

Universidade do Vale do Paraíba
Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento
Programa de Pós-Graduação de Mestrado Profissional em Processamento de
Materiais

Amanda Arthuzo Corrêa

**SIMULAÇÃO DA PIRÓLISE DE RESÍDUOS PLÁSTICOS UTILIZANDO
MODELAGEM EM PYTHON**

Simulation of Plastic Waste Pyrolysis Using Python-Based Modeling

São José dos Campos, SP
2025

Amanda Arthuzo Corrêa

**SIMULAÇÃO DA PIRÓLISE DE RESÍDUOS PLÁSTICOS UTILIZANDO
MODELAGEM EM PYTHON**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Processamento de Materiais, do Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento – IP&D, da Universidade do Vale do Paraíba, como complementação dos créditos necessários para obtenção do grau de Mestre em Processamento de Materiais.

Orientador: Prof. Dr. Fernando dos Santos Ortega

São José dos Campos, SP

2025

TERMO DE AUTORIZAÇÃO DE DIVULGAÇÃO DA OBRA

Ficha catalográfica

Corrêa, Amanda Arthuzo

Simulação da pirólise de resíduos plásticos utilizando modelagem em Python / Amanda Arthuzo Corrêa; orientador, Fernando dos Santos Ortega. - São José dos Campos, SP, 2025.

1 CD-ROM, 96 p.

Dissertação (Mestrado Profissional) - Universidade do Vale do Paraíba, São José dos Campos. Programa de Pós-Graduação em Processamento de Materiais.

Inclui referências

1. Processamento de Materiais. 2. Pirólise. 3. Resíduos plásticos. 4. PYTHON. 5. Combustíveis. I. Ortega, Fernando dos Santos, orient. II. Universidade do Vale do Paraíba. Programa de Pós-Graduação em Processamento de Materiais. III. Título.

Eu, Amanda Arthuzo Corrêa, autor(a) da obra acima referenciada:

Autorizo a divulgação total ou parcial da obra impressa, digital ou fixada em outro tipo de mídia, bem como, a sua reprodução total ou parcial, devendo o usuário da reprodução atribuir os créditos ao autor da obra, citando a fonte.

Declaro, para todos os fins e efeitos de direito, que o Trabalho foi elaborado respeitando os princípios da moral e da ética e não violou qualquer direito de propriedade intelectual sob pena de responder civil, criminal, ética e profissionalmente por meus atos.

São José dos Campos, 28 de Novembro de 2025.

Autor(a) da Obra

Data da defesa: 9 / 9 / 2025

AMANDA ARTHUZO CORRÊA

“SIMULAÇÃO DA PIRÓLISE DE RESÍDUOS PLÁSTICOS UTILIZANDO MODELAGEM EM PYTHON”.

Dissertação aprovada como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre, do Programa de Pós-Graduação em Processamento de Materiais, do Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento da Universidade do Vale do Paraíba - Univap, pela seguinte banca examinadora:

Prof. Dr. Fernando dos Santos Ortega	<i>Fernanda S. Ortega</i>
Prof. Dr. José Geraldo da Cruz Pradella	<i>José Geraldo da Cruz Pradella</i>
Prof.ª Dr.ª Silvia Helena Prado Bettini - UFSCar	<i>Silvia Helena Prado Bettini</i>
Prof. Dr. Antônio Rodolfo Júnior - Brasken	<i>Antonio Rodolfo Junior</i>

Prof.ª Dr.ª Juliana Ferreira Strixino
Diretora do IP&D – Univap
São José dos Campos, 09 de setembro de 2025.

RESUMO

Este trabalho avaliou a viabilidade do tratamento de resíduos plásticos urbanos de por meio da simulação de um processo otimizado de pirólise, com foco na produção de frações utilizáveis como matéria-prima para combustíveis. Foi realizada revisão bibliográfica sobre o estado da arte da pirólise aplicada a plásticos e desenvolvido um modelo computacional em PYTHON baseado exclusivamente em dados de entrada e resultados reportados na literatura; a simulação não considerou pressão de operação nem o tipo ou geometria do reator, ou seja, não integrou efeitos dependentes do projeto do equipamento. O modelo foi calibrado com dados experimentais disponíveis em duas referências selecionadas e implementado em esquemas agrupados de 3 e 6 estágios para reproduzir a dinâmica observada em estudos prévios. Simularam-se PEAD, PP e uma mistura de PE/PP utilizando composições de resíduos públicos do município de São José dos Campos. Os rendimentos líquidos obtidos foram 60,59% (PEAD), 86,40% (PP) e 85,67% (mistura PE/PP). As temperaturas iniciais de pirólise simuladas variaram entre 300 °C e 400 °C, e as temperaturas de estabilização entre 450 °C e 550 °C. Os resultados indicam o potencial da pirólise para valorização de resíduos plásticos por meio da produção de frações líquidas e gasosas, mantendo-se que as estimativas são indicativas, dado que a simulação desconsiderou parâmetros de pressão e configuração de reator; estudos experimentais e de engenharia de processo são necessários para confirmação e dimensionamento. Os resultados deste estudo contribuem para colocar a pirólise ao lado de outras rotas de gestão de resíduos — incluindo a reciclagem mecânica e rotas térmicas convencionais — destacando-se que a escolha da via mais adequada depende de critérios técnicos, econômicos e ambientais do contexto local.

Palavras-chave: pirólise; resíduos plásticos; simulação; PYTHON; combustíveis; economia circular.

ABSTRACT

This study evaluated the feasibility of treating urban plastic waste through the simulation of an optimized pyrolysis process, with emphasis on the production of fractions suitable as feedstock for fuels. A literature review was conducted on the state of the art of pyrolysis applied to plastics, and a computational model was developed in PYTHON, based exclusively on input data and results reported in the literature. The simulation did not account for operating pressure or reactor type/geometry, thus excluding equipment design-dependent effects. The model was calibrated using experimental data from two selected references and implemented in grouped schemes of three and six stages to reproduce the dynamics observed in previous studies. High-density polyethylene (HDPE), polypropylene (PP), and a PE/PP mixture were simulated using public waste compositions from the municipality of São José dos Campos. The net liquid yields obtained were 60.59% (HDPE), 86.40% (PP), and 85.67% (PE/PP mixture). The simulated initial pyrolysis temperatures ranged from 300 °C to 400 °C, while stabilization temperatures varied between 450 °C and 550 °C. The results indicate the potential of pyrolysis for the valorization of plastic waste through the production of liquid and gaseous fractions. However, these estimates are indicative, as the simulation disregarded pressure parameters and reactor configuration; experimental and process engineering studies are required for validation and scale-up. The findings of this work contribute to positioning pyrolysis alongside other waste management routes—including mechanical recycling and conventional thermal pathways—while emphasizing that the choice of the most appropriate route depends on technical, economic, and environmental criteria within the local context.

Keywords: pyrolysis; plastic waste; simulation; PYTHON; fuels; circular economy.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Vantagens da economia circular	14
Figura 2 - Métodos de reciclagem de polímeros	17
Figura 3 - Fluxograma desenvolvido por Olafasakin et al (2021).....	24
Figura 4 - Representação esquemática do processo Pyrolix	30
Figura 5 – Fluxograma das etapas da pesquisa	32
Figura 6 - Modelo Agrupado de 3 estágios proposto por Ding et al (2012, apud Andersen 2017).....	39
Figura 7 - Modelo Agrupado de 6 estágios proposto por Zhang et al (2015, apud Andersen 2017).	40
Figura 8 – Gráfico da variação linear da temperatura durante a pirólise modelada com 3 estágios agrupados	46
Figura 9 – Gráfico de decomposição de polímero conforme o aumento de temperatura, utilizando uma modelagem de 3 estágios agrupados.....	46
Figura 10 – Gráfico da variação linear da temperatura durante a pirólise modelada com 6 estágios agrupados.	48
Figura 11 – Gráfico de decomposição de polímero conforme o aumento de temperatura, utilizando uma modelagem de 6 estágios agrupados.....	49
Figura 12 - Gráfico de decomposição de PEAD conforme o aumento de temperatura, utilizando dados de São José dos Campos.	51
Figura 13 – Gráfico da variação linear da temperatura durante a pirólise modelada com 3 estágios agrupados para a pirólise do PEAD, com taxa de aquecimento de 0,5°C/min.	52
Figura 14 - Gráfico de decomposição de PP conforme o aumento de temperatura, utilizando dados de São José dos Campos.	54
Figura 15 – Gráfico da variação linear da temperatura durante a pirólise modelada com 6 estágios agrupados para a pirólise do PP, com taxa de aquecimento de 0,5°C/minutos.	54
Figura 16 - Gráfico de decomposição de PE e PP conforme o aumento de temperatura, utilizando dados de São José dos Campos.	57
Figura 17 – Gráfico da variação linear da temperatura durante a pirólise modelada com 3 estágios agrupados para a pirólise da mistura de PE e PP, com taxa de aquecimento de 0,5°C/minuto.....	57

