

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALFENAS

RAFAEL FERREIRA MANZOLI

KAIO FERREIRA CAIXETA MARCOVIG

**SIMULAÇÃO DA PIRÓLISE TÉRMICA DE PET PARA OBTENÇÃO DE
COMBUSTÍVEIS NA FAIXA DA GASOLINA**

POÇOS DE CALDAS/MG

2026

RAFAEL FERREIRA MANZOLI
KAIO FERREIRA CAIXETA MARCOVIG

**SIMULAÇÃO DA PIRÓLISE TÉRMICA DE PET PARA OBTENÇÃO DE
COMBUSTÍVEIS NA FAIXA DA GASOLINA**

Trabalho de Conclusão de Curso como parte dos requisitos
para obtenção do título de Bacharel em Engenharia Química
pela Universidade Federal de Alfenas.

Orientador: Prof. DSc. Flávio Augusto Dias de Oliveira

Coorientador: Prof. DSc. Marlus Pinheiro Rolemberg

POÇOS DE CALDAS/MG

2026

Sistema de Bibliotecas da Universidade Federal de Alfenas
Biblioteca Campus Poços de Caldas

Manzoli, Rafael Ferreira.

Simulação da pirólise térmica de pet para obtenção de combustíveis na faixa da gasolina / Rafael Ferreira Manzoli, Kaio Ferreira Caixeta Marcovig. - Poços de Caldas, MG, 2026.

66 f. -

Orientador(a): Flávio Augusto Dias de Oliveira.

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Química) - Universidade Federal de Alfenas, Poços de Caldas, MG, 2026.

Bibliografia.

1. Pirólise. 2. PET. 3. Simulação. 4. Aspen Plus. 5. Gasolina. I. Marcovig, Kaio Ferreira Caixeta. II. Oliveira, Flávio Augusto Dias de, orient. III. Título.

**RAFAEL FERREIRA MANZOLI
KAIO FERREIRA CAIXETA MARCOVIG**

**SIMULAÇÃO DA PIRÓLISE TÉRMICA DE PET PARA OBTENÇÃO DE
COMBUSTÍVEIS NA FAIXA DA GASOLINA**

O(A) Presidente da banca examinadora abaixo assina a aprovação do(a) Trabalho de Conclusão de Curso apresentado(a) como parte dos requisitos para obtenção do título de Bacharel em Engenharia Química pela Universidade Federal de Alfenas.

Aprovada em: 02 de julho de 2026

Prof. Dr. Flávio Augusto Dias de Oliveira
Universidade Federal de Alfenas

Assinatura:

Prof. Dr. Marlus Pinheiro Rolemberg
Universidade Federal de Alfenas

Assinatura:

Prof. Dr. Marcos Vinícius Rodrigues
Universidade Federal de Alfenas

Assinatura:

Prof. Dr. Rodrigo Corrêa Basso
Universidade Federal de Alfenas

Assinatura:

Dedicamos este trabalho a Deus e às nossas famílias, pelo apoio e pela força ao longo de toda
essa jornada..

AGRADECIMENTOS

Agradecemos, primeiramente, ao Prof. Dr. Flávio Augusto Dias de Oliveira, pela orientação, dedicação e apoio ao longo do desenvolvimento deste trabalho. Sua contribuição foi fundamental para a construção deste estudo e para o nosso crescimento acadêmico e profissional.

Ao Prof. Dr. Marlus Pinheiro Rolemberg, pela coorientação e pelas valiosas contribuições, que enriqueceram significativamente o desenvolvimento deste trabalho.

À Universidade Federal de Alfenas (UNIFAL-MG) e ao curso de Engenharia Química, pela estrutura oferecida e pela formação proporcionada ao longo da graduação, essenciais para a nossa trajetória.

Aos professores do curso, pelos ensinamentos compartilhados, incentivo e comprometimento com a formação dos estudantes, que foram fundamentais para o desenvolvimento das competências aqui aplicadas.

Aos colegas e amigos, pelo companheirismo durante a graduação, pelas trocas de conhecimento e pelo apoio ao longo dessa jornada.

Às nossas famílias, pelo suporte, incentivo e compreensão em todos os momentos.

Por fim, agradecemos a todos que, de forma direta ou indireta, contribuíram para a realização deste trabalho.

All models are wrong, but some are useful.

(George E. P. Box)

RESUMO

Este trabalho tem como objetivo avaliar, por meio de simulação no Aspen Plus[®], o processo de pirólise térmica do poli(tereftalato de etileno) (PET), com foco na distribuição de produtos e na fração de compostos líquidos na faixa de gasolina. A modelagem foi realizada utilizando uma abordagem fenomenológica baseada no reator do tipo *RYield*, na qual a decomposição do PET foi representada por rendimentos globais previamente definidos para as frações gasosa, líquida e sólida. O sistema foi simulado em regime estacionário, considerando três temperaturas de operação: 450, 500 e 550 °C. Os resultados indicaram que o aumento da temperatura favorece a formação de produtos gasosos, em detrimento da fase líquida, comportamento associado ao incremento de reações de craqueamento térmico em condições mais severas. Os rendimentos obtidos mostraram-se coerentes com as tendências reportadas na literatura para processos de pirólise de materiais poliméricos. Em relação à fração líquida, verificou-se que, embora a quantidade total de líquido diminua com o aumento da temperatura, a proporção de compostos leves, representados pelo pseudocomponente *GASOLINE_LUMP*, permanece aproximadamente constante na faixa analisada. Apesar das simplificações adotadas, como o uso de pseudocomponentes e a ausência de modelagem cinética, o modelo desenvolvido mostrou-se adequado para análise de tendências do processo. Como trabalhos futuros, recomenda-se a incorporação de modelos cinéticos e uma descrição mais detalhada da composição do óleo de pirólise.

Palavras-chave: pirólise, PET, simulação, Aspen Plus[®], combustível, gasolina.

ABSTRACT

The objective of this work is to evaluate, through Aspen Plus[®] simulation, the thermal pyrolysis process of polyethylene terephthalate (PET), focusing on product distribution and the fraction of liquid compounds within the gasoline range. The modeling approach was based on a phenomenological representation using a *RYield* reactor, in which PET decomposition was described by predefined global yields for gas, liquid and solid fractions. The system was simulated under steady-state conditions at three operating temperatures: 450, 500 and 550 °C. The results showed that increasing temperature promotes gas formation while reducing the liquid fraction, which is associated with the enhancement of thermal cracking reactions at higher temperatures. The obtained yields are consistent with trends reported in the literature for plastic pyrolysis processes. Regarding the liquid fraction, it was observed that although the total liquid yield decreases with temperature, the proportion of light compounds, represented by the *GASOLINE_LUMP* pseudocomponent, remains nearly constant within the evaluated range. Despite the simplifications adopted, such as the use of pseudocomponents and the absence of kinetic modeling, the developed model proved adequate for trend analysis. Future work should include kinetic modeling and a more detailed description of the pyrolysis oil composition.

Keywords: pyrolysis, PET, simulation, Aspen Plus[®], fuel, gasoline.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Esquema conceitual do contexto do estudo e do recorte metodológico adotado.	14
Figura 2 – Fluxograma da simulação do processo de pirólise no Aspen Plus®	37
Figura 3 – Variação das vazões das correntes de saída em função da temperatura	42
Figura 4 – Variação dos rendimentos das frações do processo em função da temperatura ..	47
Figura 5 – Fração de gasolina em função da temperatura	50

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Parâmetros operacionais do modelo de simulação	28
Tabela 2 – Distribuição de rendimentos no reator <i>RYield</i>	29
Tabela 3 – Composição elementar do PET (base seca)	34
Tabela 4 – Análise imediata do PET	35
Tabela 5 – Propriedades dos pseudocomponentes	36
Tabela 6 – Vazões das correntes de saída da simulação.....	42
Tabela 7 – Tabela de correntes do processo de pirólise a 500 °C	43
Tabela 8 – Rendimentos das frações do processo de pirólise	47
Tabela 9 – Vazões de CO e CO ₂ na corrente gasosa para diferentes temperaturas	48
Tabela 10 – Fração de gasolina no produto líquido	49
Tabela 11 – Propriedades físicas das correntes gasosa e líquida	51
Tabela 12 – Comparação de rendimentos globais (este trabalho vs. literatura)	54
Tabela 13 – Rendimentos adotados no reator <i>RYield</i> para diferentes temperaturas	61
Tabela 14 – Tabela de correntes do processo de pirólise a 450 °C	62
Tabela 15 – Tabela de correntes do processo de pirólise a 500 °C	63
Tabela 16 – Tabela de correntes do processo de pirólise a 550 °C	64

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	12
1.1	IMPACTO GLOBAL E LIMITAÇÕES DA RECICLAGEM DO POLITEREF- TALATO DE ETILENO (PET)	12
1.2	SOLUÇÕES TECNOLÓGICAS PARA A VALORIZAÇÃO DO PET	13
1.3	OBJETIVOS	14
1.3.1	Objetivo Geral	14
1.3.2	Objetivos Específicos	14
1.3.3	Escopo e Delimitações	15
1.3.4	Métricas e Critérios de Avaliação	16
2	Revisão Bibliográfica	17
2.1	RESÍDUOS DE PET E LIMITAÇÕES DAS ROTAS CONVENCIONAIS	17
2.2	FUNDAMENTOS DA PIRÓLISE TÉRMICA APLICADA AO PET	19
2.3	PRODUÇÃO DE ÓLEO COMBUSTÍVEL NA FAIXA DA GASOLINA A PAR- TIR DE PET	22
2.4	MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA PIRÓLISE DE PET	24
3	Metodologia	28
3.1	FERRAMENTA DE SIMULAÇÃO, ESCOPO E PARÂMETROS DO MODELO	28
3.1.1	Parâmetros operacionais	28
3.1.2	Definição dos produtos	29
3.1.3	Rendimentos de reação	29
3.1.4	Tratamento dos dados	30
3.2	CONFIGURAÇÃO TERMODINÂMICA E TRATAMENTO DE SÓLIDOS	30
3.2.1	Classe de corrente e tratamento de fases	31
3.2.2	Modelagem de sólidos não convencionais	31
3.2.3	Caracterização do PET	32
3.2.4	Caracterização do char	32
3.2.5	Equilíbrio de fases	32
3.3	DEFINIÇÃO DOS COMPONENTES DO MODELO	33
3.3.1	Componentes convencionais	33
3.3.2	Componentes não convencionais	34
3.3.3	Pseudocomponentes líquidos	35

3.3.4	Considerações sobre a fração gasolina	36
3.4	CONSTRUÇÃO DO FLUXOGRAMA DE SIMULAÇÃO	36
3.4.1	Alimentação	37
3.4.2	Reator de pirólise (RYield)	38
3.4.3	Resfriamento	39
3.4.4	Separação de fases (Flash2)	39
3.4.5	Considerações sobre a estrutura do modelo	40
4	Resultados e Discussão	41
4.1	RESULTADOS DA SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE PIRÓLISE	41
4.1.1	Apresentação dos resultados da simulação	41
4.2	TRATAMENTO DOS DADOS SIMULADOS	44
4.2.1	Remoção do gás inerte	44
4.2.2	Ajuste da fração líquida	45
4.2.3	Definição das frações do processo	45
4.2.4	Cálculo dos rendimentos	45
4.2.5	Considerações sobre o tratamento dos dados	46
4.3	AVALIAÇÃO DOS RENDIMENTOS DO PROCESSO	46
4.4	AVALIAÇÃO DA FRAÇÃO GASOLINA	49
4.4.1	Definição da fração gasolina	49
4.4.2	Resultados obtidos	49
4.4.3	Análise da influência da temperatura	50
4.4.4	Discussão dos resultados	51
4.5	PROPRIEDADES FÍSICAS DAS CORRENTES DE SAÍDA	51
4.6	COMPARAÇÃO COM A LITERATURA	53
4.7	LIMITAÇÕES DO MODELO	54
4.7.1	Ausência de modelagem cinética	55
4.7.2	Simplificação da composição química	55
4.7.3	Tratamento de sólidos não convencionais	55
4.7.4	Dependência dos rendimentos especificados	56
4.7.5	Ausência de efeitos operacionais adicionais	56
4.7.6	Considerações finais sobre as limitações	56
5	CONCLUSÃO	57

REFERÊNCIAS	59
APENDICE A – RENDIMENTOS UTILIZADOS NO REATOR RYIELD .	61
APENDICE B – TABELA DE CORRENTES A 450 °C	62
APENDICE C – TABELA DE CORRENTES A 500 °C	63
APENDICE D – TABELA DE CORRENTES A 550 °C	64

1 INTRODUÇÃO

1.1 IMPACTO GLOBAL E LIMITAÇÕES DA RECICLAGEM DO POLITEREFTALATO DE ETILENO (PET)

O gerenciamento inadequado de resíduos plásticos pós-consumo constitui um dos principais desafios ambientais da atualidade, o que torna urgente o desenvolvimento de rotas tecnológicas capazes de ampliar a valorização desses materiais — tema central deste trabalho. Nesse cenário, o politereftalato de etileno (PET) ocupa posição de destaque por sua ampla utilização em embalagens de bebidas e no setor têxtil (poliéster), compondo um fluxo volumoso e heterogêneo que segue crescendo mesmo diante dos limites da reciclagem mecânica convencional.

A produção mundial de plásticos retomou a trajetória de crescimento no pós-pandemia, aproximando-se de 431 milhões de toneladas em 2024, com predominância de polímeros de origem fóssil, em torno de 90% da composição global (Plastics Europe, 2025). Apenas cerca de 9% do plástico produzido globalmente é efetivamente reciclado (OECD, 2024), o que evidencia um descompasso entre a escala de produção e a velocidade de adoção de conteúdo reciclado. Estima-se ainda que, em 2010, entre 4,8 e 12,7 milhões de toneladas de resíduos plásticos tenham entrado nos oceanos a partir de fontes terrestres (Jambeck *et al.*, 2015), cenário que reforça a urgência de soluções complementares à reciclagem mecânica tradicional, sobretudo em regiões nas quais a infraestrutura de coleta e triagem é insuficiente.

No Brasil, o 13º Censo da Associação Brasileira da Indústria do PET (ABIPET) registrou 410 mil toneladas de PET pós-consumo recicladas em 2024, com avanço da rota *bottle-to-bottle* (37%) como principal destino do material reciclado (ABIPET, 2025). Apesar disso, o parque reciclador nacional operou com ociosidade média de 23%, atribuída à baixa eficiência da coleta seletiva e à irregularidade no suprimento de material (Agência Brasil, 2025), o que reforça a necessidade de rotas tecnológicas complementares voltadas a frações degradadas, contaminadas ou mistas, usualmente preteridas pela reciclagem mecânica.

Embora a reciclagem mecânica seja o pilar da circularidade do PET, ela apresenta limitações intrínsecas: a degradação termomecânica ao longo dos ciclos de processamento provoca a cisão de cadeias poliméricas, reduzindo a massa molar do material e alterando suas propriedades reológicas e mecânicas (Almohamadi *et al.*, 2021). Como consequência, parte relevante do fluxo de PET não retorna a aplicações de alto valor agregado, tendendo a convergir para aterro ou incineração quando não é elegível à reciclagem mecânica (OECD, 2024).

Nesse contexto, avanços regulatórios recentes têm buscado ampliar a rastreabilidade da reciclagem química. Na União Europeia, por exemplo, a Diretiva de Plásticos de Uso Único (do inglês *Single-Use Plastics Directive*, SUPD) passou a aceitar mecanismos de balanço de massa para atribuir conteúdo reciclado ao longo de cadeias complexas, ainda que materiais destinados a uso como combustível não sejam contabilizados para metas de reciclagem — abordagem conhecida como *fuel-use excluded* (Plastics Europe, 2024; Victory, 2026). Esse movimento regulatório reforça a relevância de estudos que simulem e antecipem rendimentos de rotas de reciclagem química do PET antes de investimentos em plantas piloto e em ampliação de escala (Plastics Europe, 2024).

