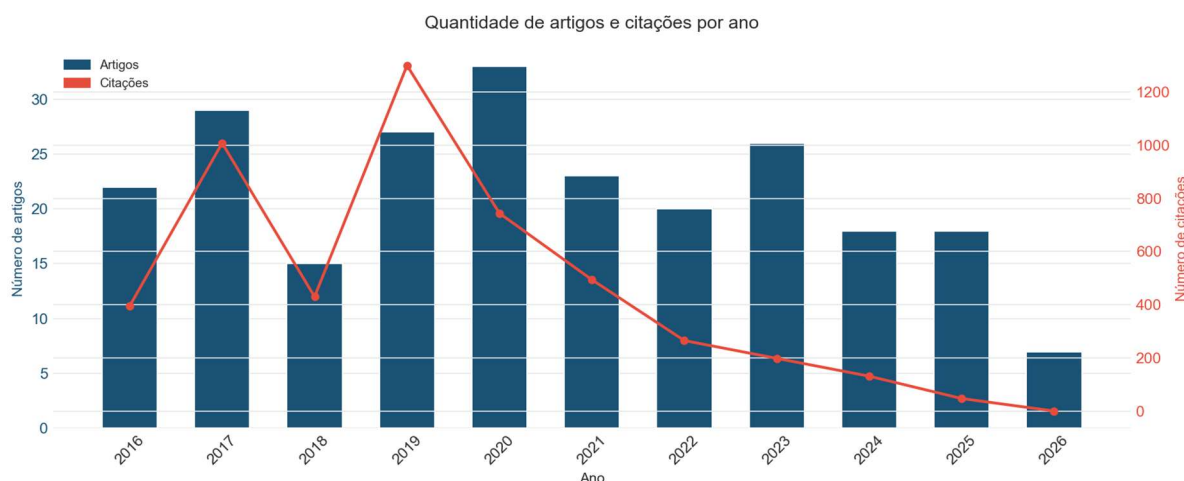


Figura 2. Artigos e citações publicados por ano.

Embora o ano que mais teve citações ter sido o de 2019, o artigo mais citado foi do ano de 2017. Este foi o artigo Xu and Wang (2017), publicado na revista *Fuel*, que totaliza 578 citações e firmou-se como o documento mais influente no período analisado por ser um estudo pioneiro e abrangente na aplicação da dinâmica molecular. A manutenção de um número significativo de publicações nos anos seguintes sugere que, embora as bases teóricas tenham sido consolidadas entre 2017 e 2019, a procura por modelos preditivos mais sofisticados, por exemplo, aqueles apoiados em simulações moleculares, permanece uma área de investigação ativa (Huang et al., 2026).

Os estudos sobre a termodinâmica dos asfaltenos estão concentrados em periódicos de prestígio nas áreas de energia e engenharia química. A revista *Energy and Fuels* sobressai como a principal fonte, reunindo o maior número de artigos, conforme a Figura 3, e o maior impacto local segundo o H-index de 16, isso acontece porque essa revista é o veículo oficial da *American Chemical Society* (ACS) dedicada à interface entre a química e a engenharia de energia, isso demonstra que o desenvolvimento de modelos termodinâmicos permanece fortemente associado às demandas da indústria de energia (Wu, 2021). Outras revistas ou periódicos fundamentais são o *Journal of Petroleum Science and Engineering*, *Fluid Phase Equilibria* e *Fuel*, o que demonstra que a discussão sobre asfaltenos e modelos termodinâmicos oscila entre a aplicação prática em campos petrolíferos e o rigor físico-químico do equilíbrio de fases (Efimov et al., 2023).

Em se tratando de autoria, Oliver C. Mullins aparece como o autor que mais produz, com 32 trabalhos no período, seguido por Soraya S. Betancourt com 18 e Andrew Pomerantz com 13. A influência desses autores é intrinsecamente ligada ao desenvolvimento do modelo Yen-Mullins e a avanços na caracterização geoquímica, elementos essenciais para parametrizar modelos termodinâmicos modernos (Omrani et al., 2025).

A maior produção científica pertence a países com indústrias petrolíferas consolidadas e elevada capacidade de investimento em P&D. Os Estados Unidos lideram o quadro com 1.531 citações, seguido pelo Canadá (995) e pelo Irã (537), como pode ser visto na Figura 4. Já a evolução temporal da produção por país evidencia que a China registrou um crescimento rápido a partir de 2022. Esse comportamento pode estar associado ao fortalecimento de investimentos em infraestrutura computacional e à ampliação de colaborações internacionais (Lai et al., 2024).