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Propriedades dos produtos líquidos produzidos na pirólise de materiais plásticos convencionais.....	27
Tabela 2 – Composição da fração líquida oriunda do processo de pirólise de uma mistura de resíduos plásticos em diferentes temperaturas, quando utilizada a metodologia de LÓPES, 2011	28
Tabela 3 – Índices de reciclagem de plásticos pós consumo no Brasil em 2021	42
Tabela 4 – Estudo Gravimétrico dos Resíduos Sólidos da Cidade de São José dos Campos em 2023.	43
Tabela 5 – Potencial de reciclagem de plásticos pós consumo em São José dos Campos/SP.....	43
Tabela 6 – Constantes de reação para PEAD (min^{-1})	45
Tabela 7 – Coeficiente de Arrhenius calculados para PP	48
Tabela 8 – Coeficiente de Arrhenius calculados para PEAD	51
Tabela 9 – Coeficiente de Arrhenius calculados para a mistura de PE e PP.	56
Tabela 10 – Quadro resumo comparativo dos dados experimentais obtidos	59

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	10
2	OBJETIVO	12
2.1	Objetivos Gerais	12
2.2	Objetivos Específicos	12
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	13
3.1	Economia Circular	13
1.1.1	Materiais Plásticos e Upcycling.....	15
1.2	Pirólise	19
1.2.1	Simulação de processos químicos através de modelagem computacional	21
1.2.2	Parâmetros relevantes para a modelagem de um processo de pirólise	25
1.2.3	Processo Pyrolix.....	29
4	MATERIAIS E MÉTODOS	32
4.1	Desenvolvimento do Simulador	33
4.1.1	Fundamentação Teórica.....	34
4.1.2	Implementação Computacional.....	36
4.1.3	Definição dos Parâmetros	37
4.1.4	Condições Iniciais e Configurações do Modelo.....	37
4.1.5	Solução do Sistema de EDOs.....	38
4.1.6	Visualização dos Resultados	38
4.2	Validação do simulador em PYTHON, a partir da reprodução de resultados da literatura.	38
4.3	Validação do simulador em PYTHON, a partir de dados públicos de resíduos sólidos em São José dos Campos.....	42
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	45
5.1	Validação de modelos encontrados em literatura	45
5.1.1	Reprodução do Modelo Agrupado de 3 Estágios.....	45
5.1.2	Reprodução do Modelo Agrupado de 6 Estágios.....	47
5.2	Resultados do simulador desenvolvido usando dados reais para o processo de pirólise em São José dos Campos	50
5.2.1	Resultados do simulador considerando a pirólise do PEAD.....	50
5.2.2	Resultados do simulador considerando a pirólise do PP.....	53
5.2.3	Resultados do simulador considerando a pirólise da mistura de PE e PP	56
6	CONCLUSÃO	61

6.1	Trabalhos Futuros e Recomendações.....	62
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS:	64
	APÊNDICE A – CÓDIGO DA VALIDAÇÃO DO MODELO AGRUPADO DE 3 ESTÁGIOS	70
	APÊNDICE B – CÓDIGO DA VALIDAÇÃO DO MODELO AGRUPADO DE 6 ESTÁGIOS	80
	APÊNDICE C – CÓDIGO DA VALIDAÇÃO DO MODELO AGRUPADO DE 3 ESTÁGIOS, ADAPTADO PARA A PIROLISE DE PEAD E A MISTURA DE PE E PP	89

1 INTRODUÇÃO

A crescente geração de resíduos plásticos urbanos representa um dos principais desafios ambientais contemporâneos, dada a sua persistência no meio ambiente e a dificuldade de reciclagem eficiente. O descarte inadequado desses materiais contribui significativamente para a poluição ambiental, incentivando a busca por soluções tecnológicas que possam mitigar os impactos associados a esses resíduos.

A reciclagem de plásticos é uma das estratégias fundamentais para mitigar os impactos ambientais causados pelo descarte inadequado desses materiais. Entre as abordagens mais comuns estão a reciclagem mecânica, que transforma resíduos plásticos em novos produtos de qualidade variável, e a reciclagem química, que permite a conversão dos polímeros em seus componentes básicos para a produção de novos materiais. Além disso, práticas como a reutilização e a valorização energética também contribuem para a redução da poluição gerada por plásticos descartáveis. No entanto, devido às limitações da reciclagem tradicional, torna-se essencial buscar alternativas mais eficazes, tal como a pirólise, que oferece um potencial inovador para a conversão de resíduos plásticos em produtos de valor agregado, sendo melhor explorada no próximo parágrafo.

Neste contexto, a pirólise surge como uma alternativa promissora, capaz de converter resíduos plásticos em produtos de maior valor agregado, incluindo combustíveis e matérias-primas químicas. A pirólise é um processo termoquímico que decompõe os polímeros em uma atmosfera sem oxigênio, resultando em frações líquidas, gasosas e sólidas, com potencial para aproveitamento energético ou reutilização na indústria química.

O presente trabalho tem como objetivo principal avaliar a viabilidade do tratamento de resíduos plásticos urbanos por meio da simulação de um processo otimizado de pirólise, visando sua utilização como matéria-prima na produção de combustíveis variados. Optou-se por se fixar o estudo no município de São José dos Campos, devido à facilidade de se encontrar informações públicas e em razão do seu alto índice tecnológico.

Para tanto, são estabelecidos como objetivos específicos: a realização de uma revisão bibliográfica sobre o estado da arte da pirólise aplicada à reciclagem de

plásticos; a modelagem de um processo de pirólise utilizando a linguagem de programação PYTHON, baseada em dados presentes na literatura, para validar o entendimento do processo; e, por fim, a otimização deste modelo com a inserção de dados reais, visando avaliar a eficiência do processo e a qualidade dos produtos obtidos.

Acredita-se que os resultados deste estudo possam contribuir significativamente para o desenvolvimento de mais uma opção de tecnologia, sustentável e eficiente, de reciclagem de plásticos, ao mesmo tempo em que fornecem *insights* valiosos para a aplicação da pirólise nas redes urbanas de tratamento, ampliando as possibilidades de reutilização de resíduos plásticos e a inovação no setor energético.

Vale destacar que, como se trata de um método inovador de sustentabilidade, ainda há pouca disponibilidade de dados experimentais para consultas e comparações. A inovação da pirólise como método de reciclagem de plásticos reside na sua capacidade de converter resíduos em produtos de alto valor agregado, diferenciando-se das abordagens tradicionais, como a reciclagem mecânica e química. O processo de pirólise apresenta uma solução versátil, permitindo a obtenção de combustíveis, monômeros e gases aproveitáveis. Entre suas vantagens, destacam-se a viabilidade econômica, a possibilidade de reaproveitamento energético e a redução da dependência de combustíveis fósseis. No entanto, desafios como a necessidade de otimização dos parâmetros do processo e a integração eficiente na indústria ainda persistem. O presente estudo contribui para superar essas barreiras ao propor um modelo otimizado baseado em dados experimentais, visando aprimorar a eficiência termodinâmica da pirólise e ampliar suas aplicações, especialmente no setor aeroespacial. Não obstante, o modelo foi otimizado com a inserção de dados experimentais disponíveis em Ding *et al* (2012) e de Zhang *et al.* (2015).

“Todos os modelos estão errados, mas alguns são úteis.” – George E. P. Box.