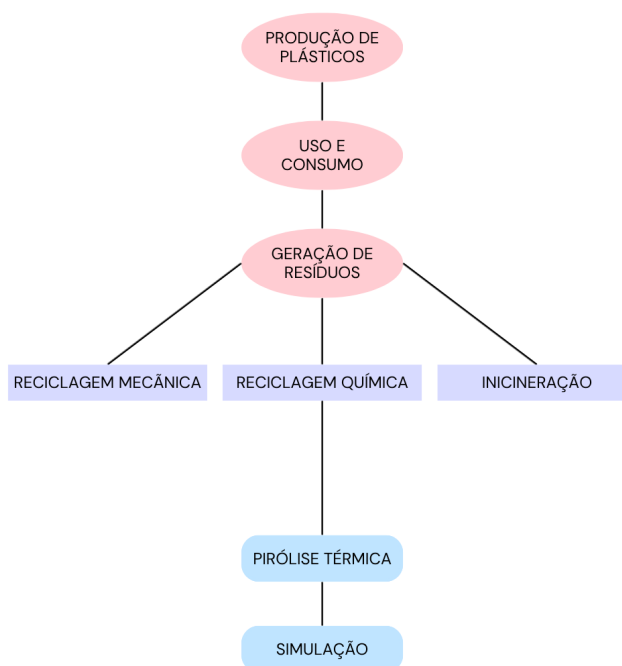
1.2 SOLUÇÕES TECNOLÓGICAS PARA A VALORIZAÇÃO DO PET

A reciclagem química do PET compreende rotas que despolimerizam o material a monômeros e intermediários, ou o convertem termoquimicamente em frações hidrocarbonadas, ampliando o espectro de resíduos elegíveis à valorização (Muszynski *et al.*, 2023). Entre as rotas de despolimerização destacam-se as hidrólises (ácida, neutra e alcalina) e as alcoólises (glicólise, metanólise e etanólise), que permitem recuperar monômeros como ácido tereftálico (TPA), etilenoglicol (EG), tereftalato de bis(2-hidroxietila) (BHET) e tereftalato de dimetila (DMT), conforme o catalisador, o solvente e as condições empregadas (Muszynski *et al.*, 2023). Já as rotas termoquímicas, como a pirólise térmica, convertem o polímero diretamente em frações hidrocarbonadas, sendo especialmente indicadas para materiais degradados, contaminados ou mistos, menos aptos às rotas físicas convencionais.

A Figura 1 apresenta um esquema conceitual do contexto geral abordado neste trabalho, destacando as principais rotas de tratamento de resíduos plásticos e o recorte metodológico adotado, com ênfase na reciclagem química por pirólise térmica e na simulação do processo.

A simulação de processos, em particular por meio do software Aspen Plus[®], tem papel relevante nesse contexto, pois permite estimar rendimentos e avaliar a sensibilidade do processo a variáveis operacionais — como temperatura, tempo de residência e tipo de reator — antes de investimentos experimentais, reduzindo tentativa e erro em bancada (Paavani *et al.*, 2025). Dessa forma, o uso de ferramentas de simulação para investigar a pirólise térmica do PET mostra-se coerente tanto com as demandas tecnológicas quanto com o cenário regulatório voltado à reciclagem química (OECD, 2024).

Figura 1 – Esquema conceitual do contexto do estudo e do recorte metodológico adotado.



Fonte: Elaborado pelo autor.

1.3 OBJETIVOS

1.3.1 Objetivo Geral

Investigar e simular, no Aspen Plus[®], o processo de pirólise térmica convencional de resíduos plásticos, sem uso de catalisadores, visando a obtenção de óleo pirolítico com frações na faixa da gasolina, de forma a construir um modelo simples, direto e aplicável para estudos de conversão termoquímica.

1.3.2 Objetivos Específicos

- Caracterizar, por meio de revisão bibliográfica, os princípios da pirólise térmica convencional, destacando sua simplicidade operacional, a ausência de catalisadores e a capacidade de converter resíduos plásticos em combustíveis líquidos. (Baseado em estudos que analisam pirólise térmica para produção de hidrocarbonetos a partir de resíduos plásticos, reforçando seu caráter direto e não catalítico.)

- Desenvolver um modelo conceitual no Aspen Plus® para a pirólise térmica, utilizando blocos do tipo RYield para representar a decomposição térmica, adotando um fluxo de processo minimalista que priorize clareza e reprodutibilidade.
- Determinar a distribuição de produtos da pirólise térmica, com ênfase nas frações líquidas compatíveis com a faixa de hidrocarbonetos presentes na gasolina.
- Avaliar o potencial do óleo pirolítico gerado em termos de composição e aplicabilidade como combustível ou pré-intermediário petroquímico, considerando limitações tecnológicas e premissas simplificadas do modelo.
- Definir um recorte técnico claro e realista, assegurando que o estudo permaneça focado exclusivamente na pirólise térmica convencional, sem abordagens catalíticas, sem rotas avançadas e sem complexidades adicionais que fujam do escopo de um modelo básico de reciclagem química.

1.3.3 Escopo e Delimitações

O presente trabalho concentra-se exclusivamente na simulação do processo de pirólise térmica convencional de resíduos plásticos, realizada sem o uso de catalisadores e em atmosfera inerte, abordando unicamente a decomposição térmica como mecanismo de conversão. O estudo limita-se ao desenvolvimento de um modelo conceitual simplificado no Aspen Plus®, utilizando o bloco RYield para representar a quebra térmica e a formação dos produtos, sem a incorporação de cinéticas detalhadas, mecanismos avançados ou complexidade reacional. O foco recai sobre a obtenção de óleo pirolítico, com ênfase nas frações que se aproximam da faixa de hidrocarbonetos presentes na gasolina, alinhando-se a estudos que demonstram o potencial da pirólise térmica para gerar combustíveis líquidos a partir de resíduos plásticos. O trabalho não inclui análises econômicas, avaliações de ciclo de vida, rotas catalíticas, hidrogenação, métodos enzimáticos, plasma, gaseificação ou quaisquer abordagens tecnológicas alternativas, mantendo um recorte técnico estrito. Também não contempla experimentação laboratorial, restringindo-se à simulação computacional e à interpretação comparativa com valores e tendências encontrados na literatura.

1.3.4 Métricas e Critérios de Avaliação

As métricas e critérios de avaliação deste trabalho foram definidos de forma a garantir a coerência entre o modelo proposto e o comportamento esperado da pirólise térmica convencional de resíduos plásticos. O primeiro critério adotado é a robustez da simulação, assegurando que o modelo no Aspen Plus[®] opere sem erros de convergência e apresente fechamento de balanço de massa com desvio inferior a 1%. Esse valor foi adotado por ser uma referência usual de fechamento numérico em simulações de processo em regime estacionário, indicando que eventuais perdas de massa no modelo são desprezíveis frente à precisão exigida para uma análise de tendências. Além disso, avalia-se a distribuição dos produtos gerados, em especial a fração líquida correspondente ao óleo pirolítico, que deve reproduzir qualitativamente a tendência reportada na literatura sobre pirólise térmica de resíduos plásticos: aumento da fração gasosa e redução da fração líquida com o incremento da temperatura de operação, comportamento amplamente associado à intensificação de reações de craqueamento térmico em condições mais severas.

Outro critério fundamental é a simplicidade e a reprodutibilidade do modelo, que deve ser suficientemente claro para permitir sua replicação por outros pesquisadores utilizando o mesmo fluxograma, as mesmas condições operacionais e o mesmo conjunto de reações simplificadas. Este critério é essencial para manter o caráter didático e aplicado da proposta. Também se avalia a coerência do modelo com dados e tendências amplamente relatados na literatura, especialmente no que diz respeito à geração de frações líquidas, gasosas e sólidas típicas da pirólise térmica convencional, garantindo que a simulação represente adequadamente fenômenos observados experimentalmente em estudos correlatos.

Por fim, considera-se que o trabalho atinge seus objetivos se respeitar integralmente as delimitações estabelecidas, mantendo-se dentro do escopo da pirólise térmica sem catalisadores e evitando complexidades adicionais, mecanismos detalhados e rotas alternativas.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 RESÍDUOS DE PET E LIMITAÇÕES DAS ROTAS CONVENCIONAIS

Conforme apresentado na Introdução, o poli(tereftalato de etileno) (PET) ocupa posição de destaque no contexto dos resíduos plásticos devido à sua ampla aplicação em embalagens de bebidas e alimentos, bem como no setor têxtil na forma de fibras de poliéster, o que resulta em um fluxo pós-consumo volumoso e recorrente (Our World in Data, 2023). Nesse quadro, o PET é frequentemente citado como um dos polímeros com maior viabilidade de reciclagem e maior maturidade de cadeia, mas a magnitude do volume gerado e a heterogeneidade dos resíduos coletados continuam impondo desafios relevantes à recuperação material em larga escala (OECD, 2024).

Como já discutido na Introdução, dados setoriais recentes do Brasil evidenciam avanços na capacidade de processamento do PET pós-consumo, ainda que a literatura e fontes institucionais apontem gargalos na etapa de suprimento de material com qualidade e regularidade compatíveis com a capacidade instalada, o que pode gerar ociosidade operacional e limitar a expansão da cadeia (Agencia Brasil, 2025). Essa tensão entre capacidade industrial e disponibilidade de matéria-prima adequada é coerente com diagnósticos mais amplos sobre a gestão de resíduos: mesmo quando existe tecnologia de reciclagem, a eficiência global depende fortemente de coleta, triagem e logística reversa, que variam significativamente entre regiões (OECD, 2024). Assim, o desafio não se resume ao “quanto” se recicla, mas também ao “que tipo” de PET chega às plantas e em quais condições físico-químicas e de contaminação.

A reciclagem mecânica constitui a principal rota convencional de valorização do PET e desempenha papel central nas estratégias de economia circular, pois permite reintroduzir o material na cadeia produtiva com relativamente menor complexidade tecnológica quando comparada a rotas químicas (OECD, 2024). Como já apresentado na Introdução, essa rota enfrenta limitações intrínsecas associadas à degradação termomecânica do polímero ao longo dos ciclos de processamento, que reduz a massa molar e afeta propriedades reológicas e mecânicas do material (Almohamadi *et al.*, 2021). Esse fenômeno é frequentemente associado ao *downcycling* — processo em que o material reciclado resulta em qualidade inferior à do material original —, no qual o reciclado perde parte de seu desempenho e tende a ser direcionado a usos de menor valor agregado ao longo de múltiplos ciclos, sobretudo quando o resíduo de entrada apresenta variabilidade elevada (Almohamadi *et al.*, 2021). Ainda que cadeias mais maduras consigam

mitigar parte dessas perdas por meio de controle de qualidade e aditivos, permanece um limite técnico relacionado ao histórico térmico do material e à degradação acumulada (Almohamadi *et al.*, 2021).

Além da degradação estrutural, a presença de contaminantes e a heterogeneidade do resíduo pós-consumo constituem barreiras práticas importantes para a reciclagem mecânica de PET. Misturas com outros polímeros, resíduos orgânicos, adesivos, pigmentos e componentes de embalagem podem comprometer a qualidade do reciclado e reduzir o rendimento do processo, elevando custos de triagem e reprocessamento (OECD, 2024). Na perspectiva sistêmica, relatórios internacionais destacam que a baixa eficiência de coleta e separação, somada à variabilidade do material disponível, limita o alcance de metas de circularidade e cria uma parcela persistente de resíduos “não elegíveis” para rotas convencionais de reciclagem, especialmente em ambientes onde a infraestrutura de gestão é insuficiente (OECD, 2024). De forma consistente, diagnósticos do setor no Brasil também apontam que a capacidade instalada pode superar a oferta efetiva de material com especificação adequada, reforçando que o gargalo frequentemente reside antes da etapa industrial, na cadeia de fornecimento e na qualidade do fluxo coletado (ABIPET, 2025).

Diante desse contexto, torna-se tecnicamente justificável considerar rotas complementares capazes de ampliar o espectro de resíduos de PET passíveis de valorização, sobretudo para frações degradadas, contaminadas ou mistas que não atendem aos requisitos da reciclagem mecânica. Avaliações internacionais convergem ao sugerir que estratégias robustas de enfrentamento da poluição plástica e de avanço da circularidade demandam portfólios integrados de soluções, combinando prevenção, redesign, reciclagem mecânica e rotas avançadas de recuperação de valor material (OECD, 2024). Nesse cenário, processos de reciclagem química aparecem como alternativas promissoras para tratar fluxos que escapam da reciclagem física, convertendo o polímero em produtos de menor complexidade molecular e potencialmente reinseríveis em cadeias químicas, desde que avaliados sob critérios técnicos e de eficiência energética compatíveis com as condições de contorno locais (OECD, 2024). Assim, o estudo de rotas termoquímicas aplicadas ao PET, como a pirólise térmica, pode ser compreendido como parte de uma estratégia de complementaridade tecnológica — não de substituição — com o objetivo de reduzir o desvio para aterro e ampliar opções de valorização para frações não recuperáveis por vias convencionais (OECD, 2024) (Plastics Europe, 2025).

2.2 FUNDAMENTOS DA PIRÓLISE TÉRMICA APLICADA AO PET

A pirólise é um processo de conversão termoquímica no qual materiais orgânicos são submetidos a aquecimento em atmosfera subestequiométrica (com disponibilidade de oxigênio insuficiente para promover combustão completa, podendo ser inerte), promovendo a quebra de ligações químicas e a formação de produtos em diferentes fases, tipicamente uma fração gasosa, uma fração líquida condensável e um resíduo sólido carbonáceo (*char*, material carbonoso remanescente da decomposição térmica) (Figueiredo *et al.*, 2015). Em termos operacionais, a pirólise pode ser realizada em diferentes regimes (por exemplo, pirólise lenta e rápida), variando principalmente a taxa de aquecimento e o tempo de residência dos vapores; tais parâmetros influenciam a distribuição de produtos e a extensão de reações secundárias em fase vapor, o que torna a seleção de condições operacionais um fator determinante para o perfil de produtos obtidos (Zakharyan; Maksimov, 2023). Assim, embora a pirólise seja frequentemente descrita de forma ampla como “degradação térmica”, sua natureza é, na prática, a de um conjunto de reações concorrentes e consecutivas, sensíveis a temperatura, tempo de residência, transferência de calor e características do material alimentado (Zakharyan; Maksimov, 2023) (Paavani *et al.*, 2025).

Do ponto de vista da estrutura química, o PET é um poliéster aromático cuja unidade repetitiva contém ligações éster e anéis aromáticos, característica que diferencia seu comportamento térmico daquele observado em poliolefinas (por exemplo, PE e PP) (Romao; Spinace; Paoli, 2009). Essa presença simultânea de grupos éster e anéis aromáticos implica (i) a geração de espécies oxigenadas durante a degradação e (ii) a tendência à formação de compostos aromáticos e produtos derivados de unidades benzênicas, em contraste com as cadeias predominantemente alifáticas geradas na pirólise de poliolefinas (Zakharyan; Maksimov, 2023). Consequentemente, ao discutir pirólise de PET, é fundamental considerar que a “qualidade” da fração líquida condensável não é apenas função de cortes de ebulição, mas também do teor de oxigênio e da natureza química dos compostos formados, o que influencia acidez, estabilidade e potencial de aplicação posterior (Zakharyan; Maksimov, 2023).