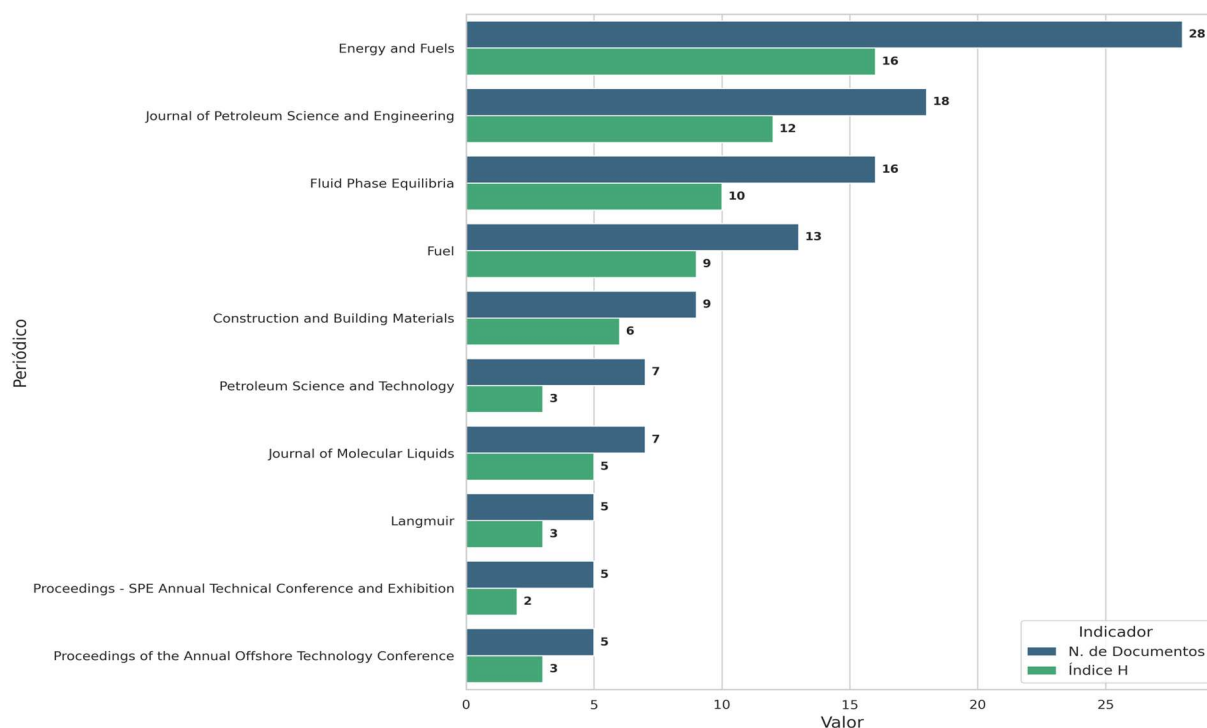


Figura 3. Revistas mais relevantes e de maior impacto local medido pelo H-index.