2 OBJETIVO

2.1 OBJETIVOS GERAIS

Estudar a viabilidade de aplicação do processo de pirólise no tratamento de resíduos plásticos urbanos do município de São José dos Campos, a ser utilizado como forma de produção de matéria prima para combustíveis variados.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Realizar um levantamento bibliográfica do estado da arte do processo de pirólise aplicado como alternativa para a reciclagem de resíduos plásticos;
- Realizar a modelagem em PYTHON de um processo de pirólise de resíduos plásticos da literatura para validação do entendimento;
- Otimizar o modelo de pirólise em PYTHON e inserir dados experimentais encontrados em literatura;
- Inserir dados de resíduos plásticos urbanos de São José dos Campos no modelo desenvolvido para avaliar os produtos obtidos através da possível utilização da pirólise como opção de tratamento de resíduos urbanos.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1 ECONOMIA CIRCULAR

Com a Revolução Industrial no século XVIII, os bens de consumo deixaram de ser produzidos de maneira artesanal e manufaturada, e passaram a ser produzidos em larga escala, com um ciclo linear de aproveitamento dos materiais. Esse modelo é baseado na extração, transformação, produção, utilização e descarte dos produtos, o que gera um alto volume de resíduos. Este ciclo linear começa a se mostrar insustentável, onde temos uma extração e consumo de matéria prima em um alto ritmo, que não condiz com a disponibilidade limitada desses; e um depósito muito grande de resíduos no meio ambiente, gerando impactos na natureza, se descartados de maneira imprópria. Esse modelo de negócio linear também apresenta impactos negativos no setor social, uma vez que aterros estão atingindo seus níveis de capacidade cada vez mais rapidamente, e a disputa de terreno com aterros não é saudável, tendo em vista o crescimento populacional provisionado no mundo (Foster *et al.*, 2016; Leitão, 2015).

A Pegada Ecológica mundial é uma relação entre a área disponível no planeta e a área necessária para atender todas as demandas da população mundial. Já em 2014, a estimativa é de que seria preciso 1,5 planetas para atender a demanda da população mundial. Além disso, a previsão do Programa das Nações Unidas para o Ambiente é que o consumo de minérios, petróleo e biomassa terá triplicado até 2050 (Foster *et al.*, 2016; Leitão, 2015).

No contexto de encontrar uma alternativa para o insustentável modelo de economia linear, surge o conceito da economia circular, que ganha força a partir de 2012 com a publicação do relatório “Em direção a uma economia circular”, por Ellen MacArthur. Esse modelo parte do princípio de que é possível a produção de produtos com múltiplos ciclos de uso, ou seja, manter os recursos inseridos na cadeia econômica pelo maior tempo possível. Além disso, parte-se do princípio de que podemos tratar o resíduo como um recurso. Isto traz como vantagens a redução da dependência de recursos naturais para a obtenção de matérias primas, e, em paralelo, oferece um destino para o grande volume de resíduos gerados pela sociedade. As

vantagens da implementação desse modelo podem ser visualizadas na Figura 1 (Azevedo, 2015; Silva *et al.*, 2021; Leitão, 2015).

Figura 1 - Vantagens da economia circular



Fonte: Adaptado de Consenza, Andrade e Assunção (2020).

O conceito de economia circular vem ganhando destaque no setor produtivo e na sociedade de maneira geral. Os princípios da economia circular são a redução da extração de recursos, aumentar os níveis de reutilização, aumentar a eficiência dos processos e produtos, como por exemplo, criação de produtos de múltiplas utilidades, bem como desenvolver novos modelos de negócios que auxiliem na integração das cadeias produtivas e que agregam valor ao produto manufaturado. Também é necessário o desenvolvimento de uma logística reversa que mantenha a qualidade e o custo de forma equilibrada e a coordenação dos atores dentro e entre as cadeias de suprimento para criar escala e identificar usos de maior valor (Azevedo, 2015, Start&Go, 2018).

Vale ressaltar que, caso não seja possível alocar certo material descartado em sua própria cadeia produtiva, ele pode ser tratado como insumo para um terceiro, de um setor diferente ou não, para que possa ser reinserido no ciclo econômico novamente. Assim, é possível gerar novos fluxos de receita e novas oportunidades de

negócio, contribuindo para o crescimento e fortalecimento da economia mundial (Azevedo, 2015; Start&Go, 2018).

Por mais que a adoção da economia circular apresente benefícios como o fomento da competitividade e inovação no âmbito global de mercado, a sua implementação na prática é desafiadora. Envolve um esforço conjunto do setor privado e do governo (Leitão, 2015; Start&Go, 2018).

Empresas como a Basf e a Dow então investindo em tecnologias que facilitem a implementação da economia circular (Consenza; Andrade; Assunção, 2020). Por serem gigantes do setor químico de base, a implementação de economia circular por elas afeta toda a cadeia de indústria químicas, o que é importante para o fortalecimento e consolidação desse novo modelo econômico.

No Brasil, a Política Nacional de Resíduos Sólidos, ou PNRS (Lei Federal 12.305/2010) (Brasil, 2010), define resíduo sólido como “ Material, substância, objeto ou bem descartado resultante de atividades humanas em sociedade, a cuja destinação final se procede, se propõe proceder, nos estados sólidos ou semissólido, bem como gases contidos em recipientes e líquidos cujas particularidades tornem inviável o seu lançamento na rede pública de esgoto ou em corpos d’água, ou exijam para isso soluções técnica ou economicamente inviáveis em face da melhor tecnologia disponível”. Essa lei também apresenta princípios e diretrizes sobre o ciclo de vida dos produtos e como reintegrar os resíduos em um novo ciclo econômico a partir de instrumentos como a logística reversa (Consenza; Andrade; Assunção, 2020; Foster *et al.*, 2016).

1.1.1 Materiais Plásticos e Upcycling

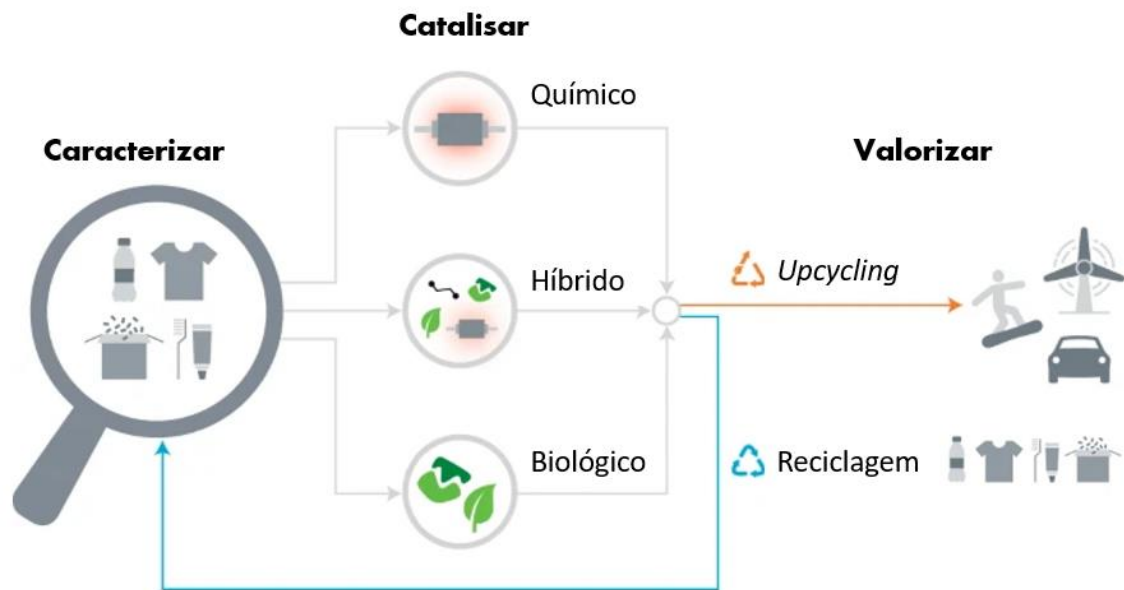
Os dados nacionais sobre a cadeia de reciclagem plástica evidenciam um cenário de potencial e desafios para a gestão de resíduos no Brasil: o índice de reciclagem de plástico pós-consumo situou-se em 24,9%, com cerca de 1,012 milhão de toneladas de plástico pós-consumo processadas frente a uma capacidade instalada de 2,39 milhões de toneladas, apontando lacunas entre capacidade e eficiência operacional; desigualdades regionais também se destacam, com concentração no Sul (33%) e menor contribuição nas regiões Norte e Centro-Oeste (3,5% cada), e variações na reciclabilidade por polímero, sendo PET, PEAD e EPS os

materiais com maiores taxas de recuperação. Esse panorama indica a necessidade de diversificar e integrar rotas tecnológicas e políticas públicas que considerem especificidades regionais e de fluxo de materiais; neste contexto, a pirólise surge como alternativa complementar capaz de valorizar frações plásticas de baixo desempenho na reciclagem mecânica, ao passo que a escolha da estratégia mais adequada deve considerar critérios técnicos, econômicos e ambientais locais (Abiplast, 2025).