A caracterização do comportamento térmico do PET é frequentemente conduzida por meio de análise termogravimétrica (TGA), que permite observar a perda de massa em função da temperatura sob atmosfera controlada, fornecendo uma referência importante para delimitar a faixa típica de degradação térmica do polímero (Alhulaybi; Dubdub, 2023). Estudos cinéti-

cos baseados em TGA indicam que a pirólise do PET pode apresentar um estágio principal de degradação em uma faixa de temperatura relativamente concentrada; por exemplo, uma análise cinética abrangente reportou a ocorrência de uma reação cinética dominante na faixa aproximada de 650 a 750 K em ensaios com diferentes taxas de aquecimento (Alhulaybi; Dubdub, 2023). Embora valores exatos dependam da taxa de aquecimento, massa de amostra e condições experimentais, a mensagem essencial para a engenharia de processo é que o PET exibe uma janela térmica bem definida para a conversão primária, o que justifica a escolha de intervalos típicos de operação na ordem de centenas de graus Celsius em aplicações de pirólise (Alhulaybi; Dubdub, 2023).

Em termos mecanísticos, a degradação térmica do PET envolve, de forma geral, a clivagem de ligações éster e rearranjos que geram fragmentos de menor massa molar, incluindo espécies oxigenadas e aromáticas (Zakharyan; Maksimov, 2023). Revisões específicas sobre reciclagem terciária de PET por pirólise destacam que a natureza do polímero conduz à formação de uma mistura de produtos, na qual podem coexistir compostos condensáveis (líquidos), gases não condensáveis e resíduos sólidos, com proporções dependentes das condições de operação e do arranjo de reator (Figueiredo *et al.*, 2015) (Zakharyan; Maksimov, 2023). Além disso, a literatura enfatiza que características do material alimentado (por exemplo, polímero puro versus resíduo real, presença de aditivos, misturas com outros polímeros) também influenciam a composição de produtos, podendo alterar o teor de oxigenados e favorecer ou inibir determinadas vias reacionais (Zakharyan; Maksimov, 2023).

A temperatura é, de maneira consistente, uma das variáveis mais influentes na distribuição de produtos da pirólise. Em termos qualitativos, revisões recentes discutem que o aumento de temperatura tende a favorecer maior conversão e intensificar o craqueamento secundário de vapores, o que pode elevar a fração gasosa às custas da fração líquida condensável, enquanto temperaturas moderadas podem favorecer a formação de condensáveis, dependendo do regime hidrodinâmico e do tempo de residência dos vapores (Zakharyan; Maksimov, 2023). Para o PET especificamente, essa sensibilidade é particularmente relevante porque parte dos produtos condensáveis inclui espécies oxigenadas que podem sofrer transformações secundárias (por exemplo, descarboxilação, descarbonilação e reações de aromatização), alterando o perfil do óleo e a proporção de gases como CO e CO₂ (Zakharyan; Maksimov, 2023). Assim, ao analisar pirólise de PET, a temperatura não deve ser entendida apenas como “alavanca de rendimento”, mas também como parâmetro que reorganiza a composição química das frações formadas, com im-

plicações diretas em propriedades e possíveis rotas posteriores de aproveitamento (Zakharyan; Maksimov, 2023).

Outro ponto central é o papel do tempo de residência dos vapores e do contato dos produtos intermediários com superfícies quentes e, eventualmente, com material sólido presente no leito. Revisões de processo destacam que tempos de residência mais longos podem ampliar reações secundárias em fase vapor e aumentar a formação de gás e de sólidos por reações de condensação/aromatização e deposição, enquanto tempos curtos podem preservar uma maior fração de condensáveis (Zakharyan; Maksimov, 2023). Em reatores de leito fixo, por exemplo, limitações de transferência de calor e gradientes térmicos podem resultar em zonas de degradação heterogênea e maior permanência de vapores no interior do reator, favorecendo reações secundárias e alterando a distribuição final de produtos (Zakharyan; Maksimov, 2023). Em contrapartida, configurações como leito fluidizado e regimes com aquecimento mais intenso podem aumentar a taxa de transferência de calor e reduzir a heterogeneidade, afetando tanto a taxa global de conversão quanto a composição das frações (Zakharyan; Maksimov, 2023) (Paavani *et al.*, 2025).

Por fim, é importante delimitar as implicações específicas de se considerar pirólise térmica não catalítica do PET. Em abordagens sem catalisador, a seletividade para hidrocarbonetos "tipo combustível" tende a ser limitada pela presença intrínseca de oxigênio na cadeia do PET e pela formação de compostos oxigenados e aromáticos que nem sempre atendem diretamente a requisitos de combustíveis comerciais (Zakharyan; Maksimov, 2023). Revisões sobre reciclagem terciária por pirólise ressaltam, contudo, que a rota térmica permanece relevante pela simplicidade operacional, pela possibilidade de tratar correntes heterogêneas e pela geração simultânea de frações com potencial de uso energético e químico, ainda que a adequação do produto final dependa, em muitos casos, de etapas posteriores de separação e/ou beneficiamento (Zakharyan; Maksimov, 2023) (Figueiredo *et al.*, 2015). Nesse sentido, a compreensão dos fundamentos e das tendências fenomenológicas descritas neste tópico é essencial para interpretar resultados de simulação e discutir, com rigor, as limitações e o alcance de modelos simplificados aplicados à pirólise térmica do PET (Alhulaybi; Dubdub, 2023) (Paavani *et al.*, 2025).

2.3 PRODUÇÃO DE ÓLEO COMBUSTÍVEL NA FAIXA DA GASOLINA A PARTIR DE PET

A expressão “faixa da gasolina” é amplamente empregada em engenharia de refino e em estudos de conversão termoquímica para designar, de modo operacional, um conjunto de hidrocarbonetos leves associados a um intervalo típico de número de carbonos e de temperaturas de ebulição (Agencia Nacional do Petroleo, Gas Natural e Biocombustíveis, 2026). No contexto brasileiro, a Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP) descreve a gasolina automotiva como uma mistura complexa cujas moléculas podem variar tipicamente de 5 a 12 átomos de carbono e cuja ebulição se inicia em torno de 30 °C, com ponto final de ebulição de até aproximadamente 215 °C (Agencia Nacional do Petroleo, Gas Natural e Biocombustíveis, 2026). Esse ponto final representa a temperatura na qual praticamente a totalidade da amostra é vaporizada em um ensaio padronizado de destilação, delimitando o limite superior de volatilidade dos hidrocarbonetos considerados dentro da faixa da gasolina. Em termos complementares, classificações técnicas baseadas em “faixas por número de carbonos” também descrevem a faixa de compostos orgânicos típica da gasolina como aproximadamente C6–C12 (frequentemente denominada, em inglês, *gasoline range organics* — GRO), com variações metodológicas conforme o objetivo analítico e o método utilizado (ALS Global, 2026).

Essas definições são essenciais para evitar uma confusão recorrente em trabalhos de reciclagem química: identificar uma fração “na faixa da gasolina” significa, estritamente, enquadrar uma parcela do produto em um intervalo de volatilidade ou de número de carbonos compatível com o observado em gasolinas, e não afirmar que o material resultante atenda às especificações regulatórias de um combustível automotivo comercial (Agencia Nacional do Petroleo, Gas Natural e Biocombustíveis, 2026). Na prática, a conformidade de uma gasolina comercial envolve requisitos adicionais (por exemplo, parâmetros de volatilidade em pontos específicos de recuperação, estabilidade, composição restrita, teor de contaminantes e outros critérios normativos) que não são garantidos apenas por um corte de ebulição (ASTM International, 2024). Assim, em estudos de pirólise de polímeros, especialmente do PET, o uso da expressão “faixa da gasolina” deve ser interpretado como uma classificação termo-física e composicional preliminar, adequada para estudos exploratórios e comparações com literatura, mas insuficiente, por si só, para caracterizar o produto como “combustível final” (Agencia Nacional do Petroleo, Gas Natural e Biocombustíveis, 2026) (ASTM International, 2024).

No caso específico do PET, a possibilidade de obtenção de frações leves com volatilidade compatível com a faixa da gasolina decorre de sua conversão termoquímica em uma mistura de gases e compostos condensáveis, cuja composição depende das condições operacionais e do arranjo do reator (Zakharyan; Maksimov, 2023). Revisões recentes sobre pirólise de PET descrevem que a degradação do poliéster aromático tende a formar uma fração condensável com significativa presença de espécies aromáticas e oxigenadas, além de frações gasosas contendo produtos de desoxigenação, como CO e CO₂, o que diferencia o óleo de PET daqueles provenientes de poliolefinas (Zakharyan; Maksimov, 2023). Em abordagens de reciclagem terciária via pirólise, também se destaca que a rota térmica pode gerar simultaneamente produtos com potencial de uso energético e químico, ainda que a adequação do óleo a aplicações como combustível dependa de sua composição e, em muitos casos, de etapas posteriores de separação e beneficiamento (Figueiredo *et al.*, 2015).

Dessa forma, ao discutir “óleo combustível na faixa da gasolina” a partir de PET, é necessário distinguir pelo menos três camadas de análise: (i) **faixa de ebulição** (volatilidade) e **faixa de número de carbonos** (por exemplo, C5–C12 ou C6–C12, conforme critério adotado); (ii) **natureza química** da fração (teor de aromáticos, oxigenados e outros grupos funcionais); e (iii) **conformidade regulatória** com especificações de gasolina automotiva (Agencia Nacional do Petroleo, Gas Natural e Biocombustíveis, 2026) (ALS Global, 2026). A primeira camada é útil para definir cortes e para quantificar, em bases comparáveis, o potencial de obtenção de frações “tipo gasolina” a partir de uma mistura complexa (ASTM International, 2024). A segunda camada é particularmente crítica para o PET, pois a presença de oxigênio na estrutura do polímero favorece a formação de compostos oxigenados na fração condensável, os quais podem impactar propriedades como acidez, estabilidade e corrosividade, restringindo o uso direto como combustível (Zakharyan; Maksimov, 2023). Já a terceira camada envolve requisitos normativos e de desempenho (por exemplo, volatilidade medida por destilação padronizada e outros parâmetros), que não são satisfeitos automaticamente por um simples enquadramento por ebulição (Agencia Nacional do Petroleo, Gas Natural e Biocombustíveis, 2026) (ASTM International, 2024).

Na literatura, a discussão sobre frações leves provenientes de pirólise de PET costuma enfatizar que a distribuição de produtos e a seletividade a compostos desejáveis dependem fortemente de temperatura, tempo de residência e reações secundárias em fase vapor (Zakharyan; Maksimov, 2023). Em termos qualitativos, condições mais severas podem aumentar o craquea-

mento secundário e deslocar parte dos condensáveis para produtos gasosos, enquanto condições moderadas podem preservar maior quantidade de condensáveis, embora com composição ainda marcada por aromáticos e oxigenados (Zakharyan; Maksimov, 2023). Revisões de processo também ressaltam que o projeto do reator e a hidrodinâmica afetam o contato dos vapores com zonas quentes e superfícies, alterando a extensão de reações secundárias que moldam a fração leve potencialmente atribuível à faixa da gasolina (Zakharyan; Maksimov, 2023). Assim, ao se analisar a “fração gasolina” em produtos de pirólise de PET, a comparação com a literatura deve considerar cuidadosamente as condições de processo e o critério adotado para corte de ebulição (por exemplo, intervalo de temperaturas ou intervalos de carbonos) (ALS Global, 2026) (ASTM International, 2024).

Por fim, é importante explicitar a forma correta (e academicamente segura) de tratar essa fração no âmbito de um estudo sem catalisadores e sem etapas de beneficiamento. A fração obtida pode ser classificada como pertencente à faixa de ebulição (e de número de carbonos) associada à gasolina, mas não deve ser descrita como “gasolina” no sentido regulatório ou comercial (Agencia Nacional do Petroleo, Gas Natural e Biocombustíveis, 2026). Esse cuidado é particularmente relevante para o PET, dado que revisões indicam a formação de compostos aromáticos e oxigenados na fração condensável, o que tende a exigir etapas adicionais para adequação do produto a usos finais (Zakharyan; Maksimov, 2023) (Figueiredo *et al.*, 2015). Portanto, neste trabalho, a terminologia “na faixa da gasolina” é empregada como um critério de classificação por volatilidade e por faixa de carbonos, adequado para análises preliminares e para a comparação com tendências reportadas na literatura, sem implicar atendimento às especificações de gasolina automotiva comercial (Agencia Nacional do Petroleo, Gas Natural e Biocombustíveis, 2026) (ASTM International, 2024).

2.4 MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA PIRÓLISE DE PET

A modelagem e simulação de processos tem sido empregada como uma etapa estratégica em estudos de reciclagem química e conversão termoquímica, pois permite avaliar cenários operacionais, estimar distribuições de produtos e realizar análises de sensibilidade antes de investimentos experimentais e de ampliação de escala (Hasan *et al.*, 2024). Em particular, simulações em regime estacionário são frequentemente utilizadas para capturar balanços de massa e energia e para investigar tendências sob diferentes condições de operação, servindo como uma

ferramenta de triagem e de apoio à tomada de decisão em estágios preliminares de desenvolvimento tecnológico (Hasan *et al.*, 2024) (Azam; Vete; Afzal, 2022). Nessa perspectiva, o valor da simulação não se restringe à obtenção de números pontuais, mas à capacidade de estruturar o problema, explicitar premissas, rastrear coerência termodinâmica e comparar resultados com faixas reportadas na literatura, reduzindo incertezas de projeto (Hasan *et al.*, 2024).

Entre as ferramentas disponíveis para simulação de processos, o Aspen Plus® é amplamente utilizado em estudos de conversão termoquímica por oferecer uma biblioteca robusta de modelos de propriedades e blocos unitários, incluindo modelos de reatores adequados a diferentes níveis de detalhe (estequiométrico, equilíbrio, cinético e baseados em rendimentos). Além disso, trabalhos recentes mostram o uso do Aspen Plus® para desenvolver modelos de pirólise validados com dados experimentais, permitindo análises de sensibilidade em parâmetros como temperatura, tempo de residência e características de alimentação, bem como avaliações técnico-econômicas em escala de planta (Hasan *et al.*, 2024). Em aplicações de pirólise e processos correlatos, também é relatada a utilização combinada de reatores dos tipos *Yield* e *Gibbs* para representar, respectivamente, a decomposição inicial e a evolução termodinâmica subsequente por minimização de energia livre de Gibbs, estratégia útil quando a descrição cinética detalhada não está disponível (Romano; Melchiorre; Veglio, 2023).

Um aspecto central na construção de modelos de pirólise é a seleção do tipo de reator, que deve ser compatível com o nível de informação disponível (estequiometria, cinética, equilíbrio) e com o objetivo do estudo (tendências, fechamento de balanços, predição de composições) (University of Michigan, 2026). Em Aspen Plus®, modelos como RStoic, RYield, REquil e RGibbs são frequentemente classificados como “não cinéticos” no sentido de não exigirem leis de velocidade; o RStoic é apropriado quando a estequiometria é conhecida e a cinética é desconhecida ou desprezível, enquanto o RYield é indicado quando nem a estequiometria nem a cinética são conhecidas, mas existem rendimentos de produtos a serem impostos ao modelo (University of Michigan, 2026). Já os reatores REquil e RGibbs podem ser empregados quando se deseja representar equilíbrio químico (e, no caso do RGibbs, por minimização de Gibbs), especialmente em sistemas com múltiplos produtos potenciais e ausência de dados cinéticos confiáveis (University of Michigan, 2026). Essa taxonomia é particularmente relevante para a pirólise de polímeros, pois a decomposição térmica pode envolver redes reacionais complexas e dependentes de condições e matrizes, tornando comum o uso de abordagens fenomenológicas baseadas em rendimentos globais em estudos preliminares (Hasan *et al.*, 2024).