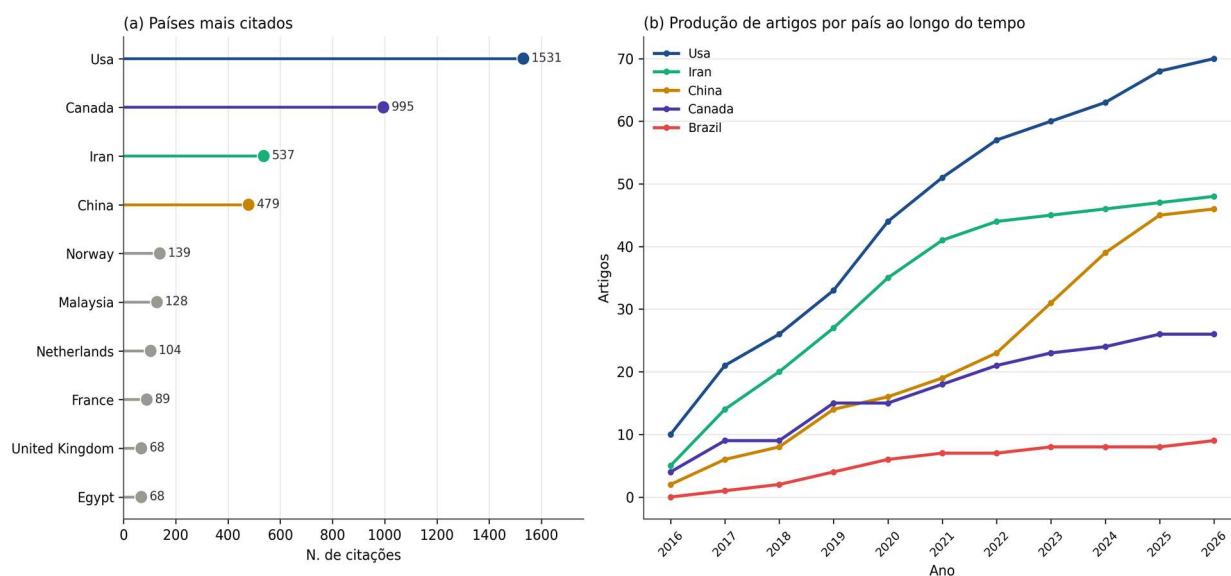


Figura 4. Países mais citados e produção de artigos por país ao longo do tempo.

Com relação às parcerias, presente na Figura 5, apontam para um ecossistema integrado, no qual instituições da China e dos Estados Unidos cooperam entre si, o que gerou um grande volume de publicações metodologias avançadas, como o modelo PC-SAFT.

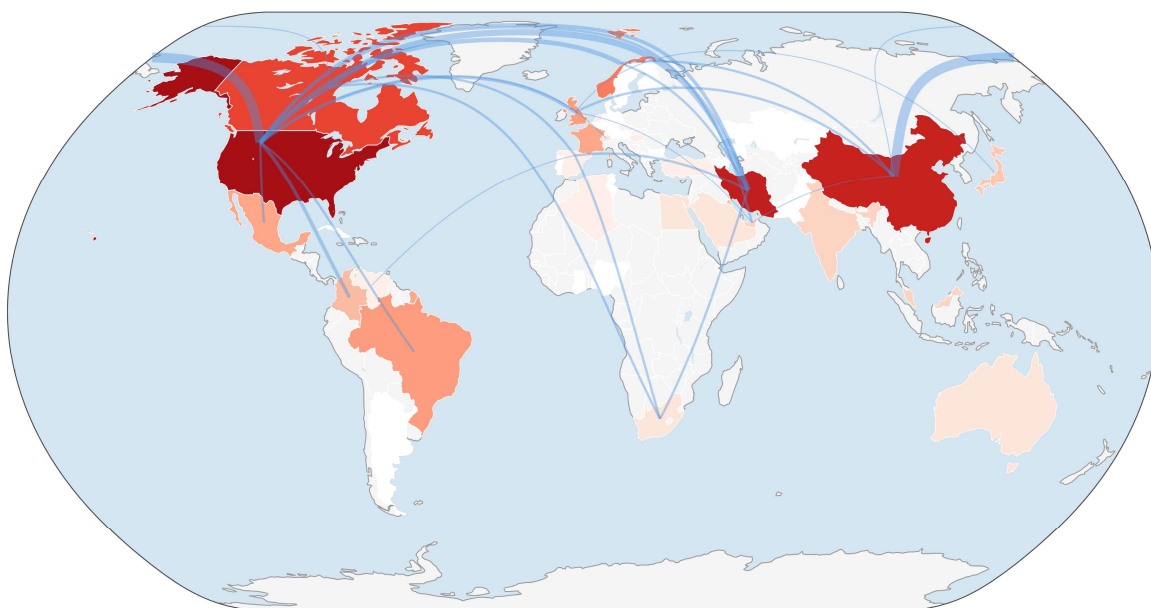


Figura 5. Países mais citados e produção de artigos por país ao longo do tempo.

A partir da Tabela 1, pôde-se observar uma lacuna na literatura científica quanto ao emprego do modelo UNIFAC (*Universal Quasi-Chemical Functional Group Activity Coefficients*) no contexto de asfaltenos e modelagem termodinâmica. Observou-se que esse modelo aparece com frequência reduzida nas buscas por eixos temáticos, o que sugere subutilização em comparação com a predominância de abordagens como o PC-SAFT ou as equações de estado cúbicas (Hernández et al., 2023). Contudo, essa baixa ocorrência pode refletir que o UNIFAC tenha sido empregado muitas vezes como modelo incorporado ou referido por nomenclaturas alternativas que, por não figurarem nas palavras-chave ou nos resumos, acabam mencionadas apenas na seção de metodologia dos trabalhos. Dessa forma, esse quadro não deve ser encarado como ausência de relevância técnica, mas sim como uma janela estratégica para o surgimento de novas investigações destinadas a suprir esse hiato de conhecimento, explorando o potencial do modelo em aplicações híbridas e integradas.