A sociedade moderna demanda e consome muito plástico, uma vez que é um produto versátil e barato, sendo encontrado em produtos do nosso dia a dia como embalagens, interiores de carros e até mesmo roupas. Um outro exemplo de sua versatilidade foram os produtos descartáveis produzidos durante a pandemia do COVID 19, que ajudou na contenção da infecção pelo vírus SARS-CoV-2 (Jung *et al.*, 2023). Vale lembrar que o plástico chegou como uma disrupção tecnológica, onde, por exemplo, ao ser usado para o design de carros, melhora muito o seu consumo de combustível por ser um material mais leve. No entanto, como tratar os resíduos plásticos se torna um desafio, já que a natureza demora muitos anos para decompor esse material, desbalanceando o ciclo de consumo e descarte.

Atualmente, polímeros são reciclados por diferentes métodos, como incineração, reciclagem mecânica, pirólise, solvólise e despolimerização biológica, conforme se observa na Figura 2. Entretanto, apenas a reciclagem não é suficiente. O *upcycling* é definido como o processo de agregar valor aos resíduos para tornar o processo de reciclagem não somente economicamente viável, mas também economicamente vantajoso. O objetivo da indústria química é produzir insumos químicos a partir da purificação e separação de componentes orgânicos e inorgânicos. O mesmo vale para a reciclagem e para o *upcycling* (Jung *et al.*, 2023).

Figura 2 - Métodos de reciclagem de polímeros



Fonte: Adaptado de Ellis *et al.*, 2021.

Aumentar as taxas de reciclagem e otimizar seu processo (*upcycling*) é uma estratégia eficiente para mitigar o desafio ambiental, econômico e de gerenciamento de espaço da poluição por resíduos plásticos no mundo todo, uma vez que, dessa forma, transformamos o que antes era resíduo e em um produto de alto valor agregado para ser reinserido na cadeia produtiva (Jung *et al.*, 2023).

Os principais desafios, no entanto, para se atingir um gerenciamento eficiente de resíduos através da reciclagem é a separação e classificação dos resíduos e comportamento social. Além disso, a contaminação de materiais plásticos e a utilização de corantes, adesivos, *coatings* e demais aditivos nos plásticos dificultam sua reciclabilidade, uma vez que são de difícil separação da base plástica e podem afetar de maneira aleatória e de difícil controle as propriedades e características do material final (Ellis *et al.*, 2021; Jung *et al.*, 2023).

Investimento em pesquisas para tornar os processos de reciclagem cada vez mais economicamente rentáveis e viáveis (*upcycling*), e a inserção desses materiais obtidos de volta na cadeia produtiva (economia circular), são essenciais para que essa estratégia seja bem-sucedida (Ellis *et al.*, 2021; Jung *et al.*, 2023).

A maior porcentagem de plásticos usados atualmente são os chamados plásticos de *commodity*. Eles são classificados como olefinas, e os exemplos mais utilizados são o polietileno de alta e de baixa densidade (PEAD e PEBD,

respectivamente), polipropileno (PP) e poliestireno (PS). Sua decomposição demanda processos de alta temperatura, devido a sua estrutura molecular formada por cadeias carbônicas longas e ligações covalentes. Além disso, a matéria prima virgem para produzir esses plásticos é muito barata, o que faz com que tornar o processo de sua reciclagem economicamente viável e vantajoso seja um grande desafio. Nesse quesito, investimento em tecnologias de *upcycling*, que agregam valor ao material produzido no processo de pirólise de resíduos plásticos de *commodity* é a chave para solucionar o problema ambiental e econômico da alta produção e alto descarte de plásticos (Jung *et al.*, 2023; Zhao *et al.*, 2022).

Alguns exemplos de estudos sendo conduzidos para o *upcycling* de resíduos plásticos são:

- Li *et al.* (2022) *relatam que a pirólise do polietileno e do polipropileno produz misturas de olefinas que podem ser diretamente submetidas à hidroformilação.* (Xu *et al.*, 2023)
- *Um método para transformar polietileno (PE) e polipropileno (PP) em ~80% de conversão em ácidos graxos com massas molares médias de até ~700 e 670 daltons, respectivamente.* (Xu *et al.*, 2023)

O foco do atual trabalho será no processo de pirólise de resíduos de plásticos de *commodity* e na obtenção de combustível. Vale ressaltar que, atualmente, há poucos exemplos de repolimerização bem-sucedida no sentido de se obter um polímero com altas taxas de pureza e rendimento (Jung *et al.*, 2023). Entretanto, se utilizá-lo como combustível, a questão da pureza torna-se menos relevante. É possível avaliar a adição de catalisadores durante a pirólise ou no tratamento subsequente do óleo pirolítico como estratégia para aumentar a pureza do produto e direcionar a composição química em favor da formação de frações com propriedades desejáveis; esses catalisadores podem promover reações de quebra, desoxigenação e aromatização, elevando a seletividade para hidrocarbonetos de maior valor e reduzindo impurezas que prejudicam o desempenho final.

1.2 Pirólise

A pirólise é um processo de reciclagem química que consiste na decomposição térmica, em ausência ou deficiência de oxigênio, visando minimizar a formação de gases de combustão. Durante a decomposição, os materiais sofrem a quebra de suas ligações químicas devido às altas temperaturas. Essas moléculas são então rearranjadas através de reações secundárias, dando origem a produtos mais estáveis (Fiorelli, 2020; Torrês Filho, 2014).

A pirólise de resíduos plásticos vem ganhando atenção como solução ao gerenciamento de resíduos sólidos, devido ao seu baixo impacto ambiental e possibilidade de obtenção de produtos de alto valor agregado, potencializando um amplo horizonte de aplicações tecnológicas promissoras. Os plásticos possuem elevado poder calorífico e baixas temperaturas de decomposição, quando comparados a materiais inorgânicos. Assim, são materiais apropriados para o processo de reciclagem por pirólise, já que podem ser facilmente degradados em monômeros ou cadeias poliméricas menores e menos complexas (Miranda, 2024). A pirólise destaca-se como solução promissora para o tratamento de frações plásticas inadequadas à reciclagem mecânica ou química, incluindo materiais de difícil separação e resíduos contaminados, como embalagens alimentares, filmes multicamadas e plásticos com sujidades orgânicas, pois permite a conversão térmica desses fluxos em frações líquidas, gasosas e sólidas passíveis de aproveitamento energético ou químico.

As frações obtidas são majoritariamente líquidas, seguidas por gasosas e, por fim, sólidas. As frações sólidas podem também ser conhecidas como *char*. Os plásticos de *commodity*, ou seja, plásticos produzidos em grande escala, como PS, PE e PP, ao serem degradados termicamente no processo de pirólise, geram hidrocarbonetos de alto valor agregado. Os gases e sólidos obtidos podem ser usados como combustíveis no próprio processo de pirólise, caso desejado, ou reutilizados como combustíveis pela indústria petroquímica e até mesmo serem processados para a obtenção de novos materiais, otimizando a eficiência termodinâmica do processo pirolítico e cumprindo os objetivos 7 e 13 da Agenda 2030 no âmbito biótico e social (Fiorelli, 2020; Miranda, 2024).

É possível fazer modificações no processo de pirólise visando obter melhor rendimento de um componente específico e qualidade geral das frações resultantes. A co-pirólise é um método no qual, usualmente, adiciona-se biomassa à carga principal para melhorar a taxa de obtenção de óleos e gases de alto valor agregado. Oyedun *et al.* (2014), Durra e Gupta (2018) e Johansson *et al.* (2018) estudaram a pirólise de biomassa celulósica, contendo bambu e restos de madeira, com resíduos plásticos variados, tendo como benefício, inclusive, a redução da energia demandada.