No caso de resíduos poliméricos e, especificamente, do PET, uma dificuldade recorrente em simulação é a representação do material de entrada e do conjunto de produtos gerados. Muitos estudos tratam polímeros como componentes não convencionais e acoplam essa representação a etapas de decomposição impostas (por exemplo, via RYield) para gerar correntes de compostos convencionais ou pseudocomponentes, os quais podem então ser manipulados por modelos termodinâmicos e operações de separação padrão do simulador (Romano; Melchiorre; Veglio, 2023). Em trabalhos de simulação de pirólise, o uso de modelos de propriedades do tipo Peng–Robinson é frequentemente reportado quando o foco está em misturas ricas em hidrocarbonetos e em frações condensáveis de ampla faixa de volatilidade, dado o caráter generalista desse modelo cúbico para sistemas de refino e petroquímica (Azam; Vete; Afzal, 2022). Assim, a modelagem do óleo de pirólise costuma envolver escolhas pragmáticas de representação: seja por um conjunto de compostos “marcadores” (agrupamento por classes de volatilidade, do inglês *lumping*), seja por pseudocomponentes associados a faixas de ebulição, de modo a viabilizar balanços e análises paramétricas com um nível de complexidade condizente com o objetivo do estudo (Hasan *et al.*, 2024).

Para garantir rigor acadêmico, a literatura enfatiza que modelos simplificados devem ser acompanhados de estratégias de verificação e validação, mesmo quando não se dispõe de experimentação própria. Um procedimento comum consiste em validar o modelo contra dados experimentais de referência (da literatura) para uma condição base e, em seguida, explorar tendências via análise de sensibilidade, avaliando se o comportamento do modelo permanece coerente em relação a mudanças em temperatura e outras variáveis-chave (Hasan *et al.*, 2024). Além disso, análises de sensibilidade permitem identificar regiões de operação onde efeitos como craqueamento secundário podem alterar a distribuição entre frações gasosa e líquida, auxiliando na interpretação física dos resultados e na discussão das limitações do modelo (Hasan *et al.*, 2024). Em aplicações onde o objetivo inclui também comparação de alternativas tecnológicas, trabalhos mostram que inventários gerados por simulação podem ser usados como base para avaliações complementares (por exemplo, avaliação de ciclo de vida — ACV), desde que as premissas sejam explicitadas e que as fronteiras do sistema sejam claramente definidas (Azam; Vete; Afzal, 2022).

Dessa forma, a modelagem da pirólise de PET em Aspen Plus® busca equilibrar dois aspectos opostos: de um lado, a simplicidade necessária para tornar o modelo reproduzível e de fácil aplicação; de outro, o nível mínimo de complexidade necessário para representar o

comportamento físico do sistema de forma coerente. Ao utilizar blocos não cinéticos e representar o polímero por uma decomposição imposta, o modelo torna-se adequado para estudos exploratórios e para análise de tendências, enquanto suas limitações permanecem vinculadas à representatividade dos rendimentos adotados, à simplificação da composição do óleo e à ausência de mecanismos detalhados para reações secundárias em fase vapor (University of Michigan, 2026). Assim, quando o escopo é avaliar a viabilidade conceitual e estimar a fração condensável e seus cortes de ebulição sob diferentes temperaturas, a literatura oferece suporte ao emprego de modelos simplificados em regime estacionário, desde que acompanhados de validação por referência e discussão explícita das premissas e restrições do modelo (Romano; Melchiorre; Veglio, 2023).

3 METODOLOGIA

3.1 FERRAMENTA DE SIMULAÇÃO, ESCOPO E PARÂMETROS DO MODELO

A simulação foi desenvolvida no Aspen Plus® em regime estacionário, com o objetivo de representar a pirólise térmica não catalítica do poli(tereftalato de etileno) (PET) e avaliar a distribuição de produtos em termos de frações gasosa, líquida condensável e resíduo sólido (char), bem como a fração do produto líquido associada à faixa de ebulição da gasolina.

Foi adotada uma abordagem fenomenológica baseada em rendimentos globais, utilizando o reator do tipo *RYield*. Conforme discutido na Revisão Bibliográfica, esse tipo de reator é indicado quando não há conhecimento detalhado da estequiometria ou da cinética das reações, mas existe uma distribuição global de produtos que pode ser especificada diretamente (University of Michigan, 2026). Dessa forma, a pirólise do PET é representada como uma decomposição global em produtos definidos, permitindo a análise de tendências de processo.

O fluxograma adotado consiste nas seguintes etapas principais:

- Alimentação contendo PET (sólido não convencional) e nitrogênio (gás inerte);
- Reator *RYield* para decomposição térmica;
- Resfriamento do efluente do reator;
- Separação de fases utilizando um bloco *Flash2*.

3.1.1 Parâmetros operacionais

As condições operacionais utilizadas na simulação são apresentadas na Tabela 1.

Tabela 1 – Parâmetros operacionais do modelo de simulação

Parâmetro	Valor	Unidade
Vazão de PET	100	kg/h
Vazão de N ₂	50	kg/h
Temperatura de alimentação	25	°C
Pressão de operação	1,01325	bar
Temperatura de reação	450 / 500 / 550	°C
Temperatura de resfriamento	40	°C
Temperatura do <i>flash</i>	25	°C

Fonte: Elaborado pelo autor, com dados extraídos do Aspen Plus®.

O nitrogênio foi utilizado como gás inerte para representar uma atmosfera não oxidante, condição típica da pirólise, além de contribuir para a estabilidade numérica da simulação.

3.1.2 Definição dos produtos

Os produtos da pirólise foram representados por um conjunto simplificado de componentes:

- CO e CO₂: principais gases gerados por reações de desoxigenação do PET;
- GASOLINE_LUMP: pseudocomponente leve associado à faixa de gasolina;
- HEAVY_LIQUID: pseudocomponente representando frações líquidas mais pesadas;
- CHAR: resíduo sólido carbonáceo.

A simplificação da fase líquida em pseudocomponentes é necessária devido à elevada complexidade do óleo de pirólise, que pode conter centenas de compostos orgânicos. A estratégia de representar a fase líquida por classes de volatilidade (agrupamento por faixas, do inglês *lumping*) é amplamente utilizada em modelagem de processos de pirólise.

3.1.3 Rendimentos de reação

Os rendimentos mássicos utilizados no reator *RYield* foram definidos em função da temperatura, conforme apresentado na Tabela 2.

Tabela 2 – Distribuição de rendimentos no reator *RYield*

Componente	450 °C	500 °C	550 °C
GASOLINE_LUMP	0,55	0,50	0,45
HEAVY_LIQUID	0,20	0,20	0,15
CO	0,10	0,15	0,20
CO ₂	0,10	0,10	0,15
CHAR	0,05	0,05	0,05

Fonte: Elaborado pelo autor, com dados extraídos do Aspen Plus®.

A variação dos rendimentos com a temperatura foi definida de modo a reproduzir o comportamento observado experimentalmente na pirólise de polímeros, em que o aumento da temperatura promove maior formação de gases e redução da fração líquida devido à ocorrência

de reações secundárias de craqueamento (Yaqoob; Ali; Khalid, 2024). Estudos experimentais mostram que a pirólise de plásticos ocorre tipicamente entre 450 e 700 °C, sendo que temperaturas mais altas favorecem a formação de gás, enquanto temperaturas intermediárias maximizam a produção de líquidos (Yaqoob; Ali; Khalid, 2024; Zhao *et al.*, 2025).

3.1.4 Tratamento dos dados

Durante a simulação, o componente sólido (char) é mantido na corrente líquida por simplificação do modelo. Para fins de análise, os resultados foram tratados conforme segue:

- Fração gasosa: corrente GAS excluindo o nitrogênio;
- Fração líquida: soma de GASOLINE_LUMP e HEAVY_LIQUID;
- Fração sólida: massa de CHAR separada da corrente líquida.

Essa abordagem permite obter resultados fisicamente consistentes e comparáveis com dados experimentais reportados na literatura para processos de pirólise.

Adicionalmente, ressalta-se que o presente modelo foi desenvolvido com foco no balanço de massa, não sendo realizada uma análise detalhada do balanço de energia. Essa escolha decorre da complexidade associada à utilização de componentes não convencionais e pseudo-componentes no Aspen Plus®, cuja representação termodinâmica pode introduzir incertezas significativas na estimativa de propriedades energéticas. Dessa forma, o modelo foi direcionado para a análise da distribuição mássica dos produtos e suas tendências em função da temperatura, mantendo coerência com o objetivo proposto no trabalho.

3.2 CONFIGURAÇÃO TERMODINÂMICA E TRATAMENTO DE SÓLIDOS

A configuração termodinâmica do modelo foi definida de forma a garantir consistência com a natureza do processo de pirólise, que envolve simultaneamente fases gasosa, líquida e sólida. Para a descrição das propriedades dos componentes convencionais, foi adotada a equação de estado de Peng–Robinson, amplamente utilizada em sistemas envolvendo hidrocarbonetos e gases leves, sendo adequada para cálculos de equilíbrio líquido-vapor em unidades do tipo *flash*.

A escolha do modelo de Peng–Robinson é justificada por sua capacidade de representar sistemas multicomponentes com ampla faixa de volatilidade, sendo frequentemente empregada na simulação de processos petroquímicos e de conversão térmica (Yaqoob; Ali; Khalid, 2024).

Os rendimentos utilizados no reator *RYield* foram definidos com base em tendências reportadas na literatura para a pirólise de plásticos, considerando a distribuição típica entre frações líquida, gasosa e sólida (Yaqoob; Ali; Khalid, 2024; Zhao *et al.*, 2025; Jia; Ben; Luo, 2020). Os valores adotados foram ajustados de modo a representar o aumento da formação de gases com a elevação da temperatura e a redução relativa da fração líquida, consistentes com o comportamento descrito nesses estudos de pirólise térmica (Yaqoob; Ali; Khalid, 2024; Zhao *et al.*, 2025).

Os valores completos de rendimentos utilizados em cada condição de simulação encontram-se apresentados no Apêndice A.

3.2.1 Classe de corrente e tratamento de fases

A simulação foi configurada utilizando a classe de corrente *MIXNC*, que combina sub-correntes convencionais (*MIXED*) e não convencionais (*NC*). Essa configuração permite representar simultaneamente:

- Fase gasosa (N_2 , CO e CO_2);
- Fase líquida (pseudocomponentes);
- Fase sólida (PET e char).

Essa abordagem é necessária, pois o PET não pode ser representado por uma única estrutura molecular durante a pirólise, sendo tratado como um sólido não convencional, conforme prática usual na simulação de materiais complexos.

3.2.2 Modelagem de sólidos não convencionais

Os componentes PET e CHAR foram definidos como sólidos não convencionais. Em Aspen Plus[®], esses componentes não são descritos por propriedades moleculares, mas por propriedades globais baseadas em análises empíricas.

Os modelos utilizados foram:

- *HCOALGEN* para cálculo de entalpia;
- *DCOALIGT* para cálculo de densidade.

Esses modelos são amplamente utilizados para materiais sólidos complexos, como carvão, biomassa e resíduos poliméricos, nos quais a estrutura química detalhada não é completamente definida (Haydary, 2019). Além disso, tais componentes não participam diretamente dos cálculos de equilíbrio de fases, sendo apenas transportados pelas correntes.

A caracterização desses materiais requer a definição de:

- Análise elementar (*ULTANAL*);
- Análise imediata (*PROXANAL*);
- Análise de enxofre (*SULFANAL*).

3.2.3 Caracterização do PET

O PET foi caracterizado com base na composição da sua unidade repetitiva ($C_{10}H_8O_4$). Essa abordagem é consistente com a prática de modelar polímeros sintéticos utilizando composição elementar equivalente (Jia; Ben; Luo, 2020).

3.2.4 Caracterização do char

O resíduo sólido (*char*) foi tratado como um material carbonáceo não volátil, utilizado principalmente para fechamento do balanço de massa. Em processos de pirólise, a formação de char ocorre em menor proporção e tende a diminuir com o aumento da temperatura, dependendo das condições operacionais (Zhao *et al.*, 2025).

3.2.5 Equilíbrio de fases

No modelo adotado, apenas os componentes convencionais e pseudocomponentes participam do cálculo de equilíbrio líquido-vapor no bloco *Flash2*. Os sólidos não convencionais não participam desses cálculos, o que implica que:

- A separação gás-líquido é governada exclusivamente pela volatilidade dos pseudocomponentes;
- O char não é automaticamente separado como fase sólida;
- A separação do char é realizada posteriormente na etapa de tratamento de dados.

Cabe destacar que o modelo não considera nenhum equilíbrio sólido-líquido (ESL) entre o char (ou o PET não convertido) e a fase líquida pseudocomponente. Essa ausência não decorre de uma escolha termodinâmica sobre a solubilidade do char no óleo de pirólise, mas sim do tratamento que o Aspen Plus[®] dá aos sólidos não convencionais: por definição, esses componentes não participam de nenhum cálculo de equilíbrio de fases do simulador (nem líquido-vapor, nem sólido-líquido), sendo apenas transportados mecanicamente pelas correntes do processo. Assim, o char é arrastado junto à corrente líquida por uma limitação estrutural da abordagem de sólidos não convencionais, e não porque o modelo tenha calculado — ou assumido — que ele se dissolve na fase líquida. Essa simplificação é reconhecida como uma das limitações do modelo, discutida em maior detalhe no Capítulo 4.

Essa abordagem é consistente com a forma como o Aspen Plus[®] trata sólidos não convencionais, que não são considerados nos cálculos de equilíbrio termodinâmico (Haydary, 2019).

3.3 DEFINIÇÃO DOS COMPONENTES DO MODELO

A modelagem da pirólise do PET requer a definição adequada dos componentes envolvidos, considerando a complexidade do material polimérico e dos produtos gerados durante o processo. Foram definidos três grupos principais de componentes: convencionais, não convencionais e pseudocomponentes.

3.3.1 Componentes convencionais

Os componentes convencionais incluídos no modelo correspondem às espécies químicas com estrutura molecular definida e disponíveis no banco de dados do Aspen Plus[®]. Foram considerados os seguintes:

- Nitrogênio (N₂), utilizado como gás inerte;

- Monóxido de carbono (CO);
- Dióxido de carbono (CO₂).

O nitrogênio foi utilizado para representar uma atmosfera inerte, evitando reações de oxidação e simulando as condições típicas da pirólise térmica, que ocorre na ausência de oxigênio (Yaqoob; Ali; Khalid, 2024). Os gases CO e CO₂ representam os principais produtos gasosos associados às reações de desoxigenação do PET durante a decomposição térmica (Jia; Ben; Luo, 2020).

3.3.2 Componentes não convencionais

O PET e o resíduo sólido (char) foram definidos como componentes não convencionais, uma vez que não apresentam composição molecular única durante o processo de pirólise, sendo caracterizados por propriedades globais.

O PET foi modelado como um sólido não convencional baseado na sua unidade repetitiva, cuja fórmula empírica é C₁₀H₈O₄. A partir dessa estrutura, foram calculadas as frações mássicas apresentadas na Tabela 3.

Tabela 3 – Composição elementar do PET (base seca)

Elemento	Fração mássica
Carbono (C)	0,625
Hidrogênio (H)	0,042
Oxigênio (O)	0,333

Fonte: Elaborado pelo autor, com dados extraídos do Aspen Plus[®].

Esses valores foram obtidos a partir da massa molar de cada elemento em relação à massa molar total do monômero do PET (C₁₀H₈O₄), representando o percentual mássico que cada elemento contribui para a composição da unidade repetitiva do polímero. Essa abordagem é amplamente utilizada na modelagem de polímeros, permitindo representar materiais complexos por meio de uma composição elementar equivalente (Jia; Ben; Luo, 2020).

A análise imediata foi definida assumindo o PET como completamente volatilizável:

Tabela 4 – Análise imediata do PET

Parâmetro	Fração
Material volatilizável	1,00
Carbono fixo	0,00
Cinzas	0,00

Fonte: Elaborado pelo autor, com dados extraídos do Aspen Plus[®].