Tabela 1. Caracterização dos estudos que empregaram o modelo UNIFAC.

Categoria	Detalhamento	Quantidade
Total de artigos	2016-2026	7
Distribuição anual	2016, 2022	2 (cada ano)
	2017, 2018, 2024	1 (cada ano)
	2019, 2020, 2021, 2023, 2025, 2026	0 (cada ano)
Países	Estados Unidos, Espanha e China	(Ranqueado)
Revistas	<i>Energy & Fuels</i>	-
	<i>Journal of Petroleum Science and Engineer</i>	-
	<i>Fluid Phase Equilibria</i>	-
	<i>AIChE Journal</i>	-
	<i>Journal of Marine Science and Engineering</i>	-
Combinação de modelos	UNIFAC (sozinha)	3
	UNIFAC + COSMO-SAC	2
	UNIFAC + NRTL-SAC	1
	UNIFAC + NRTL	1

A distribuição temporal desses estudos utilizando a modelagem termodinâmica UNIFAC caracteriza-se por uma produção esporádica e descontínua. Apesar da presença de artigos em periódicos de prestígio como *Energy & Fuels* e *Fluid Phase Equilibria*, sugerindo que não há uma linha de pesquisa consolidada

dedicada exclusivamente ao UNIFAC, mas que o modelo possui validade técnica reconhecida pelos centros de estudo em países como Estados Unidos, Espanha e China.

Os estudos identificados sugerem que o UNIFAC apresenta versatilidade por poder ser combinado com modelos avançados, como COSMO-SAC e NRTL-SAC. O fato do modelo ser utilizado tanto de forma isolada quanto integrada a métodos de contribuição de grupos mais complexos sugere potencial adaptativo para descrever a complexidade química dos asfaltenos. Portanto, a escassez de trabalhos identificada nessa análise bibliométrica reforça a relevância deste estudo, sendo o uso do UNIFAC uma fonte de pesquisa com possível oportunidade de investigação para contribuições inéditas na predição de propriedades termodinâmicas e fenômenos de precipitação.

Embora o UNIFAC apresente baixa frequência de ocorrência na literatura analisada, essa informação, isoladamente, não permite avaliar sua relevância científica. Para esse propósito, torna-se necessário compará-lo aos demais modelos termodinâmicos identificados, considerando suas características, aplicações e limitações.

A comparação entre os modelos na Tabela 2, evidencia uma evolução das estratégias de modelagem empregadas na literatura. A frequência de utilização dos modelos identificada neste estudo representa apenas sua ocorrência na literatura analisada, não constituindo, por si só, um critério de desempenho ou de superioridade entre as abordagens termodinâmicas. Enquanto modelos clássicos, como as equações de estado e o UNIFAC, permanecem relevantes devido à simplicidade e ao baixo custo computacional, observa-se um crescimento expressivo de abordagens baseadas em descrição molecular, como PC-SAFT e simulações de dinâmica molecular. Essa transição reflete a necessidade de representar com maior fidelidade a complexidade estrutural dos asfaltenos.

Tabela 2. Visão comparativa dos modelos termodinâmicos aplicados a sistemas asfálticos.

Modelo	Frequência observada	Vantagens	Limitações	Tendência identificada
UNIFAC	Baixa	Baixo custo computacional, simplicidade e contribuição de grupos	Menor capacidade para representar estruturas altamente complexas	Potencial para integração com <i>Machine Learning</i>
PC-SAFT	Alta	Excelente representação de frações pesadas, boa descrição da associação molecular	Esforço computacional e parametrização complexa	Forte crescimento
COSMO-SAC	Média	Elevado poder preditivo	Requer cálculos de química quântica	Crescimento moderado
NRTL-SAC	Média	Boa representação de misturas complexas	Aplicação ainda limitada em sistemas asfálticos	Estável
Equações de estado	Alta	Simplicidade e ampla aplicação industrial	Menor fidelidade para interações moleculares complexas	Consolidadas
Dinâmica molecular	Muito alta	Representação explícita das interações moleculares	Alto custo computacional	Principal tendência recente

Apesar da baixa frequência de utilização do UNIFAC localizada, sua flexibilidade e facilidade de integração com outros modelos indicam que ele continua sendo uma alternativa promissora, especialmente em aplicações que exigem menor custo computacional ou integração com métodos orientados por dados.