Shandangi e Mohanty (2015) analisaram a co-pirólise de sementes não comestíveis juntamente com resíduos de poliestirenos para produção de combustível. Já Dewangan *et al.* (2016) fez a adição de bagaço de cana ao polietileno. Chen *et al.* (2017) adicionou descartes de jornal ao PEAD para otimizar a produção de álcoois e hidrocarbonetos como resultado da pirólise.

Plásticos provenientes dos resíduos sólidos urbanos normalmente contêm uma biomassa e /ou compostos orgânicos. Isso faz com que o mecanismo de co-pirólise seja complexo e muitas vezes indefinido, dependendo fortemente da composição e quantidade exatas para ser devidamente estabelecido (Fiorelli, 2020).

Há também a pirólise catalítica, na qual é possível selecionar catalisadores específicos a serem adicionados no processo, com a intenção de melhorar o rendimento da obtenção de produtos de melhor demanda mercadológica, como por exemplo, hidrocarbonetos da faixa da gasolina, ou produtos aromáticos. Além disso, é possível adicionar catalisadores para reduzir a temperatura total do processo de pirólise, e conseqüentemente, a energia total requerida no processo, otimizando a eficiência do processo. Diferentes tipos de catalisadores têm sido estudados para essa finalidade, como zeólitas, sílica e alumina. Apesar de serem otimizadores da pirólise, quando se analisa a outra ponta do espectro da adição de catalisadores, uma desvantagem significativa da aplicação destes recursos é a necessidade de neutralizar e/ou inibir os impactos da presença de heteroátomos na carga de alimentação, como é o caso de PET, PVC, aditivos e demais impurezas dos resíduos sólidos urbanos. Nesse último caso, pode ser necessário realizar o processo em etapas, com uma pré-pirólise térmica antes da pirólise principal catalítica, para a remoção de impurezas (Dutta, Gupta, 2021; Fiorelli, 2020).

O mercado global de óleo de pirólise derivado de resíduos plásticos apresenta um potencial de crescimento significativo, impulsionado pela crescente demanda por

combustíveis alternativos e soluções sustentáveis para a gestão de resíduos. Estimativas recentes indicam que o valor de mercado será de USD 673,5 milhões em 2024, com projeções de alcançar aproximadamente USD 1,1 bilhão até 2034, refletindo uma taxa composta de crescimento anual (CAGR) de 5,5% (Market Research Future, 2024). Paralelamente, o setor mais amplo de conversão de plásticos em combustíveis, que inclui tecnologias como pirólise e gaseificação, foi avaliado em USD 531,1 milhões em 2023 e deverá atingir USD 2.693,6 milhões até 2030, com uma expressiva CAGR de 23,6% (Grand View Research, 2024). Esse crescimento é atribuído aos avanços no design de reatores de pirólise, à melhoria na qualidade dos combustíveis produzidos e aos marcos regulatórios que promovem práticas de economia circular. Além disso, preocupações ambientais relacionadas à poluição por plásticos e à dependência de combustíveis fósseis têm acelerado os investimentos e a inovação nesse campo (López *et al.*, 2021).

1.2.1 Simulação de processos químicos através de modelagem computacional

A simulação de processos é uma técnica computacional que permite modelar e analisar o comportamento de sistemas complexos em um ambiente virtual. Ela é amplamente utilizada nas engenharias e, em especial, na engenharia química para representar, analisar e prever o desempenho de processos químicos, desde reações individuais até plantas de processamento. O simulacro dos processos possibilita aos engenheiros o entendimento e a otimização do desempenho do processo de forma preditiva, gerando direcionamentos para o melhor conjunto de fatores operacionais e gerenciais.

A utilização da simulação de processos traz várias vantagens. Ela permite a análise de cenários hipotéticos e a tomada de decisões baseadas em dados, sem a necessidade de experimentos caros ou potencialmente perigosos. Além disso, a simulação pode reduzir significativamente o tempo e o custo do desenvolvimento de novos processos, melhorando a eficiência e a eficácia das operações existentes. Conseqüentemente, a simulação de processo é uma ferramenta valiosa para a engenharia moderna.

Diversos estudos sobre o processo pirolítico têm sido conduzidos através de simulação. Adeniyi *et al.* (2019) estudou a produção de combustíveis pela pirólise de polietileno de alta densidade, através da modelagem do processo no Aspen Hysys

(software de simulação de processos da indústria química, principalmente de petróleo e gás). Os resultados de sua simulação indicaram um rendimento de óleo de 97%, um rendimento de gás de cerca de 2% além de um rendimento de carvão de <1%. A simulação mostrou que o início da reação se dá a uma temperatura de cerca de 325°C com uma temperatura de reação ótima de 450°C. Esses resultados foram comparados com os obtidos por Alla e Ali (2014). Adeniyi *et al.* concluíram que, se devidamente otimizado, o PEAD é uma excelente matéria-prima para a pirólise, sem a necessidade de terem realizados experimentos reais em reatores.

Alla e Ali (2014) também utilizaram o Aspen Hysys para a modelagem de um processo de pirólise de resíduos plásticos. A modelagem foi desenhada visando converter o resíduo plástico em hidrocarbonetos simples. Os resultados da simulação indicaram que os produtos finais obtidos são óleo 95% (de valor calorífico de 42 MJ/kg), menos de 1% de carvão e 4,6% de gases não condensados. Vale ressaltar que, o efeito da contaminação em plásticos pós-consumo, ainda não é claro, devido à variação da contaminação nos plásticos pós-consumo, seja ela inerente da fabricação do plástico (como por exemplo: tintas e adesivo), seja ela decorrente da utilização do plástico (como por exemplo: resíduos orgânicos).

Estudo de pirólise utilizando o Aspen Hysys foram conduzidos por Selvaganapathy *et al.* (2020) e Selvaganapathy e Muthuvelayudham (2021). No primeiro caso, Selvaganapathy *et al.* (2020) simulam uma pirólise de resíduos plásticos de PE, PP, e PS, em estado estacionário (ou seja, em condições constantes ao longo do tempo), incluindo inclusive a etapa de separação vapor-líquido em seu processo. Já Selvaganapathy e Muthuvelayudham (2021) tiveram como objetivo estudar a pirólise catalítica apenas de resíduos de poliestireno. Em ambas as análises se concluiu que os modelos simulados forneceram uma base ao pesquisador, permitindo-o conhecer os produtos esperados e seus componentes individuais para melhor compreensão e estudos de *scale-up* do processo. Dessa forma, os autores concluíram que a simulação forneceu informações que eram substanciais para ajustar os dados experimentais em termos de conversão de combustível líquido. Serras-Malilos *et al.* (2022) utilizou o software Aspen Plus para modelar um processo de pirólise de materiais compósitos residuais da indústria aeronáutica, chegando à mesma conclusão, a de que a modelagem é benéfica para suportar um subsequente processo de *scale-up* de seu processo, depois de validada.

Deng *et al.* (2019), para prever e analisar o processo de pirólise e gaseificação de resíduos sólidos urbanos em um leito fixo de forma mais verídica e apropriada, modelou numericamente, baseando-se na minimização da energia de Gibbs utilizando-se do software Aspen Plus. Kabir *et al.* (2015), utilizando o mesmo *software*, e a mesma premissa de minimizar a energia livre de Gibbs no processo, conduziu um estudo da modelagem da pirólise de resíduos verdes, que são resíduos biodegradáveis de várias fontes, como resíduos de jardins ou parques, aparas de grama ou flores, bem como madeira usada de fontes domésticas e comerciais. Ambos obtiveram resultados satisfatórios de quantificação dos produtos obtidos.

Ahamed *et al.* (2019) utilizou o Aspen Plus para obter dados faltantes, a fim de realizar uma avaliação do ciclo de vida de um sistema integrado que envolve a pirólise de resíduos plásticos de embalagens flexíveis. Olofsson e Halvarsson (2020) modelaram uma planta piloto de pirólise de garrafas PET no Aspen Plus e, assim, foi possível projetar vários cenários, estudá-los e, com a análise de sensibilidade desses parâmetros, também foi possível determinar como o resultado do processo é afetado por variáveis oriundas de tais cenários, podendo-se assim otimizar a pirólise. O modelo foi validado em relação a um estudo de referência e provou ser preciso apesar de pequenas variações.