Essa simplificação é consistente com o comportamento térmico de polímeros, que apresentam alta volatilidade e baixo teor de resíduos sólidos (Yaqoob; Ali; Khalid, 2024). É importante esclarecer que essa caracterização (Tabela 4) descreve uma propriedade de entrada do PET, utilizada pelo modelo *HCOALGEN* apenas para o cálculo de entalpia do sólido não convencional, e não representa uma previsão de que 100% da massa de PET será efetivamente convertida em produtos voláteis durante a simulação. A fração de PET que é convertida em char (resíduo sólido não volatilizado) é determinada de forma totalmente independente, pela tabela de rendimentos do reator *RYield* (Tabela 2), que impõe entre 5% de conversão a CHAR em todas as temperaturas simuladas. Ou seja, a análise imediata e o rendimento de char do *RYield* são duas etapas de modelagem desacopladas: a primeira caracteriza o material de entrada para fins de propriedades termodinâmicas, e a segunda define, de forma independente, a distribuição real de produtos da reação — não havendo, portanto, inconsistência no balanço de massa entre elas.

O char foi modelado como um sólido não convencional de natureza predominantemente carbonácea, sendo utilizado para representar a fração sólida remanescente da pirólise. A sua inclusão é essencial para o fechamento do balanço de massa.

A formação de char em processos de pirólise de plásticos é tipicamente baixa, sendo frequentemente inferior a 10% em massa, dependendo das condições de operação (Zhao *et al.*, 2025).

3.3.3 Pseudocomponentes líquidos

Devido à elevada complexidade da fase líquida gerada na pirólise do PET, composta por diversos compostos aromáticos e oxigenados, adotou-se uma abordagem baseada em pseudocomponentes.

Foram definidos dois pseudocomponentes líquidos:

- *GASOLINE_LUMP*: fração leve associada à faixa de ebulição da gasolina;

- *HEAVY_LIQUID*: fração líquida mais pesada.

Esses pseudocomponentes foram definidos no Aspen Plus® como componentes hipotéticos, caracterizados por propriedades globais, como o ponto normal de ebulição (PNE) e a massa molar (MM).

Tabela 5 – Propriedades dos pseudocomponentes

Componente	PNE (K)	MM (g/mol)
GASOLINE_LUMP	450	100
HEAVY_LIQUID	700	200

Fonte: Elaborado pelo autor, com dados extraídos do Aspen Plus®.

A abordagem de agrupamento por faixa de volatilidade (*lumping*) é amplamente empregada na modelagem de óleos complexos, permitindo representar o comportamento do sistema sem necessidade de definir cada composto individualmente (Yaqoob; Ali; Khalid, 2024).

3.3.4 Considerações sobre a fração gasolina

A fração denominada “gasolina” neste trabalho refere-se exclusivamente a um corte de volatilidade representado pelo pseudocomponente *GASOLINE_LUMP*. Essa definição não implica conformidade com especificações comerciais de gasolina, mas sim uma classificação baseada em comportamento termodinâmico.

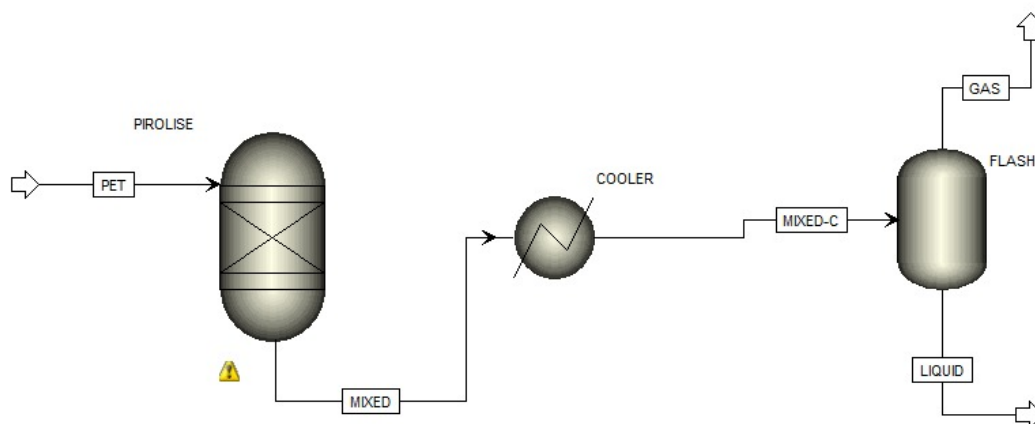
Durante a separação por *flash*, parte dessa fração pode permanecer na fase gasosa devido à sua elevada volatilidade, sendo posteriormente considerada na análise dos resultados.

3.4 CONSTRUÇÃO DO FLUXOGRAMA DE SIMULAÇÃO

O fluxograma do processo foi desenvolvido no Aspen Plus® de forma simplificada, visando representar as principais etapas da pirólise térmica do PET e posterior separação das fases. A estrutura do modelo contempla quatro blocos principais: alimentação, reação, resfriamento e separação.

O fluxograma do processo pode ser representado conforme ilustrado na Figura 2.

Figura 2 – Fluxograma da simulação do processo de pirólise no Aspen Plus®



Fonte: Elaborado pelo autor, com dados extraídos do Aspen Plus®.

Na Figura 2, observa-se a sequência das etapas que compõem o processo modelado, incluindo a alimentação contendo PET e nitrogênio, o reator de pirólise do tipo *RYield*, a etapa de resfriamento e a unidade de separação de fases (*Flash2*). Esse arranjo permite representar de forma simplificada o comportamento do sistema, destacando as principais transformações e separações envolvidas no processo.

3.4.1 Alimentação

A corrente de alimentação (*FEED*) é composta por PET (sólido não convencional) e nitrogênio, definido como gás inerte. O PET é alimentado na subcorrente sólida (*NC*) e o N_2 na subcorrente convencional (*MIXED*), utilizando a classe de corrente *MIXNC*.

O nitrogênio é utilizado para representar uma atmosfera inerte, condição essencial para processos de pirólise, que ocorrem na ausência de oxigênio. Além de seu papel qualitativo — reforçar, no fluxograma, que a decomposição térmica do PET deve ocorrer em atmosfera subestequiométrica —, o N_2 também contribui para a estabilidade numérica da simulação no Aspen Plus®, conforme já mencionado na Seção 3.1.1, ao garantir uma fase gasosa presente em todas as correntes do fluxograma, mesmo antes da formação dos produtos gasosos da pirólise.

3.4.2 Reator de pirólise (RYield)

A decomposição térmica do PET foi modelada utilizando o bloco *RYield*. Esse reator é apropriado para situações em que não há conhecimento detalhado da cinética ou da estequiometria das reações, sendo utilizado quando a distribuição de produtos é previamente definida (University of Michigan, 2026). É importante destacar que o bloco *RYield* não calcula a distribuição de produtos a partir de nenhum modelo cinético ou termodinâmico interno: ele apenas aplica, diretamente sobre a vazão mássica de PET alimentada, a tabela de rendimentos especificada pelo usuário (Tabela 2). Assim, o rendimento é o único parâmetro que efetivamente controla a distribuição de produtos entre as três condições simuladas — a temperatura informada ao bloco corresponde à condição operacional associada à corrente de saída (relevante, por exemplo, para o cálculo de entalpia e para a etapa de resfriamento subsequente), mas não recalcula os rendimentos automaticamente; a mudança de rendimento entre 450, 500 e 550 °C foi feita manualmente pelos autores a cada simulação.

Os valores de rendimento adotados na Tabela 2 foram escolhidos de forma qualitativa, a partir das tendências e ordens de grandeza reportadas em três trabalhos de referência sobre pirólise de plásticos e de PET (Yaqoob; Ali; Khalid, 2024; Zhao *et al.*, 2025; Jia; Ben; Luo, 2020), e não a partir de um cálculo direto ou ajuste estatístico sobre esses dados — a proposta foi reproduzir, de forma simplificada, o comportamento qualitativo de aumento da fração gasosa e redução da fração líquida com a temperatura, amplamente descrito nesses estudos.

No bloco *RYield*, o PET é completamente convertido em produtos gasosos (CO e CO₂), líquidos (GASOLINE_LUMP e HEAVY_LIQUID) e sólidos (char), de acordo com os rendimentos especificados para cada temperatura de operação. As propriedades termodinâmicas dos componentes convencionais (N₂, CO e CO₂) envolvidos no bloco são calculadas pelo método de Peng–Robinson, mesmo modelo termodinâmico adotado no restante do fluxograma (Seção 3.2), enquanto PET e char, por serem sólidos não convencionais, têm suas propriedades calculadas separadamente pelos modelos HCOALGEN e DCOALIGT.

O nitrogênio (N₂) foi inserido na alimentação do reator, mas não participa da distribuição de rendimentos nem do balanço de massa reacional especificado na Tabela 2 — ou seja, ele atravessa o bloco *RYield* sem sofrer conversão. Sua inclusão tem caráter qualitativo/representativo: o objetivo foi reforçar, no fluxograma da simulação, que a pirólise térmica deve ocorrer em atmosfera inerte (ausência de oxigênio), e não atender a uma necessidade de cálculo do

modelo, uma vez que o balanço de massa do inerte foi desconsiderado para fins de determinação dos rendimentos. Reconhece-se essa opção como uma simplificação do modelo, discutida também no Capítulo 4.

A temperatura do reator foi variada entre 450 °C, 500 °C e 550 °C para análise da influência das condições operacionais na distribuição de produtos.

3.4.3 Resfriamento

Após a pirólise, a corrente de saída do reator apresenta alta temperatura e alto teor de vapores condensáveis. Para promover a separação dos produtos líquidos, foi utilizado um bloco do tipo *Heater*, operando como resfriador (*Cooler*), com temperatura de saída especificada em 40 °C.

Essa etapa é fundamental para permitir a condensação parcial dos produtos orgânicos, reduzindo a fração de compostos que permanecem na fase gasosa.

3.4.4 Separação de fases (Flash2)

A corrente resfriada foi enviada para um bloco do tipo *Flash2*, onde ocorre a separação entre fase vapor e fase líquida com base no equilíbrio termodinâmico. O bloco opera a 25 °C e pressão atmosférica.

A denominação “*Flash2*” corresponde à nomenclatura padrão do Aspen Plus® para o bloco de separação flash bifásica (vapor-líquido), em contraposição ao bloco *Flash3*, utilizado quando há necessidade de separar três fases simultaneamente (por exemplo, vapor, líquido e uma segunda fase líquida). Não existe, portanto, um bloco “*Flash1*” no simulador; o *Flash2* foi escolhido por ser o bloco adequado à separação vapor-líquido considerada neste modelo.

Nesse estágio:

- A corrente de topo (*GAS*) contém compostos não condensáveis (CO, CO₂), nitrogênio e frações leves não liquefeitas;
- A corrente de fundo (*LIQUID*) contém os pseudocomponentes líquidos e o char.

Devido à natureza dos componentes não convencionais, o char não é separado como uma fase sólida distinta no *flash*, sendo arrastado na corrente líquida. Esse comportamento decorre

do fato de que sólidos não convencionais não participam dos cálculos de equilíbrio de fases no Aspen Plus[®].

3.4.5 Considerações sobre a estrutura do modelo

O fluxograma adotado representa uma simplificação intencional do processo de pirólise, focada na análise de distribuição de produtos e comportamento de separação. Não foram considerados efeitos como:

- Cinética detalhada das reações;
- Reações secundárias no resfriamento;
- Separação explícita da fase sólida.

Apesar dessas simplificações, o modelo é capaz de reproduzir as tendências principais do processo, sendo adequado para estudos de análise de sensibilidade e avaliação de rendimento de produtos em função da temperatura, conforme amplamente adotado em estudos de pirólise de polímeros (Yaqoob; Ali; Khalid, 2024).

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 RESULTADOS DA SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE PIRÓLISE

A simulação do processo de pirólise térmica do PET foi realizada no Aspen Plus® para três condições de temperatura: 450 °C, 500 °C e 550 °C, mantendo-se constantes as demais variáveis operacionais.

Os resultados obtidos correspondem às vazões e composições das correntes de saída do sistema, após a etapa de separação por *flash*. O modelo permitiu identificar a distribuição dos produtos entre fase gasosa e fase líquida, bem como a presença de frações condensáveis e não condensáveis.

A corrente gasosa é composta principalmente por gases não condensáveis, como monóxido de carbono (CO) e dióxido de carbono (CO₂), além do nitrogênio utilizado como gás inerte e pequenas frações de compostos orgânicos leves que não se condensam nas condições do processo.

A corrente líquida contém os pseudocomponentes definidos no modelo, representando as frações condensáveis do óleo de pirólise, além do resíduo sólido (char), que permanece nesta corrente devido à forma como os componentes não convencionais são tratados no Aspen Plus®.

Os resultados simulados indicam que a distribuição de produtos varia significativamente com a temperatura de operação, evidenciando a sensibilidade do processo de pirólise às condições térmicas. Essa variação será analisada em maior detalhe nas seções seguintes, após o tratamento dos dados.

Os dados completos das correntes principais do processo, para as três temperaturas avaliadas, são apresentados nos Apêndices B, C e D.

4.1.1 Apresentação dos resultados da simulação

Os resultados obtidos na simulação correspondem às vazões das correntes de saída do sistema após a etapa de separação por *flash*, para as três temperaturas de operação avaliadas.

A Tabela 6 apresenta as vazões das correntes gasosa e líquida para cada condição de temperatura.

Tabela 6 – Vazões das correntes de saída da simulação

Temperatura (°C)	GAS (kg/h)	LIQUID (kg/h)
450	74,32	75,68
500	79,58	70,42
550	90,24	59,76

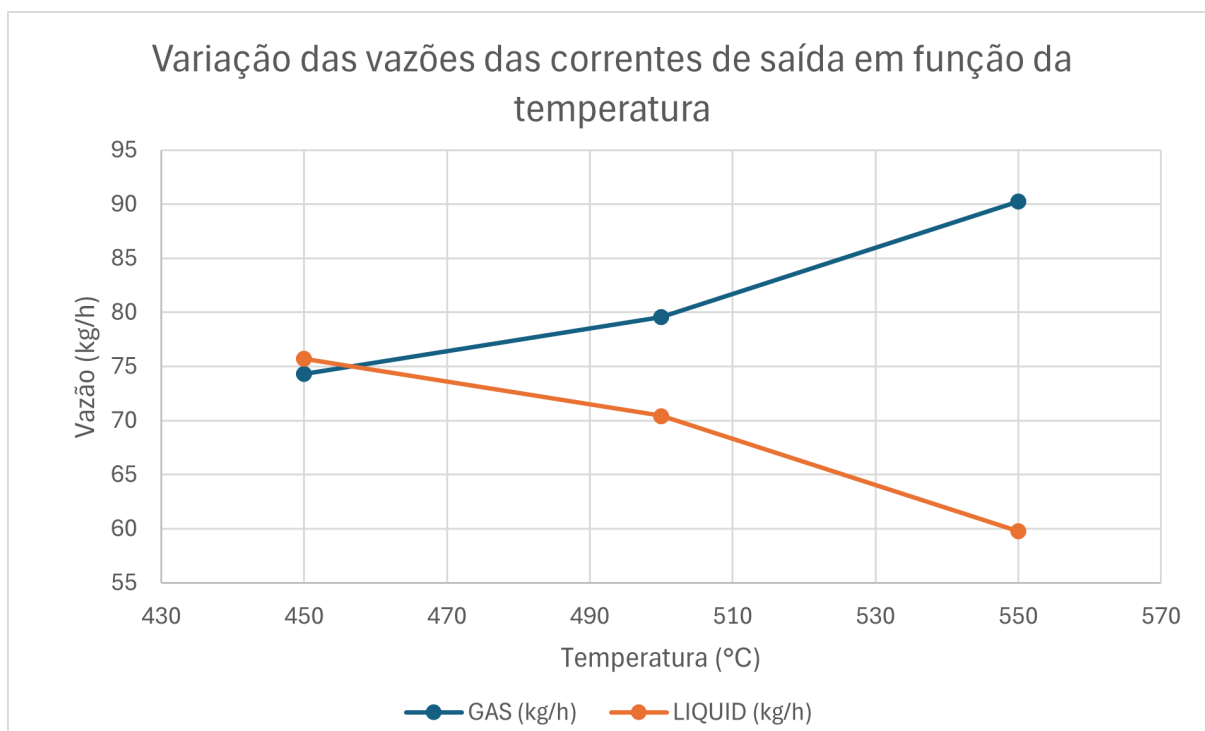
Fonte: Elaborado pelo autor, com dados extraídos do Aspen Plus®.