A análise das palavras-chave, Fig. 6, evidenciou que os termos mais utilizados são "asphaltenes", "asphaltene precipitation" e "equations of state", próximo ao que foi realizado a busca para captação dos dados para essas análises considerando que equações de estado fazem parte de modelos termodinâmicos. Embora o modelo UNIFAC ter feito parte da estratégia de busca empregada neste estudo, sua ocorrência entre os termos de maior frequência mostrou-se inferior à observada para expressões mais abrangentes, como equations of state, molecular simulation e molecular dynamics. Esse resultado sugere que, apesar de o UNIFAC permanecer como uma ferramenta relevante para estimativas de equilíbrio de fases e parâmetros

de solubilidade, a literatura recente tem direcionado maior atenção para modelos capazes de representar explicitamente as interações moleculares dos asfaltenos e métodos baseados em dinâmica molecular.

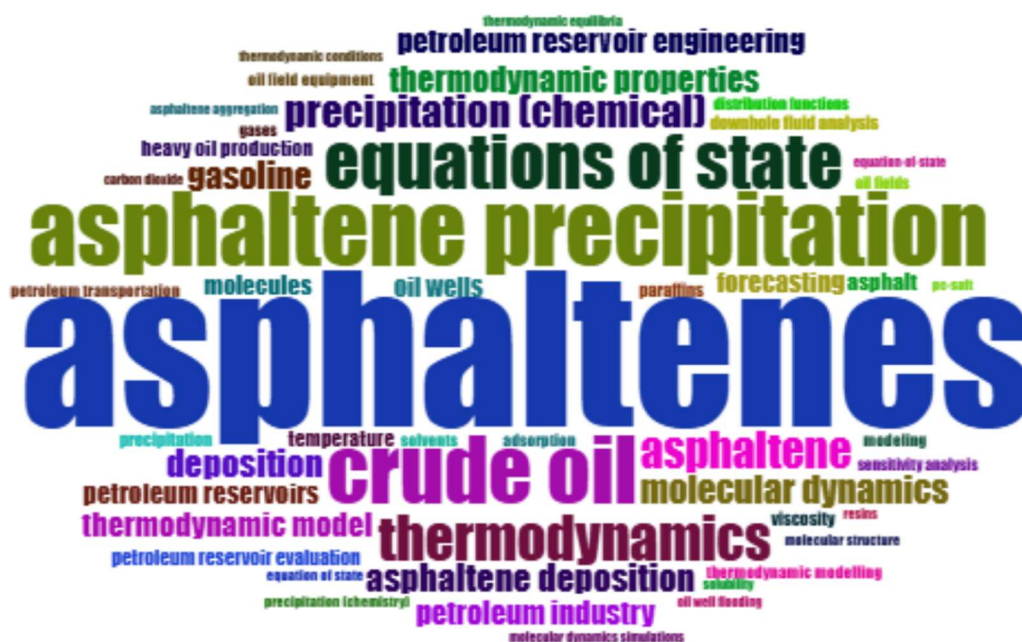


Figura 6. Nuvem de palavras.

Entretanto, a evolução dos termos utilizados (Trend Topics), Figura 7, indica uma alteração de padrão: nos primeiros anos (2016–2018) a atenção recaiu sobre modelos termodinâmicos tradicionais e reservatórios de petróleo, nos períodos mais recentes (2024–2026) observou-se uma migração para "molecular simulation", "molecular dynamics" e a aplicação de parâmetros de solubilidade na predição de riscos em processos (Huang et al., 2026). Essa mudança aponta que modelos estritamente macroscópicos vêm sendo suplementados por abordagens de escala microscópica, como PC-SAFT e NRTL-SAC, com o objetivo de representar com maior fidelidade a complexidade molecular dos asfaltenos (Subramanian et al., 2016).