O Aspen Plus também se mostrou eficiente para a modelagem de co-pirólise. Ouazzani *et al.* (2022) utilizou a ferramenta para estudar o processo de pirólise para a valorização de resíduos plásticos automotivos e bagaço de azeitona. Já Rumaihi *et al.* (2023) simulou a pirólise de resíduos plásticos, esterco de camelo, e caroços de tâmaras através do Aspen Plus, que mostrou-se eficaz na produção de combustíveis alternativos, embora seja recomendado um estudo mais aprofundado de viabilidade comercial.

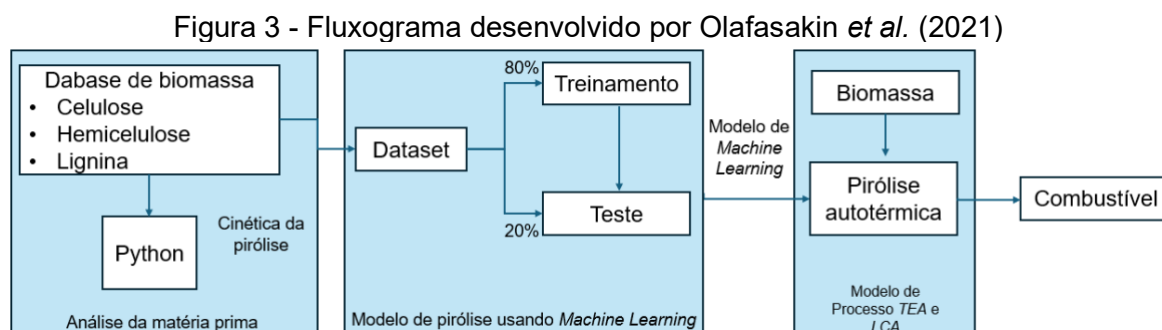
Por sua vez, a modelagem por meio de linguagens computacionais, como por exemplo o PYTHON, em *softwares open source*, oferecem uma série de benefícios em relação aos *softwares* convencionais, como é o caso do Aspen Plus e Hysys. Primeiramente, os *softwares open source* são gratuitos para usar, modificar e distribuir. Isso significa que é possível programar um modelo para atender a necessidades específicas sem restrições de licenciamento. Além disso, existem diversas bibliotecas de funções que são desenvolvidas por uma comunidade de

usuários e desenvolvedores, o que significa que eles são constantemente atualizados e melhorados.

No contexto da modelagem e simulação de processos químicos, a utilização de PYTHON pode permitir uma maior flexibilidade e inovação. Além disso, a natureza colaborativa desse tipo de ferramenta pode facilitar a troca de ideias e técnicas entre pesquisadores, podendo levar a novas abordagens e avanços. No entanto, é importante ressaltar que a utilização de linguagem computacional também oferece desafios, como a necessidade de habilidades técnicas para programar o modelo e base de dados por vezes menos extensas do que as de softwares convencionais.

Assoumani *et al.* (2021) desenvolveram um modelo em PYTHON para o estudo do comportamento da degradação térmica da pirólise de madeira, tendo seu modelo validado através de resultados experimentais, comprovando que é possível obter de maneira computacional resultados confiáveis de pirólise.

O aprendizado de máquina (*Machine Learning*, ou ML) também tem sido amplamente utilizado para prever o comportamento de reações pirolíticas, principalmente utilizando biomassa como matéria prima. Olafasakin *et al.* (2021) desenvolveu um programa de aprendizado de máquina, utilizando PYTHON, para a avaliação econômica e de emissões do processo de pirólise de biomassa de uma biorrefinaria. O modelo, esquematizado na Figura 3, foi capaz de prever e calcular o rendimento de massa e energia em escala comercial, o preço mínimo de venda de cada galão de biocombustível obtido, bem como as emissões de CO₂ por galão.



Fonte: Olafasakin *et al.* (2021).

Wang *et al.* (2022), utilizando *Machine Learning*, conseguiram desenvolver um modelo preditivo para as energias de ativação de reações de pirólise com 0.9964 de

acurácia. O objetivo era encontrar a energia de ativação das reações de pirólise e, neste caso, foram usados cinco tipos diferentes de matéria prima biológica (biomassa) para treinar o modelo. Além de variar o material de entrada, variou-se também o modelo cinético entre Kissinger-Akahira-Sunose (KAS), Ozawa-Flynn-Wall (OFW), e Friedman (FRD), que são os modelos mais utilizados no estudo de reações pirolíticas. Neste estudo em especial, concluiu-se que as variáveis mais relevantes para a acurácia em modelos pirolíticos de biomassa são as proporções da composição da matéria prima (em relação a carbono, hidrogênio, oxigênio, enxofre, nitrogênio e cinzas).

Já Belden *et al.* (2023) focaram em desenvolver um modelo de *Machine Learning* em PYTHON capaz de prever a fração de óleo obtida na pirólise dos principais plásticos de commodities, incluindo misturas e os plásticos PET e PVC. Além disso, o estudo incluiu a variação do tipo de reator e do uso ou não de catalisadores. Sete modelos foram comparados entre si e com dados reais, e concluiu-se que modelos não lineares são geram uma margem de erro absoluta menor na predição de resultados de pirólise.

Devasahayam (2023) desenvolveu um modelo de rede neural (Deep Learning) em PYTHON para prever a produção de hidrogênio de um processo de co-pirólise de plástico e biomassa. O conjunto de dados utilizado inclui 30 resultados experimentais, tendo a quantidade de plástico na mistura como variável independente e a quantidade de hidrogênio produzido como a variável dependente. Não foi levado em consideração parâmetros como: pressão, tempo de reação e residência e taxa de aquecimento.

1.2.2 *Parâmetros relevantes para a modelagem de um processo de pirólise*

Em uma modelagem e simulação da pirólise, os principais parâmetros que devem ser monitorados, que afetam diretamente o rendimento do processo e qualidade dos produtos obtidos são temperatura, pressão, vazão e tempo de residência. Além disso, o tipo do reator e a utilização de catalisadores também podem alterar os produtos finais (Alla; Ali, 2014; Sharuddin *et al.*, 2016; Tangsriwong *et al.*, 2020).

Ao se escolher o tipo de reator onde o processo pirolítico tomará lugar é necessário levar em consideração as características da carga polimérica e dos resíduos finais, bem como a taxa de transferência de calor necessária. Dentre os tipos de reatores disponíveis no mercado, os usualmente escolhidos para uma operação pirolítica são a extrusora, reator com tanque de mistura, reator vertical ou forno rotativo, reatores de leito fixo ou fluidizado e reator com banho salino (Buekens, 2006). O reator com leito fluidizado tem uma transferência de calor satisfatória, porém, exige uma filtração cautelosa da alimentação, o que é inviável para o processo proposto. Reatores de leito fixo são usados principalmente quando há a adição de catalisadores no processo.

Outra variável importante é o tempo de residência, que é definido como o tempo em que a mistura polimérica permanece no reator. Quanto maior o tempo de residência, mais tempo disponível para que ocorram mais degradações e conversões secundárias no processo, podendo gerar produtos mais estáveis termodinamicamente. Exemplos de produtos seriam o H_2 , metano, compostos aromáticos no geral e coque (Fiorelli, 2020).

Devido à presença de coque e carbono depois da decomposição dos plásticos, os trocadores de calor do processo podem apresentar queda na eficiência. Contaminantes como enxofre, heteroátomos e compostos organoclorados presentes no PVC e no PET, podem formar ácido clorídrico e compostos nitrogenados, que também afetam o desempenho dos equipamentos (Blazsò, 2010; Monteiro, 2018).

Para a modelagem correta utilizando um simulador computacional, é necessário imputar as propriedades dos componentes que atuarão como matéria prima do processo. Na Tabela 1 a seguir, se encontram as principais propriedades dos produtos líquidos finais da pirólise, quando utilizado o método de Monteiro, 2018.