Para efeito de referência, a vazão total de alimentação do sistema é de 150,00 kg/h (100 kg/h de PET e 50 kg/h de N₂), valor que permite verificar a consistência do balanço de massa a partir da soma das correntes GAS e LIQUID apresentadas na Tabela 6.

Observa-se que, com o aumento da temperatura de reação, ocorre um aumento progressivo da vazão da corrente gasosa, enquanto a vazão da corrente líquida apresenta tendência de redução. Esse comportamento indica uma alteração na distribuição dos produtos da pirólise em função da severidade térmica do processo.

A Figura 3 apresenta a variação das vazões das correntes gasosa e líquida em função da temperatura de operação.

Figura 3 – Variação das vazões das correntes de saída em função da temperatura



Fonte: Elaborado pelo autor, com dados extraídos do Aspen Plus®.

A partir da análise da Figura 3, verifica-se que o aumento da temperatura promove maior formação de compostos voláteis, resultando no aumento da fração gasosa. Em contrapartida, a

redução da vazão da corrente líquida indica a diminuição da quantidade de produtos condensáveis, possivelmente associada ao aumento de reações secundárias de craqueamento térmico.

Adicionalmente, observa-se que a soma das vazões das correntes gasosa e líquida permanece aproximadamente constante, indicando consistência no balanço de massa do modelo, mesmo com a variação da distribuição dos produtos entre as fases.

Além das vazões das correntes de saída, é importante analisar de forma integrada o comportamento das principais correntes do processo, considerando não apenas as vazões totais, mas também suas composições e condições operacionais.

A Tabela 7 apresenta uma visão consolidada das correntes do processo de pirólise para a condição de 500 graus Celsius, incluindo temperatura, pressão, vazão mássica total, vazão volumétrica e frações mássicas dos componentes principais.

Tabela 7 – Tabela de correntes do processo de pirólise a 500 °C

Corrente	T (°C)	P (bar)	Vazão (kg/h)	Vazão (L/min)	PET	N ₂	CO	CO ₂	GASOLINE	HEAVY	CHAR
FEED	25	1,01325	150,00	728,68	0,6667	0,3333	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
RYIELD_OUT	500	1,01325	150,00	3328,83	0,0000	0,3333	0,1000	0,0667	0,3333	0,1333	0,0333
COOLER_OUT	40	1,01325	150,00	1132,41	0,0000	0,3333	0,1000	0,0667	0,3333	0,1333	0,0333
GAS	25	1,01325	79,58	1055,76	0,0000	0,6281	0,1884	0,1250	0,0583	0,0001	0,0000
LIQUID	25	1,01325	70,42	1,41	0,0000	0,0003	0,0001	0,0007	0,6441	0,2839	0,0710

Fonte: Elaborado pelo autor, com dados extraídos do Aspen Plus®.

As vazões volumétricas apresentadas na Tabela 7 são calculadas diretamente pelo Aspen Plus®, a partir das condições de temperatura, pressão e composição de cada corrente, utilizando o modelo termodinâmico de Peng–Robinson para estimar a densidade das fases envolvidas. Não há, portanto, conversão manual entre vazão mássica e volumétrica a partir de um valor fixo de densidade — ambos os resultados são obtidos diretamente do simulador.

A partir da análise da Tabela 7, observa-se que o PET é completamente convertido no reator do tipo *RYield*, sendo transformado em produtos gasosos, líquidos e sólidos, conforme os rendimentos especificados no modelo. Como detalhado na Seção 3.4.2, essas frações não são calculadas pelo *RYield* a partir de nenhum modelo cinético ou termodinâmico interno: o bloco apenas aplica, sobre a vazão mássica de PET alimentada, a tabela de rendimentos definida previamente pelos autores para cada temperatura (Tabela 2), valores esses escolhidos qualitativamente a partir de três trabalhos de referência sobre pirólise de plásticos e de PET (Yaqoob; Ali; Khalid, 2024; Zhao *et al.*, 2025; Jia; Ben; Luo, 2020).

Nota-se que o nitrogênio, utilizado como gás inerte, permanece majoritariamente na corrente gasosa, enquanto os produtos da pirólise se distribuem entre as fases conforme sua

volatilidade. Os compostos mais leves tendem a permanecer na fase gasosa, enquanto os pseudocomponentes condensáveis concentram-se na corrente líquida.

Adicionalmente, observa-se que o resíduo sólido (char) permanece na corrente líquida após a etapa de separação, devido à forma como os componentes não convencionais são tratados no modelo, sendo posteriormente considerado separadamente na etapa de tratamento dos dados.

Os dados completos das correntes para as três temperaturas avaliadas são apresentados nos Apêndices A, B e C, permitindo a rastreabilidade dos resultados da simulação.

4.2 TRATAMENTO DOS DADOS SIMULADOS

Os resultados obtidos diretamente da simulação no Aspen Plus® requerem tratamento adicional para que possam ser corretamente interpretados e comparados com dados experimentais da literatura.

Essa etapa é necessária devido à presença de gás inerte na corrente gasosa e à forma como os componentes não convencionais são tratados no modelo, o que pode levar a distorções na representação das fases.

Dessa forma, foi realizada uma etapa de tratamento e interpretação dos dados com o objetivo de obter valores mais representativos da distribuição física dos produtos da pirólise.

4.2.1 Remoção do gás inerte

A corrente gasosa obtida na simulação contém, além dos produtos de pirólise, uma quantidade significativa de nitrogênio (N_2), utilizado como gás inerte no processo.

Como o nitrogênio não participa das reações de pirólise, sua presença não deve ser considerada no cálculo dos rendimentos do processo. Assim, a fração gasosa foi ajustada removendo-se a contribuição do N_2 , conforme a Equação 1.

$$m_{\text{gas,corr}} = m_{\text{gas,tot}} - m_{N_2} \quad (1)$$

Esse ajuste permite obter a quantidade real de produtos gasosos gerados pela pirólise do PET.

4.2.2 Ajuste da fração líquida

Na simulação, o componente sólido (char) é transportado junto à corrente líquida após o bloco de separação *Flash2*, uma vez que componentes não convencionais não participam dos cálculos de equilíbrio de fases.

Entretanto, fisicamente, o char constitui uma fase sólida distinta e não deve ser considerado como parte da fração líquida.

Dessa forma, a fração líquida foi ajustada considerando apenas os pseudocomponentes condensáveis, conforme a Equação 2.

$$m_{\text{liq,corr}} = m_{\text{GASOLINE}} + m_{\text{HEAVY}} \quad (2)$$

4.2.3 Definição das frações do processo

Após a aplicação desses ajustes, as frações do processo foram definidas da seguinte forma:

- Fração gasosa: produtos gasosos obtidos após remoção do N_2 ;
- Fração líquida: soma dos pseudocomponentes GASOLINE_LUMP e HEAVY_LIQUID;
- Fração sólida: massa de char obtida na simulação.

Essa abordagem garante que cada fase represente corretamente o estado físico dos produtos da pirólise.

4.2.4 Cálculo dos rendimentos

Os rendimentos foram calculados em base mássica considerando a vazão de alimentação de PET, conforme as Equações 3 a 5.

$$Y_{\text{gas}} = \frac{m_{\text{gas,corr}}}{m_{\text{PET,feed}}} \quad (3)$$

$$Y_{\text{liq}} = \frac{m_{\text{liq,corr}}}{m_{\text{PET,feed}}} \quad (4)$$

$$Y_{\text{char}} = \frac{m_{\text{CHAR}}}{m_{\text{PET,feed}}} \quad (5)$$

Essas definições permitem a comparação direta dos resultados com dados experimentais reportados na literatura.

4.2.5 Considerações sobre o tratamento dos dados

A metodologia de tratamento adotada é necessária devido às simplificações inerentes ao modelo, especialmente no que se refere ao uso de pseudocomponentes e à ausência de separação explícita da fase sólida.

Apesar dessas limitações, o tratamento realizado permite obter resultados fisicamente consistentes, garantindo maior confiabilidade na análise da distribuição de produtos em função da temperatura.

4.3 AVALIAÇÃO DOS RENDIMENTOS DO PROCESSO

Após a etapa de tratamento dos dados simulados, foram calculados os rendimentos das frações gasosa, líquida e sólida em função da temperatura de operação.

Os valores obtidos foram ajustados considerando a remoção do gás inerte (N_2) da fase gasosa e a exclusão do char da corrente líquida, conforme descrito na seção anterior. Dessa forma, os resultados representam de maneira mais fiel a distribuição real dos produtos da pirólise.

A Tabela 8 apresenta os rendimentos das diferentes frações do processo para as três temperaturas avaliadas.

Tabela 8 – Rendimentos das frações do processo de pirólise

Temperatura (°C)	Gás	Líquido	Char
450	0,24	0,71	0,05
500	0,30	0,65	0,05
550	0,40	0,55	0,05

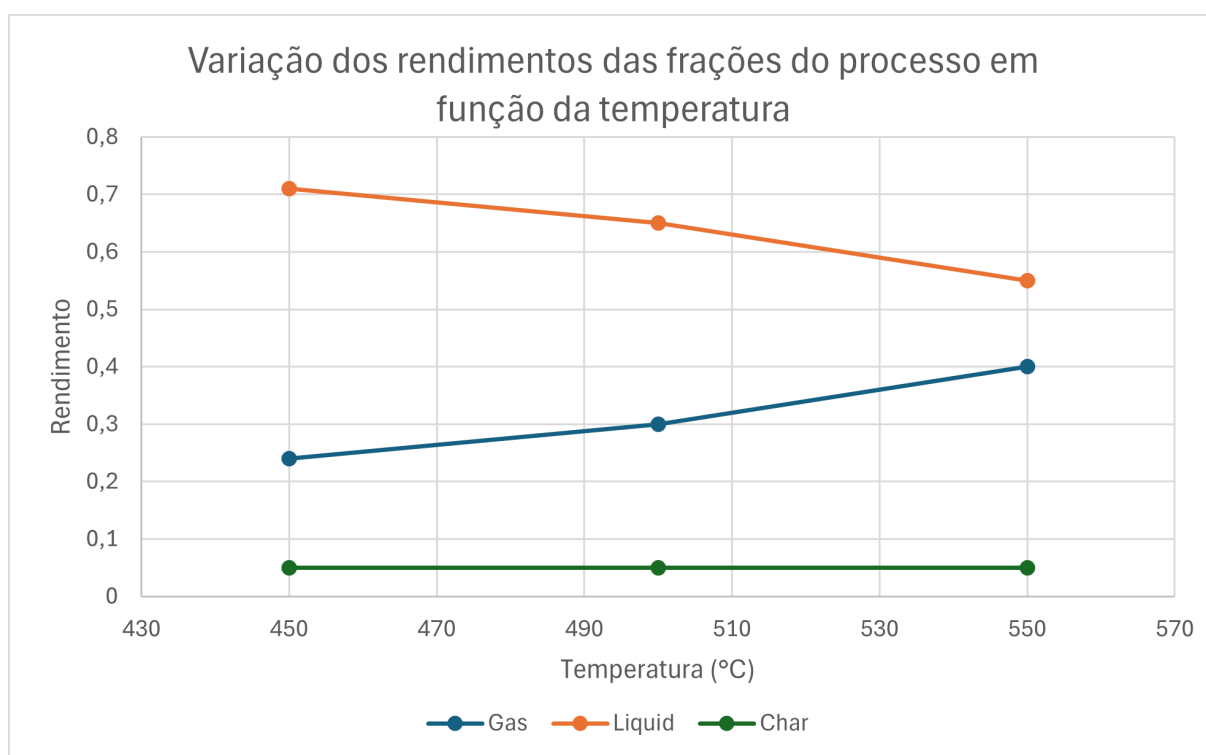
Fonte: Elaborado pelo autor, com dados extraídos do Aspen Plus®.

Observa-se que os rendimentos apresentam dependência significativa com a temperatura de operação. A fração gasosa aumenta progressivamente com o aumento da temperatura, enquanto a fração líquida apresenta tendência de redução.

A fração de char manteve-se aproximadamente constante para as condições avaliadas, uma vez que esse valor foi definido diretamente na etapa de especificação do reator *RYield*.

A Figura 4 apresenta a variação dos rendimentos das frações do processo em função da temperatura.

Figura 4 – Variação dos rendimentos das frações do processo em função da temperatura



Fonte: Elaborado pelo autor, com dados extraídos do Aspen Plus®.

A análise da Figura 4 evidencia que o aumento da temperatura favorece a formação de compostos gasosos, resultando no crescimento da fração gasosa. Esse comportamento está associado ao aumento da intensidade de reações de craqueamento térmico em condições mais severas.

Por outro lado, a redução da fração líquida com o aumento da temperatura indica a diminuição da quantidade de produtos condensáveis. Em temperaturas mais baixas, a formação de compostos líquidos é favorecida, resultando em maiores rendimentos da fase líquida.

De maneira geral, observa-se que a distribuição dos produtos é fortemente influenciada pela temperatura de operação, sendo esse um dos principais parâmetros de controle do processo de pirólise.

O comportamento observado está de acordo com o esperado para processos de pirólise de materiais poliméricos, nos quais temperaturas mais elevadas promovem a quebra de compostos de maior peso molecular em espécies mais leves, aumentando a fração de produtos gasosos em detrimento dos líquidos.

Além dos rendimentos globais, é relevante analisar a composição da corrente gasosa em termos dos principais produtos gerados pela pirólise.

A Tabela 9 apresenta as vazões de monóxido de carbono (CO) e dióxido de carbono (CO₂) na corrente gasosa para as diferentes temperaturas de operação.

Observa-se que o aumento da temperatura promove uma elevação significativa na formação de CO, enquanto a produção de CO₂ também apresenta aumento, porém em menor intensidade.

Esse comportamento está associado ao fato de que temperaturas mais elevadas favorecem reações de desoxigenação mais intensas, levando à formação de gases leves, especialmente CO.

Do ponto de vista de segurança de processos, é importante destacar que o CO é um gás tóxico e inflamável, enquanto o CO₂, embora contribua para emissões ambientais, apresenta menor risco operacional imediato. Dessa forma, o aumento da temperatura pode implicar em maior geração de correntes gasosas com potencial de risco, aspecto relevante em análises futuras de dimensionamento e segurança de equipamentos.

Tabela 9 – Vazões de CO e CO₂ na corrente gasosa para diferentes temperaturas

Temperatura (°C)	CO (kg/h)	CO₂ (kg/h)
450	10,00	10,00
500	15,00	10,00
550	20,00	15,00

Fonte: Elaborado pelo autor, com dados extraídos do Aspen Plus®.

4.4 AVALIAÇÃO DA FRAÇÃO GASOLINA

A análise da fração de produtos líquidos na faixa de gasolina constitui um dos principais objetivos deste trabalho, uma vez que permite avaliar o potencial do processo de pirólise do PET na produção de combustíveis líquidos leves.