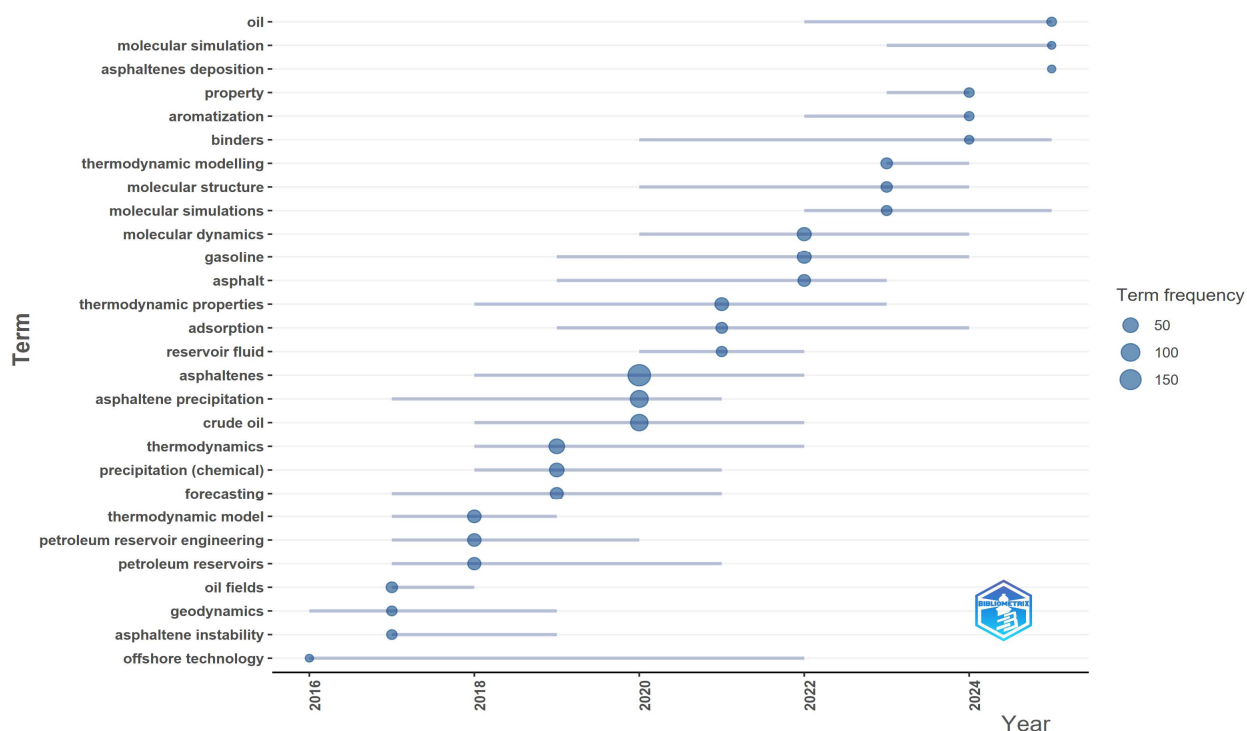


Figura 7. Evolução dos termos utilizados ao longo dos anos.

Apesar da significativa produção científica e do aperfeiçoamento das fundamentações teóricas no intervalo considerado, a avaliação bibliométrica aponta lacunas estratégicas que delimitam áreas a serem exploradas em pesquisas futuras. Uma das possibilidades mais notáveis está na migração de modelos estritamente determinísticos para estratégias híbridas e orientadas por dados, unindo abordagens termodinâmicas clássicas a métodos de Machine Learning (Huang et al., 2026). Essa insuficiência fica clara pela escassez de artigos de elevado impacto, somente oito foram localizados na interseção específica dessas áreas, voltados a mitigar o elevado custo computacional das simulações microscópicas e viabilizar a previsão em tempo real do risco de precipitação na indústria (Jirasek and Hasse, 2023).

Nesse contexto, modelos baseados em contribuição de grupos, como o UNIFAC, apresentam potencial para integração com técnicas de Machine Learning, uma vez que fornecem parâmetros termodinâmicos de baixo custo computacional. A combinação dessas abordagens pode ampliar a capacidade preditiva dos modelos, especialmente em sistemas para os quais há escassez de dados experimentais.

Além disso, há demanda por avanços na representação da cinética de deposição e no processo de envelhecimento das borras orgânicas (Huang et al., 2026). Grande parte dos estudos disponíveis concentra-se no início da precipitação (onset), carecendo de modelos robustos para descrever os mecanismos de nucleação coloidal, floculação e adesão em superfícies metálicas sob escoamento turbulento (Alimohammadi et al., 2019).