Tabela 1 - Propriedades dos produtos líquidos produzidos na pirólise de materiais plásticos convencionais

Propriedade	PE	PP	PS
Ponto de ebulição (°C)	33,6	27,8	26,1
Ponto de fluidez (°C)	2,7	-39	-67
Teor de água (ppm)	0,18	0,13	0,67
Cinzas (%)	0,013	0,010	0,006
Viscosidade (cp@ 50°C)	2,19	1,9	1,4
Densidade (kg/m ³)	0,858	0,792	0,960
Número de cetano		56,8	12,6
Enxofre (%)	0,01	0,01	0,01
Poder calorífico (MJ/kg)	52,3	53,4	50,4

Fonte: Adaptado de Fiorelli (2020).

Por exemplo, Assoumani *et al.* (2021), ao desenvolver o seu modelo em PYTHON para a pirólise de amostras de madeira, levou em consideração, entre outras, as seguintes premissas:

- As amostras de madeira são expostas diretamente a fonte de calor, que é um termo numérico fixo, ou seja, a taxa de aquecimento foi desconsiderada;
- O processo de pirólise é isocórico, ou seja, não gera nenhuma mudança de volume;
- Reações secundárias dos voláteis formados foram desconsideradas;
- As reações químicas da pirólise são descritas pela Lei de Arrhenius de primeira ordem.

1.2.2.1 Influência da temperatura

As temperaturas de um processo de pirólise para plásticos variam usualmente de 460 a 600°C. As diferentes faixas de temperatura aplicadas não interferem significativamente na porcentagem obtida de fração sólida, e impactam mais na proporção líquido/gás obtida. Isso ocorre devido a maior taxa de quebra das ligações entre carbonos com o aumento da temperatura, que tende a gerar hidrocarbonetos mais leves. Como também pode ser observado na Tabela 2 abaixo, hidrocarbonetos da faixa C5-C9 são obtidos em grande quantidade, o que é economicamente interessante, uma vez que essa é a mesma faixa da gasolina (López *et al.*, 2011; Monteiro, 2018; Fiorelli, 2020).

Tabela 2 – Composição da fração líquida oriunda do processo de pirólise de uma mistura de resíduos plásticos em diferentes temperaturas, quando utilizada a metodologia de LÓPES, 2011

Grupo	Experimento	460°C	500°C	600°C
C5-C9	Aromáticos	68,0%	69,2%	70,6%
	Não aromáticos	10,1%	10,4%	não detectado
	Total	78,1%	79,6%	70,6%
C10-C13	Aromáticos	1,2%	3,1%	23,3%
	Não aromáticos	6,3%	6,3%	0,4%
	Total	7,5%	9,4%	23,7%
>C13	Aromáticos	2,5%	1,7%	5,3%
	Não aromáticos	6,0%	5,6%	não detectado
	Total	8,5%	7,3%	5,3%

Fonte: Adaptado de Fiorelli, 2020.

Já para a fração gasosa obtida, López *et al.* reportam que os principais componentes obtidos estão na faixa do C1 a C6, além de monóxido e dióxido de carbono e hidrogênio. Como esperado, com o aumento da temperatura, a proporção de metano, eteno e H₂ aumentam, à medida que os óxidos de carbono diminuem, juntamente com os componentes mais pesados (C₅ e C₆). (López *et al.*, 2011; Fiorelli, 2020).

1.2.2.2 Influência da composição da carga de alimentação

Os impactos da composição da carga de alimentação do processo pirolítico de tratamento de resíduos sólidos de plásticos também devem ser levados em consideração. É importante ressaltar que não é técnica e economicamente viável fazer uma seleção minuciosa dos resíduos antes deles adentrarem o reator pirolítico. No entanto, é necessário entender o como as quantidades de cada um dos plásticos mais comuns afetam o produto obtido ao final do processo.

Uma maior quantidade de PE pode aumentar a quantidade de alcanos, parafinas, eteno e butadieno, além de também aumentar a geração de gases, e conseqüente menor formação de líquido. Já uma maior quantidade de PP pode aumentar a quantidade de alcenos, voláteis, olefinas e naftenos, enquanto forma menos graxas. Além disso, aumenta a octanagem do produto final. Por fim, uma maior quantidade de PS, aumenta a quantidade de aromáticos e a quantidade de líquido, conseqüentemente diminuindo a formação de gás, além de também aumentar a octanagem do produto (Monteiro, 2018; Fiorelli, 2020).

É necessário se atentar à presença de PET e PVC na carga de alimentação. Esses dois polímeros podem gerar compostos nocivos ao meio ambiente e aos equipamentos pirolíticos, como o HCl, e não são recomendados para a reciclagem pirolítica de maneira geral por gerarem baixas conversões de óleos (Monteiro, 2018; Fiorelli, 2020).

1.2.3 *Processo Pyrolix*

O processo Pyrolix é um processo de pirólise de resíduos patenteado por Artur Tôrres Filho a partir de um projeto de pesquisa realizado na Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG). A pesquisa consistiu em avaliar o processo em três cenários: o primeiro para o tratamento térmico de resíduos de couro curtido ao cromo; o segundo, um estudo da possibilidade de utilização do Resíduo de Couro Carbonizado em processos metalúrgicos, visando a produção de pelotas de minério de ferro; e o terceiro, a viabilidade de cogeração de energia elétrica a partir da pirólise de resíduos sólidos urbanos.

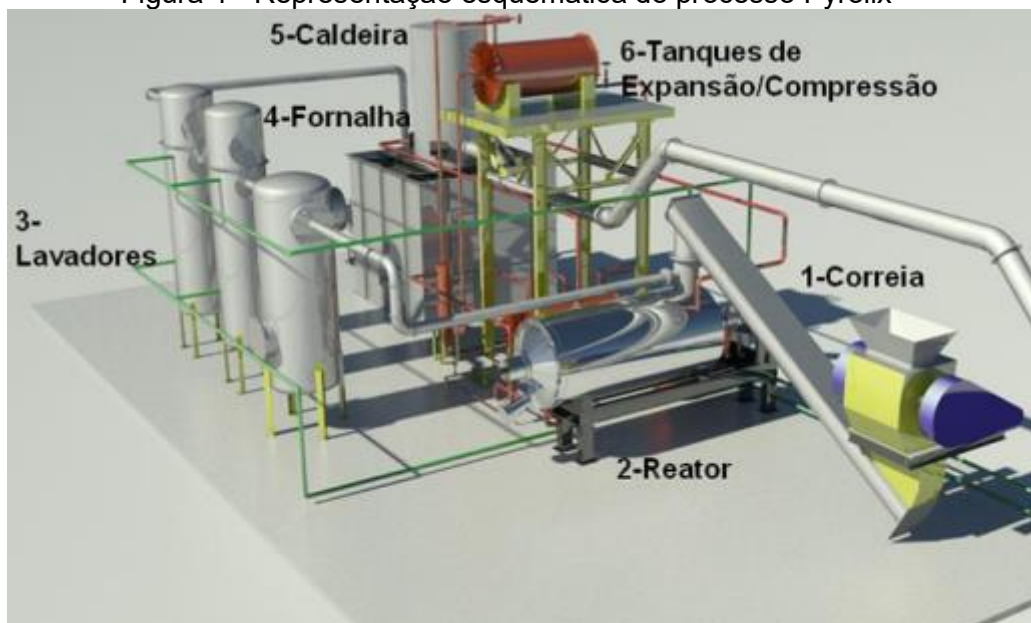
O processo de pirólise, segundo a patente Pyrolix, acontece em múltiplos estágios, e consiste em reatores de fluxo intermitente, um circuito fechado de aquecimento, cuja fonte de energia é uma fornalha (que queima o próprio gás produzido durante a pirólise dos resíduos e, também, cavacos de madeira), vasos de secagem e resfriamento, coletores centrífugos e filtros de tecido para que os gases oriundos do processo que não são utilizados possam ser lançados à atmosfera sem poluí-la.

Os resíduos de origem urbana, industrial, agrícola ou de serviços de saúde, que são a matéria prima do processo, seguem por uma esteira de alimentação, sem triagem prévia, até o reator, que funciona em bateladas. O aquecimento inicial do sistema se dá por um fluido térmico e o calor gerado durante o processo eventualmente se torna suficiente para o equilíbrio da temperatura da pirólise.

Este fluido térmico, que tem uma temperatura em torno de 338°C, é aquecido através da queima de gases provenientes do próprio processo de pirólise e cavacos de madeira, utilizados como combustível auxiliar para atingir a temperatura de 975°C no topo da fornalha.