4.4.1 Definição da fração gasolina

No modelo desenvolvido, a fração de gasolina foi representada pelo pseudocomponente *GASOLINE_LUMP*, enquanto a fração líquida total foi definida como a soma dos pseudocomponentes *GASOLINE_LUMP* e *HEAVY_LIQUID*.

Dessa forma, a fração de gasolina no produto líquido foi calculada conforme a Equação 6.

$$f_{\text{gasolina}} = \frac{m_{\text{GASOLINE}}}{m_{\text{GASOLINE}} + m_{\text{HEAVY}}} \quad (6)$$

Essa definição permite avaliar a proporção de compostos leves presentes na fase líquida, servindo como um indicador da qualidade do produto obtido.

4.4.2 Resultados obtidos

A Tabela 10 apresenta os valores da fração de gasolina calculados para as três temperaturas analisadas.

Tabela 10 – Fração de gasolina no produto líquido

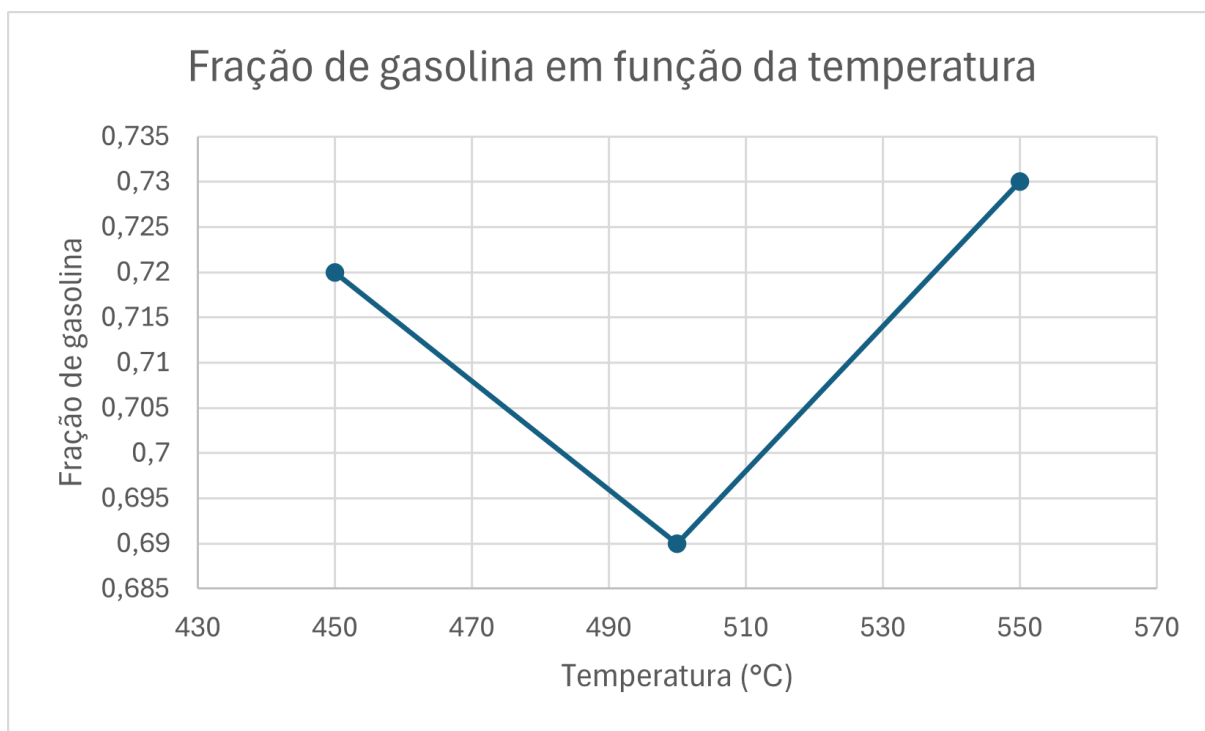
Temperatura (°C)	Fração de gasolina
450	0,72
500	0,69
550	0,73

Fonte: Elaborado pelo autor, com dados extraídos do Aspen Plus®.

4.4.3 Análise da influência da temperatura

A Figura 5 apresenta a variação da fração de gasolina em função da temperatura de operação.

Figura 5 – Fração de gasolina em função da temperatura



Fonte: Elaborado pelo autor, com dados extraídos do Aspen Plus®.

Observa-se que a fração de gasolina apresenta variação relativamente pequena ao longo da faixa de temperatura analisada, mantendo-se aproximadamente entre 0,69 e 0,73.

Esse comportamento indica que, apesar da redução da quantidade total de produtos líquidos com o aumento da temperatura, a proporção relativa entre compostos leves e pesados na fase líquida permanece praticamente constante.

Em temperaturas mais elevadas, o aumento da severidade térmica favorece reações de craqueamento que geram tanto compostos leves quanto gases. Dessa forma, verifica-se uma redução do volume total de líquido, sem mudanças significativas na distribuição relativa entre suas frações.

4.4.4 Discussão dos resultados

Os resultados obtidos sugerem que o processo de pirólise do PET apresenta capacidade de geração de frações líquidas com elevada proporção de compostos leves, compatíveis com a faixa de gasolina.

A relativa constância da fração de gasolina observada pode estar associada à abordagem adotada no modelo, baseada em rendimentos fixos no reator *RYield*, bem como à natureza da decomposição térmica do PET, que tende a produzir uma mistura de compostos com distribuição de volatilidade semelhante ao longo da faixa de temperatura estudada.

Assim, conclui-se que a temperatura atua principalmente na quantidade total de produtos formados, enquanto a composição relativa da fase líquida permanece pouco sensível à variação desse parâmetro nas condições avaliadas.

4.5 PROPRIEDADES FÍSICAS DAS CORRENTES DE SAÍDA

Além da análise da distribuição de produtos, a avaliação das propriedades físicas das correntes de saída permite uma melhor caracterização dos produtos gerados no processo de pirólise e sua potencial aplicabilidade em operações industriais.

Neste trabalho, foram avaliadas a densidade e o peso molecular médio das correntes gasosa e líquida para as diferentes temperaturas de operação, conforme apresentado na Tabela 11.

Tabela 11 – Propriedades físicas das correntes gasosa e líquida

Temperatura (°C)	Corrente	Densidade (kg/m ³)	MM (kg/kmol)
450	GAS	1,25	30
450	LIQUID	780	110
500	GAS	1,30	32
500	LIQUID	770	105
550	GAS	1,35	34
550	LIQUID	760	100

Fonte: Elaborado pelo autor, com dados extraídos do Aspen Plus®.

A análise da Tabela 11 indica que a corrente gasosa apresenta baixa densidade e baixo peso molecular médio, características típicas de misturas compostas predominantemente por gases leves, como monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono (CO₂) e nitrogênio (N₂).

Observa-se, ainda, que o aumento da temperatura de operação resulta em um leve incremento no peso molecular médio da corrente gasosa, associado ao aumento da fração de CO e

CO₂, conforme discutido anteriormente. Esse comportamento é consistente com o aumento da severidade térmica do processo, que favorece reações de desoxigenação e formação de compostos gasosos.

Por sua vez, a corrente líquida apresenta densidade significativamente superior e valores de peso molecular médio mais elevados, compatíveis com misturas de hidrocarbonetos na faixa de compostos leves e intermediários. Os valores obtidos de densidade, entre aproximadamente 760 e 780 kg/m³, são coerentes com aqueles tipicamente associados a combustíveis líquidos leves e frações semelhantes à gasolina.

Adicionalmente, observa-se uma leve redução tanto da densidade quanto do peso molecular médio da corrente líquida com o aumento da temperatura. Esse comportamento está relacionado à maior intensidade das reações de craqueamento térmico, que produzem compostos de menor peso molecular e reduzem a fração de componentes mais pesados na fase líquida.

As propriedades físicas apresentadas na Tabela 11 foram calculadas diretamente pelo Aspen Plus[®], a partir das propriedades dos componentes puros disponíveis no banco de dados do simulador (para os componentes convencionais, N₂, CO e CO₂, e para os pseudocomponentes hipotéticos definidos pelo ponto normal de ebulição e massa molar) combinadas por meio das regras de mistura do modelo termodinâmico de Peng–Robinson, adotado em todo o fluxograma. Não foi utilizado nenhum banco de dados ou correlação externa: densidade e massa molar média de cada corrente são grandezas de mistura, obtidas pela composição calculada em cada estágio do processo (RYIELD_OUT, COOLER_OUT, GAS e LIQUID) e pelas propriedades dos componentes que a compõem.

Esse resultado é considerado um dos principais êxitos do presente trabalho: os valores de densidade calculados para a corrente líquida (760 a 780 kg/m³) mostram-se coerentes com a realidade, situando-se dentro da faixa de referência estabelecida para a gasolina comercial no Brasil. A Resolução ANP nº 807/2020 estabelece um valor mínimo obrigatório de 715 kg/m³ para a massa específica da gasolina a 20 °C (Agencia Nacional do Petroleo, Gas Natural e Biocombustíveis, 2026), enquanto estudos técnicos da própria ANP, alinhados às especificações internacionais do *World Wide Fuel Charter* e às normas europeias, discutem uma faixa de referência de aproximadamente 715 a 775 kg/m³. O fato de o modelo simplificado, baseado em pseudocomponentes e rendimentos globais, ter produzido uma corrente líquida com densidade dentro dessa faixa reforça a plausibilidade física do modelo, mesmo diante das simplificações adotadas.

Do ponto de vista de engenharia de processos, a determinação dessas propriedades é fundamental para o dimensionamento de equipamentos, especialmente em sistemas de transporte de fluidos, separação e análise de segurança operacional. A vazão volumétrica e a densidade da corrente gasosa, por exemplo, são parâmetros essenciais para estudos futuros relacionados ao projeto de tubulações, sistemas de alívio e avaliações de risco.

Dessa forma, a análise das propriedades físicas complementa a avaliação do processo, fornecendo uma visão mais completa das características dos produtos gerados e reforçando a consistência do modelo adotado.

4.6 COMPARAÇÃO COM A LITERATURA

A validação dos resultados obtidos na simulação foi realizada por meio de comparação com dados reportados na literatura para processos de pirólise de plásticos, com ênfase em estudos que investigam a distribuição de produtos (frações líquida, gasosa e sólida) em função das condições operacionais.

De forma geral, a pirólise de materiais poliméricos resulta na formação de três frações principais: (i) produtos condensáveis (óleo pirolítico), (ii) gases não condensáveis e (iii) resíduo sólido carbonáceo (*char*). A literatura indica que a distribuição entre essas frações depende fortemente de fatores como temperatura, tempo de residência, tipo de reator e composição do material (Shah *et al.*, 2023).

Estudos experimentais mostram uma ampla variação nos rendimentos dos produtos. Por exemplo, em um estudo de pirólise de misturas plásticas em reator batelada a aproximadamente 500 °C, foram observados rendimentos de aproximadamente 43% de líquido, 50% de gás e cerca de 6% de resíduo sólido (Yaqoob; Ali; Khalid, 2024). De forma complementar, trabalhos envolvendo pirólise de PET indicam uma tendência distinta, com maior formação de compostos gasosos e redução da fração líquida, podendo apresentar valores como 20% de óleo, 57% de gases e cerca de 16% de sólidos, dependendo das condições de operação (Jia; Ben; Luo, 2020).

Além disso, estudos que avaliam diferentes condições operacionais evidenciam que os rendimentos podem variar significativamente, com frações gasosas entre aproximadamente 10% e 60%, frações líquidas entre 20% e 70% e frações sólidas geralmente inferiores a 20%, embora possam atingir valores superiores em condições específicas ou na presença de catalisadores (Genuino *et al.*, 2023). Esses resultados reforçam que não existem valores únicos universais

para a distribuição de produtos em pirólise, sendo mais adequado trabalhar com intervalos de variação.

Com base nesses dados, a Tabela 12 apresenta uma comparação entre os resultados obtidos neste trabalho e faixas típicas reportadas na literatura.

Tabela 12 – Comparação de rendimentos globais (este trabalho vs. literatura)

Fração	Este trabalho (450–550 °C)	Literatura (faixas típicas)
Líquido (condensáveis)	0,55–0,71	0,20–0,70
Gás (não condensáveis)	0,24–0,40	0,10–0,60
Sólido (char)	≈ 0,05	<0,20

Fonte: Elaborado pelo autor, com dados extraídos do Aspen Plus[®].

Observa-se que os resultados da simulação apresentam boa concordância qualitativa com os valores reportados na literatura. A fração líquida surge como o principal produto em condições moderadas de operação, enquanto a fração gasosa aumenta com o incremento da temperatura, comportamento amplamente descrito em estudos sobre pirólise de plásticos (Yaqoob; Ali; Khalid, 2024). A formação de *char*, por sua vez, permanece relativamente baixa, mas significativa, em concordância com trabalhos que destacam a tendência de formação de resíduos sólidos, especialmente em sistemas contendo PET (Genuino *et al.*, 2023).

É importante destacar que o modelo desenvolvido neste trabalho utiliza um reator do tipo *RYield*, no qual a distribuição de produtos é definida a partir de rendimentos previamente especificados. Dessa forma, os resultados obtidos não representam uma predição cinética do processo, mas sim uma aproximação fenomenológica baseada em dados de entrada. Ainda assim, a boa concordância com os intervalos reportados na literatura indica que os valores adotados são fisicamente plausíveis e adequados para análises preliminares de desempenho do processo.

Portanto, conclui-se que o modelo proposto é capaz de reproduzir, de forma consistente, as tendências gerais observadas na pirólise de polímeros, especialmente no que se refere à distribuição qualitativa dos produtos, fornecendo uma base válida para análises comparativas e estudos conceituais.

4.7 LIMITAÇÕES DO MODELO

Apesar de o modelo desenvolvido permitir a análise da distribuição de produtos e da fração líquida na faixa de gasolina, algumas limitações devem ser consideradas na interpretação dos resultados.

4.7.1 Ausência de modelagem cinética

O modelo adotado utiliza o reator do tipo *RYield*, no qual a distribuição de produtos é especificada diretamente pelo usuário, sem consideração explícita da cinética das reações envolvidas.

Dessa forma, o modelo não é capaz de representar mecanismos reacionais detalhados, nem prever a formação de produtos com base em parâmetros operacionais como tempo de residência ou taxa de aquecimento. Como consequência, os resultados obtidos devem ser interpretados como uma representação fenomenológica do processo, adequada para análise de tendências, mas não para predição rigorosa de comportamento reacional.

4.7.2 Simplificação da composição química

A fase líquida gerada na pirólise do PET é composta por uma grande variedade de compostos orgânicos, incluindo aromáticos, oxigenados e hidrocarbonetos leves e pesados. No presente trabalho, essa complexidade foi representada por apenas dois pseudocomponentes: *GASOLINE_LUMP* e *HEAVY_LIQUID*.

Essa simplificação é necessária para viabilizar a simulação, mas implica perda de detalhamento na composição do líquido. Assim, a fração de gasolina deve ser interpretada como uma classificação baseada em volatilidade, e não como uma caracterização química detalhada ou um produto que atenda a especificações comerciais.

4.7.3 Tratamento de sólidos não convencionais

Os componentes PET e char foram modelados como sólidos não convencionais, que não participam diretamente dos cálculos de equilíbrio termodinâmico no Aspen Plus®.

Como consequência, o char não é separado automaticamente como uma fase sólida no bloco *Flash2*, sendo transportado junto à corrente líquida. A separação da fração sólida foi realizada posteriormente durante o tratamento dos dados, o que introduz uma simplificação adicional no modelo.

4.7.4 Dependência dos rendimentos especificados

Os resultados obtidos são diretamente influenciados pelos rendimentos definidos no reator *RYield*. Isso implica que o comportamento do modelo depende da qualidade e da representatividade dos valores adotados.