Outro desafio contínuo é estender os modelos para operar em amplas gamas de pressão e temperatura; dada a complexidade e a variedade estrutural dos asfaltenos, parâmetros como o fator de correção ou as constantes de associação não podem permanecer meramente empíricos, devendo ser fundamentados em princípios físicos básicos e nas propriedades específicas do petróleo bruto (Seitmaganbetov et al., 2021).

Sendo assim, estabilidade de sistemas asfálticos em ambientes multifásicos complexos continua tendo um entrave técnico de considerável importância. A combinação de dados termodinâmicos obtidos a partir de parâmetros de solubilidade com descritores derivados da estrutura molecular surge como uma estratégia promissora para identificar interações específicas entre asfaltenos e borras oleosas (Huang et al., 2026). Esses avanços são essenciais para alinhar a eficiência operacional das unidades de produção offshore em suas demandas globais por sustentabilidade e diminuir os impactos ambientais causados pelo acúmulo de resíduos sólidos no setor petrolífero (Hernández et al., 2023).

Considerados em conjunto, os achados desta investigação bibliométrica indicam um campo científico em profunda reconfiguração estrutural, cujas direções vão além da mera acumulação de artigos. A evolução registrada entre 2016 e 2026 aponta para uma mudança paradigmática nas estratégias de modelagem: saindo de enfoques macroscópicos e semiempíricos, fundamentados em equações de estado e parâmetros globais de solubilidade, o setor deslocou-se gradualmente para métodos em escala molecular atendendo à demanda crescente por representações mais verossímeis da complexidade estrutural dos asfaltenos.

Entretanto, essa progressão metodológica não ocorreu de modo uniforme. A concentração geográfica da produção científica de maior impacto nos EUA e no C, aliada ao crescimento acelerado da produção a partir de 2022, indica que os resultados sugerem que o avanço da área está fortemente associado e do montante investido em P&D, o elevado requisito tecnológico pode limitar a incorporação de modelos sofisticados em instituições com capacidade técnica reduzida. Assim, alternativas com menor demanda computacional, como o UNIFAC, passam a ter importância estratégica não só como opções técnicas, mas também como meios de ampliar o acesso à modelagem preditiva.

A avaliação do UNIFAC merece cuidado especial. Em estudos bibliométricos, a frequência de ocorrência de um modelo não reflete necessariamente sua qualidade ou desempenho, mas sim sua representatividade na literatura analisada. Nesse sentido, o fato de o UNIFAC aparecer em apenas sete artigos ao longo de dez anos não deve ser interpretado como algo ruim, e sim como sinal de subutilização e sim como uma possível oportunidade de investigação. As pesquisas localizadas indicam que o modelo apresenta validade reconhecida em periódicos de elevado impacto e demonstra flexibilidade quando combinado com metodologias como COSMO-SAC e NRTL-SAC. Portanto, a escassez de publicações sugere uma lacuna de investigação, e não uma falha inerente ao modelo, evidenciando uma oportunidade concreta para contribuições científicas originais.

A descoberta mais relevante desta investigação é a quase inexistência de integração entre modelos termodinâmicos e técnicas de Machine Learning: ao longo de todo o intervalo temporal estudado, foram localizados apenas oito artigos de alto impacto nessa confluência. Tendo em vista que simulações moleculares de elevada fidelidade acarretam custos computacionais proibitivos para aplicações industriais em tempo real, a união de princípios físico-químicos com abordagens orientadas por dados surge como a direção mais promissora e, simultaneamente, mais desatendida da área. Modelos de contribuição de grupos,

como o UNIFAC, destacam-se como candidatos naturais a essa incorporação, devido à sua parametrização flexível e ao reduzido custo de processamento.

4 Conclusões

A análise bibliométrica do período de 2016 a 2026 evidenciou um campo em consolidação, com crescimento da produção científica até 2020 e maior impacto acadêmico em 2019. Observou-se a transição de modelos macroscópicos tradicionais para abordagens moleculares, como PC-SAFT e dinâmica molecular, além da predominância de Estados Unidos e Canadá na produção científica e da ascensão da China no setor petrolífero. Também foram identificadas lacunas importantes, especialmente a baixa utilização do modelo UNIFAC e a limitada integração entre modelos termodinâmicos e técnicas de *Machine Learning*, indicando potencial para o desenvolvimento de modelos híbridos mais eficientes.

Do ponto de vista industrial, a adoção de abordagens híbridas orientadas por dados pode contribuir para previsões mais rápidas e precisas do risco de precipitação, reduzindo problemas operacionais como entupimento de tubulações e formação de borras, em consonância com os princípios da Indústria 4.0 e da sustentabilidade. Como perspectivas futuras, destacam-se a padronização dos procedimentos de modelagem, o aprimoramento da representação da cinética de deposição e do envelhecimento das borras, bem como o fortalecimento de redes colaborativas, especialmente com maior participação de instituições latino-americanas.

Agradecimentos

Os autores agradecem à Fundação de Apoio da Universidade Tecnológica Federal do Paraná (FUNTEF-PR) pela concessão da bolsa de estudos que apoiou a realização deste trabalho.

Referências bibliográficas

- Alimohammadi, S., Zendehboudi, S., and James, L. (2019). A comprehensive review of asphaltene deposition in petroleum reservoirs: Theory, challenges, and tips. *Fuel*, 252:783–791.
- Efimov, I., Smyshlyaeva, K. I., Povarov, V. G., Buzyreva, E. D., Zhitkov, N. V., Vovk, M. A., and Rudko, V. A. (2023). Unifac residual marine fuels stability prediction from nmr and elemental analysis of sara components. *Fuel*, 352:129014.
- Goodarzi, F. and Zendehboudi, S. (2019). A comprehensive review on emulsions and emulsion stability in chemical and energy industries. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 97(1):281–309.
- Hasan, A. M. A., Kamal, R. S., Farag, R. K., and Abdel-raou, M. E. (2024). Petroleum sludge formation and its treatment methodologies: a review. *Environmental Science and Pollution Research*, 31:8369–8386.
- Hernández, E. A., Lira-Galeana, C., and Ancheyta, J. (2023). Analysis of asphaltene precipitation models from solubility and thermodynamic-colloidal theories. *Processes*, 11(765).
- Huang, Y., Liang, Y., Tsuji, T., Cui, W., Masuda, Y., Matsuoka, T., Boek, E. S., Suzuki, T., and Takabayashi, K. (2026). Prediction of asphaltene deposition risk in co₂-eor using hansen solubility parameters by molecular dynamics simulation. *Fuel*, 404:136359.
- Islam, M. R., Hao, Y., and Chen, C.-C. (2018). Thermodynamic modeling of asphaltene precipitation in pure and mixed solvents with nrtl-sac. *Fluid Phase Equilibria*, 473:255–261.
- Jirasek, F. and Hasse, H. (2023). Combining machine learning with physical knowledge in thermodynamic modeling of fluid mixtures. *Annual Review of Chemical and Biomolecular Engineering*, 14:31–51.
- Kumar, A. (2023). Perspectives of flow assurance problems in oil and gas production: A mini-review. *Energy & Fuels*, 37:8142–8159.
- Lai, S., Chen, H., and Zhao, Y. (2024). Measurement and prediction of the development level of china's digital economy. *Humanities & Social Sciences Communications*, 11(1756).
- Lucas, J. M. F., Araujo, E. C. G., Fiedler, N. C., da Silva Santana, J. A., and Tetto, A. F. (2023). Perspective: Scientific gaps on forest fires in brazilian protected areas. *Forest Ecology and Management*, 529(120739).

- Omrani, H., Bahrami, M., and Koli, M. G. (2025). Molecular simulation of asphaltene clustering in toluene and n-heptane: Thermodynamics and dynamics aspects. *Journal of Molecular Liquids*, 417(126454).
- Seitmaganbetov, N., Rezaei, N., and Shafiei, A. (2021). Characterization of crude oils and asphaltenes using the pc-saft eos: A systematic review. *Fuel*, 291:120180.
- Subramanian, S., Simon, S., and Sjöblom, J. (2016). Asphaltene precipitation models: A review. *Journal of Dispersion Science and Technology*, 37:1027–1049.
- Ucella-Filho, J. G. M., da Silva Monteiro Freire, A., Carréra, J. C., Lucas, F. M. F., Zucolotto, S. M., Júnior, A. F. D., and Mori, F. A. (2022). Tannin-rich bark extract of plants as a source of antimicrobial bioactive compounds: A bibliometric analysis. *South African Journal of Botany*, 150:1038–1050.
- Wu, H. (2021). Energy & fuels launches the series of virtual special issues on recent advances in selected energy research areas. *Energy & Fuels*, 35:1–2.
- Xu, G. and Wang, H. (2017). Molecular dynamics study of oxidative aging effect on asphalt binder properties. *Fuel*, 188:1–10.