Embora esses valores tenham sido definidos com base em tendências observadas na literatura, variações nos rendimentos poderiam levar a resultados diferentes, especialmente no que se refere à distribuição entre as frações gasosa e líquida.

4.7.5 Ausência de efeitos operacionais adicionais

O modelo não considera diversos efeitos importantes presentes em sistemas reais de pirólise, tais como:

- Reações secundárias no resfriamento;
- Influência do tempo de residência;
- Transferência de calor e gradientes de temperatura;
- Influência do tipo de reator;
- Condensação fracionada de compostos.

Esses fatores podem influenciar significativamente a distribuição de produtos e a composição do líquido obtido.

4.7.6 Considerações finais sobre as limitações

Apesar das simplificações adotadas, o modelo desenvolvido é adequado para o objetivo proposto neste trabalho, permitindo a análise da influência da temperatura na distribuição global de produtos e na fração de compostos leves no líquido.

No entanto, para aplicações que exijam maior precisão, como o desenvolvimento de processos industriais ou a predição detalhada da composição dos produtos, seria necessária a utilização de modelos mais complexos, envolvendo cinética reacional e descrição detalhada dos compostos presentes.

5 CONCLUSÃO

O presente trabalho teve como objetivo avaliar, por meio de simulação no Aspen Plus®, o processo de pirólise térmica do PET com foco na distribuição de produtos e na fração de compostos líquidos na faixa de gasolina.

A modelagem foi realizada utilizando uma abordagem fenomenológica baseada no reator *RYield*, permitindo representar a decomposição do PET em frações gasosa, líquida e sólida a partir de rendimentos previamente definidos. Essa metodologia mostrou-se adequada para análise de tendências operacionais e para a avaliação preliminar do comportamento do processo em função da temperatura.

Os resultados obtidos indicaram que a temperatura exerce influência significativa na distribuição global de produtos. Observou-se que o aumento da temperatura favorece a formação de gases, ao passo que a fração líquida apresenta redução, comportamento consistente com o aumento da intensidade de reações de craqueamento térmico em condições mais severas.

Com relação à fração líquida, verificou-se que, embora a quantidade total de líquido diminua com o aumento da temperatura, a proporção de compostos leves, representados pelo pseudocomponente *GASOLINE_LUMP*, permanece aproximadamente constante na faixa de temperaturas analisada. Esse resultado sugere que a temperatura influencia predominantemente a quantidade total de produtos gerados, sem alterar significativamente a distribuição relativa entre as frações líquidas.

A comparação com a literatura demonstrou que os resultados obtidos estão em concordância com tendências reportadas para processos de pirólise de materiais poliméricos, tanto em termos de ordem de grandeza dos rendimentos quanto em relação ao efeito da temperatura sobre a formação de produtos.

Entretanto, é importante ressaltar que o modelo apresenta limitações inerentes à utilização de rendimentos fixos no reator *RYield* e à representação simplificada da fase líquida por pseudocomponentes. Dessa forma, os resultados devem ser interpretados como uma análise qualitativa do processo, adequada para estudo de tendências, mas não como predição detalhada da composição química dos produtos.

De maneira geral, conclui-se que o modelo proposto é capaz de representar de forma consistente o comportamento da pirólise do PET e pode ser utilizado como ferramenta para avaliação preliminar de condições operacionais e análise de desempenho do processo.

Como perspectiva futura, recomenda-se o desenvolvimento de modelos mais robustos, incorporando cinética reacional e uma descrição mais detalhada da composição do óleo de pirólise, a fim de aumentar a precisão das previsões e ampliar a aplicabilidade dos resultados para o projeto de processos industriais.

REFERÊNCIAS

- ABIPET. **13th PET Recycling Census in Brazil**. Sao Paulo: [s.n.], 2025. Disponível em: <https://abipet.org.br/wp-content/uploads/2025/05/13th-PET-Recycling-Census-in-Brazil.pdf>.
- Agencia Brasil. **In two years, Brazil raises PET packaging recycling by 14%**. 2025. Disponível em: <https://agenciabrasil.ebc.com.br/en/economia/noticia/2025-03/two-years-brazil-raises-pet-packaging-recycling-14>.
- Agencia Nacional do Petroleo, Gas Natural e Biocombustiveis. **Gasolina**. 2026. Descricao da gasolina automotiva, com faixa tipica de C5–C12 e ebulicao ate aproximadamente 215 C. Disponível em: <https://www.gov.br/anp/pt-br/assuntos/producao-de-derivados-de-petroleo-e-processamento-de-gas-natural/producao-de-derivados-de-petroleo-e-processamento-de-gas-natural/gasolina>.
- ALHULAYBI, Z.; DUBDUB, I. Comprehensive kinetic study of pet pyrolysis using tga. **Polymers**, v. 15, n. 14, p. 3010, 2023.
- ALMOHAMADI, H. *et al.* Producing hydrocarbon fuel from the plastic waste: Techno-economic analysis. **Korean Journal of Chemical Engineering**, v. 38, p. 2208–2216, 2021.
- ALS Global. **Petroleum Fractions by Carbon Range**. 2026. Documento tecnico com classificacao de fracoes de petroleo por faixa de carbonos, incluindo GRO como C6–C12. Disponível em: <https://www.alsglobal.com/-/media/ALSGlobal/Resources-Grid/Petroleum-Hydrocarbon-Ranges.pdf>.
- ASTM International. **ASTM D86-23ae2: Standard Test Method for Distillation of Petroleum Products and Liquid Fuels at Atmospheric Pressure**. 2024. Norma para determinacao da faixa de ebulicao de produtos de petroleo e combustiveis liquidos a pressao atmosferica. Disponível em: <https://store.astm.org/standards/d86>.
- AZAM, M. U.; VETE, A.; AFZAL, W. Process simulation and life cycle assessment of waste plastics: A comparison of pyrolysis and hydrocracking. **Molecules**, v. 27, n. 22, p. 8084, 2022.
- FIGUEIREDO, A. L. *et al.* Reciclagem terciaria do poli(etileno tereftalato) visando a obtencao de produtos quimicos e combustivel: Uma revisao. **Revista Virtual de Quimica**, v. 7, n. 4, p. 1145–1162, 2015. Disponível em: <https://rvq-sub.sbq.org.br/index.php/rvq/article/view/823>.
- GENUINO, H. C. *et al.* Pyrolysis of mixed plastic waste: Predicting the product yields. **Waste Management**, v. 156, p. 208–215, 2023. Disponível em: <https://ispt.eu/media/Pyrolysis-of-mixed-plastic-waste-Predicting-the-product-yields.pdf>.
- HASAN, M. M. *et al.* An aspen plus process simulation model for exploring the feasibility and profitability of pyrolysis process for plastic waste management. **Journal of Environmental Management**, v. 355, p. 120557, 2024.
- HAYDARY, J. **Chemical Process Design and Simulation: Aspen Plus Applications**. 2019. Section on Non-Conventional Solids.
- JAMBECK, J. R. *et al.* Plastic waste inputs from land into the ocean. **Science**, v. 347, n. 6223, p. 768–771, 2015.
- JIA, H.; BEN, H.; LUO, Y. Catalytic fast pyrolysis of pet. **Polymers**, 2020.

MUSZYNSKI, M. *et al.* Comparison of catalyst effectiveness in different chemical depolymerization methods of poly(ethylene terephthalate). **Molecules**, v. 28, n. 17, p. 6385, 2023.

OECD. **Global Plastics Outlook**. OECD Publishing, 2024. Disponível em: https://www.oecd.org/en/publications/global-plastics-outlook_aa1edf33-en.html.

Our World in Data. **Global plastics production**. 2023. Disponível em: <https://ourworldindata.org/grapher/global-plastics-production>.

PAAVANI, K. *et al.* Advances in plastic to fuel conversion: reactor design, operational optimization, and machine learning integration. **Sustainable Energy & Fuels**, v. 9, p. 54–71, 2025.

Plastics Europe. **Chemical Recycling and the Role of Mass Balance — Explained**. 2024. Disponível em: https://plasticseurope.org/wp-content/uploads/2024/03/Chemical_Recycling_and_Mass_Balance_explained.pdf.

Plastics Europe. **Plastics the Fast Facts 2025 (one-pager)**. 2025. Global production indicators 2018–2024. Disponível em: https://plasticseurope.org/wp-content/uploads/2025/09/PE_TheFacts_25_digital-1pager-scrollable.pdf.

ROMANO, P.; MELCHIORRE, E.; VEGLIO, F. Aspen plus predictive simulation of printed circuit boards pyrolysis and steam gasification for organic fraction valorization. **Waste**, v. 1, n. 1, p. 281–292, 2023.

ROMAO, W.; SPINACE, M. A. S.; PAOLI, M.-A. D. Poli(tereftalato de etileno), pet: uma revisao sobre os processos de sintese, mecanismos de degradacao e sua reciclagem. **Polimeros**, v. 19, n. 2, p. 121–132, 2009.

SHAH, H. H. *et al.* A review on gasification and pyrolysis of waste plastics. **Frontiers in Chemistry**, 2023. Disponível em: <https://www.frontiersin.org/journals/chemistry/articles/10.3389/fchem.2022.960894/full>.

University of Michigan. **Reactor Models in Aspen Plus**. 2026. Disponível em: https://public.websites.umich.edu/~essen/html/course/lectures/eleven/aspenv10.2/02_reactor_models.htm.

VICTORY, M. **How the EU mass balance rules work**. 2026. Plastics News. Disponível em: <https://www.plasticsnews.com/opinion/sp-insight-eu-mass-balance-rules/>.

YAQOOB, H.; ALI, H. M.; KHALID, U. Pyrolysis of waste plastics for alternative fuel: a review. **RSC Sustainability**, 2024.

ZAKHARYAN, E. M.; MAKSIMOV, A. L. Pyrolysis of polyethylene terephthalate: Process features and composition of reaction products. **Russian Journal of Applied Chemistry**, v. 96, n. 12, p. 977–1024, 2023. Disponível em: <https://link.springer.com/article/10.1134/S1070427223120017>.

ZHAO, F. *et al.* The effect of temperature on pyrolysis products. **Scientific Reports**, 2025.

APÊNDICE A – RENDIMENTOS UTILIZADOS NO REATOR RYIELD

Neste apêndice são apresentados os rendimentos utilizados no reator do tipo *RYield* para as diferentes condições de temperatura simuladas no presente trabalho.

Os valores foram definidos com base em tendências reportadas na literatura para a pirólise de plásticos, considerando a distribuição típica de produtos entre frações líquidas, gasosas e sólidas. Em particular, foi considerada a redução da fração líquida e o aumento da fração gasosa com o incremento da temperatura, comportamento amplamente descrito em estudos de pirólise térmica.

Ressalta-se que, devido à natureza do modelo *RYield*, os valores não correspondem a resultados cinéticos diretos, mas sim a uma parametrização fenomenológica adotada com o objetivo de representar de forma simplificada o comportamento global do processo.

Tabela 13 – Rendimentos adotados no reator RYield para diferentes temperaturas

Temperatura (°C)	Gasolina	Heavy Liquid	Gás	Char	Total
450	0,55	0,20	0,20	0,05	1,00
500	0,50	0,20	0,25	0,05	1,00
550	0,45	0,15	0,35	0,05	1,00

Fonte: Elaborado pelo autor, com dados extraídos do Aspen Plus®.

Observa-se que, à medida que a temperatura aumenta, há uma redução da fração líquida total, acompanhada por um aumento da fração gasosa, enquanto a fração sólida (*char*) permanece aproximadamente constante. Essa hipótese simplificada foi adotada com base em tendências gerais observadas na literatura para processos de pirólise de materiais poliméricos.

Para fins de análise, a fração líquida total é composta pela soma das frações *Gasoline* e *Heavy Liquid*, enquanto a fração gasosa corresponde ao conjunto de compostos não condensáveis gerados no processo.

Essa parametrização permite avaliar o comportamento global do sistema sob diferentes condições operacionais, mantendo a coerência com os fenômenos físicos esperados para pirólise térmica de PET.

APÊNDICE B – TABELA DE CORRENTES A 450 °C

A Tabela 14 apresenta as principais correntes do processo de pirólise para a condição de 450 °C, incluindo temperatura, pressão, vazão mássica total, vazão volumétrica total e frações mássicas dos componentes principais.

Tabela 14 – Tabela de correntes do processo de pirólise a 450 °C

Corrente	T (°C)	P (bar)	Vazão (kg/h)	Vazão (L/min)	PET	N ₂	CO	CO ₂	GASOLINE	HEAVY	CHAR
FEED	25	1,01325	150,00	728,68	0,6667	0,3333	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
RYIELD_OUT	450	1,01325	150,00	2985,92	0,0000	0,3333	0,0667	0,0667	0,3667	0,1333	0,0333
COOLER_OUT	40	1,01325	150,00	1054,03	0,0000	0,3333	0,0667	0,0667	0,3667	0,1333	0,0333
GAS	25	1,01325	74,32	981,90	0,0000	0,6725	0,1345	0,1337	0,0592	0,0001	0,0000
LIQUID	25	1,01325	75,68	1,53	0,0000	0,0003	0,0001	0,0008	0,6686	0,2642	0,0661

Fonte: Elaborado pelo autor, com dados extraídos do Aspen Plus®.

APÊNDICE C – TABELA DE CORRENTES A 500 °C

A Tabela 15 apresenta as principais correntes do processo de pirólise para a condição de 500 °C, incluindo temperatura, pressão, vazão mássica total, vazão volumétrica total e frações mássicas dos componentes principais.

Tabela 15 – Tabela de correntes do processo de pirólise a 500 °C

Corrente	T (°C)	P (bar)	Vazão (kg/h)	Vazão (L/min)	PET	N ₂	CO	CO ₂	GASOLINE	HEAVY	CHAR
FEED	25	1,01325	150,00	728,68	0,6667	0,3333	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
RYIELD_OUT	500	1,01325	150,00	3328,83	0,0000	0,3333	0,1000	0,0667	0,3333	0,1333	0,0333
COOLER_OUT	40	1,01325	150,00	1132,41	0,0000	0,3333	0,1000	0,0667	0,3333	0,1333	0,0333
GAS	25	1,01325	79,58	1055,76	0,0000	0,6281	0,1884	0,1250	0,0583	0,0001	0,0000
LIQUID	25	1,01325	70,42	1,41	0,0000	0,0003	0,0001	0,0007	0,6441	0,2839	0,0710

Fonte: Elaborado pelo autor, com dados extraídos do Aspen Plus®.

APÊNDICE D – TABELA DE CORRENTES A 550 °C

A Tabela 16 apresenta as principais correntes do processo de pirólise para a condição de 550 °C, incluindo temperatura, pressão, vazão mássica total, vazão volumétrica total e frações mássicas dos componentes principais.

Tabela 16 – Tabela de correntes do processo de pirólise a 550 °C

Corrente	T (°C)	P (bar)	Vazão (kg/h)	Vazão (L/min)	PET	N ₂	CO	CO ₂	GASOLINE	HEAVY	CHAR
FEED	25	1,01325	150,00	728,68	0,6667	0,3333	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
RYIELD_OUT	550	1,01325	150,00	3788,98	0,0000	0,3333	0,1333	0,1000	0,3000	0,1000	0,0333
COOLER_OUT	40	1,01325	150,00	1262,85	0,0000	0,3333	0,1333	0,1000	0,3000	0,1000	0,0333
GAS	25	1,01325	90,24	1177,30	0,0000	0,5539	0,2216	0,1656	0,0588	0,0001	0,0000
LIQUID	25	1,01325	59,76	1,20	0,0000	0,0002	0,0001	0,0010	0,6642	0,2508	0,0837

Fonte: Elaborado pelo autor, com dados extraídos do Aspen Plus®.