O processo completo de uma batelada é de duas horas e trinta minutos. O tempo necessário para o resfriamento do sistema é de 8 horas. O produto obtido, definido como Resíduo Urbano Carbonizado, é então analisado quanto ao seu nível de umidade e concentração de metais pesados e demais poluentes, visando enquadramento nas legislações ambientais.

Figura 4 - Representação esquemática do processo Pyrolix



Fonte: Torrês Filho, 2014.

No primeiro estudo, o processo de pirólise foi aplicado a resíduos da manufatura de couro. Durante a etapa de curtimento desse produto, que tem como objetivo transformar a pele do animal em um material estável, resistente e maleável, é necessária muitas vezes a adição de cromo, sendo classificado esse procedimento como curtimento mineral. Existem alternativas menos prejudiciais ao meio ambiente, como o caso do curtimento vegetal, porém, como o cromo ainda é uma substância usada nesse processo, e sendo o couro altamente demandado pelas indústrias automobilísticas, calçadista e de mobiliário, se viu necessário projetar um processo de mitigação aos seus danos ambientais. A pirólise surge nesse cenário como uma alternativa que visa a recuperação do cromo, além da obtenção de um bio-óleo como subproduto. O produto carbonizado obtido foi aplicado como fonte alternativa de carbono para o processo de pelletização do minério de ferro.

A indústria metalúrgica utiliza diferentes fontes de carbono, como os carvões vegetais e minerais, coque e aglomerantes para seus diversos procedimentos de beneficiamento, como por exemplo o processo de pelotização do minério de ferro, e também, como matéria prima para queima, fornecendo energia para o processo. Para a produção de pelotas, o carvão atua como um agente de transferência de calor, aumentando a produtividade e melhorando a qualidade física da pelota. Entretanto, é conhecido os danos ambientais provenientes da queima de carvão, portanto, esta segunda parte do estudo foca em investigar a viabilidade técnica da obtenção de uma fonte de carbono renovável para a indústria metalúrgica.

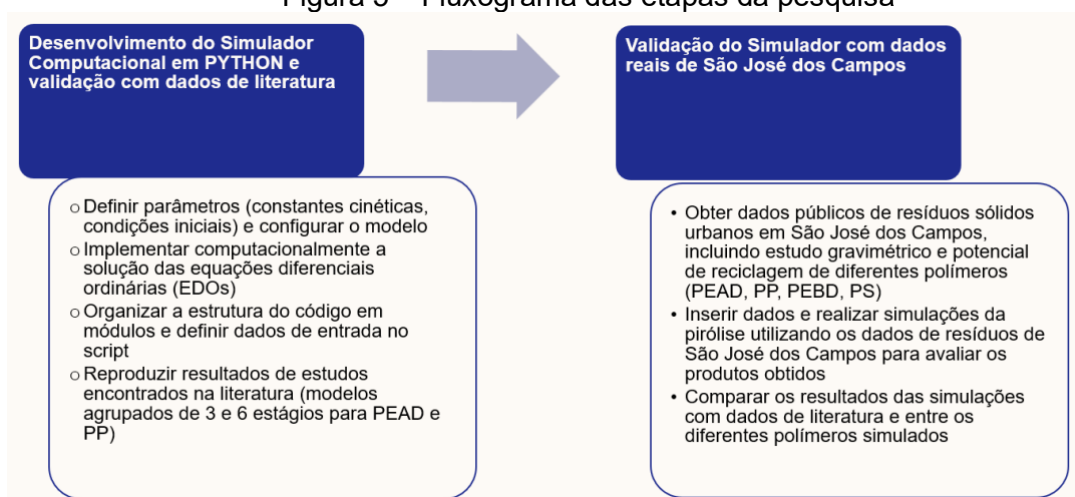
Por fim, o terceiro estudo tem por fim proporcionar uma alternativa para dois dos maiores desafios da sociedade atual: o gerenciamento de resíduos sólidos urbanos e a demanda crescente por energia. Como já explicitado, a pirólise é uma alternativa para transformar resíduos sólidos, que possuem uma grande proporção de matéria orgânica, para a produção de combustíveis sólidos, líquidos ou gasosos, sendo uma metodologia eficiente para a recuperação de energia, além dos subprodutos gerados com potencial valor econômico agregado. Além dos resíduos sólidos urbanos, resíduos de serviço de saúde também demandam uma atenção, especialmente por seu gerenciamento ser regulado de tal maneira a não oferecer riscos de contaminação para o restante da sociedade. A incineração é amplamente utilizada neste caso, mas como já foi pontuado, a técnica da pirólise oferece vantagens frente a simples incineração de materiais.

O foco do presente trabalho é, portanto, desenvolver um simulador para avaliar os produtos finais da pirólise com uma alimentação específica de resíduos plásticos urbanos compostos majoritariamente por PP, PE e PS, pensando na adoção do processo Pyrolix, já existente e comprovado, em São José dos Campos.

4. MATERIAIS E MÉTODOS

O desenvolvimento deste trabalho foi organizado em duas etapas complementares. A primeira etapa consistiu no desenvolvimento de um código computacional em Python capaz de reproduzir, a partir de dados reportados na literatura, os resultados de reações de pirólise de resíduos plásticos. A segunda etapa consistiu na validação da aplicação desse código com base em dados reais disponíveis para a cidade de São José dos Campos (SJC).

Figura 5 – Fluxograma das etapas da pesquisa



Fonte: Autora, 2025.

No presente trabalho, seguimos as premissas adotadas em Ding *et al.* (2012) e Zhang *et al.* (2015), conforme discutido nas seções seguintes.

As constantes cinéticas e termodinâmicas empregadas na modelagem foram extraídas de experimentos específicos reportados na literatura e, portanto, refletem condições experimentais particulares. A modelagem realizada não incorporou variações de pressão nem considerou explicitamente diferentes tipos ou geometrias de reator. Esses limites metodológicos implicam que as previsões do modelo devem ser interpretadas como estimativas baseadas nas condições de referência adotadas.

É importante esclarecer que os dados reais de SJC utilizados neste estudo referem-se exclusivamente ao quantitativo de resíduos plásticos gerados; não houve caracterização físico-química detalhada das frações coletadas.

Em trabalhos futuros pretende-se estender o escopo do modelo para incluir efeitos dependentes de pressão e a influência do tipo de reator, bem como calibrar o código com constantes obtidas a partir de ensaios laboratoriais próprios. O software foi concebido como uma ferramenta flexível: além da aplicação demonstrada neste estudo, ele pode ser utilizado para simular outras condições operacionais mediante a substituição das constantes cinéticas e termodinâmicas por valores obtidos em diferentes experimentos, permitindo avaliar sensibilidade e incertezas associadas aos parâmetros de contorno.

4.1 Desenvolvimento do Simulador

O desenvolvimento do simulador para a modelagem da pirólise de Polietileno de Alta Densidade (PEAD), Polietileno de Baixa Densidade (PEBD), Polipropileno (PP) e Poliestireno (PS) foi realizado com base em um modelo cinético de múltiplas reações de primeira ordem. Este modelo foi adaptado a partir do trabalho Ding *et al.* (2012) e Zhang *et al.* (2015) que fornece os parâmetros cinéticos fundamentais para o processo de decomposição térmica de polímeros. O objetivo do simulador é prever a evolução das concentrações dos produtos resultantes da pirólise (líquidos, gases e resíduos sólidos) em função da temperatura, sob condições controladas de aquecimento.

A criação de um simulador em Python para modelar a pirólise de polímeros envolve a implementação de um modelo matemático baseado em equações diferenciais que descrevem a cinética de degradação térmica dos materiais poliméricos. Inicialmente, define-se um conjunto de equações diferenciais ordinárias (EDOs) que governam as reações de decomposição térmica dos polímeros em frações líquidas, gasosas e sólidas. Essas equações são usualmente modeladas com base em cinéticas de reação de ordem zero, primeira ou pseudo-primeira ordem, sendo os coeficientes de taxa de reação determinados a partir de parâmetros cinéticos como energia de ativação e fator pré-exponencial, obtidos da literatura ou por experimentação. Para a solução dessas EDOs, empregam-se métodos numéricos, como o método de Runge-Kutta de quarta ordem (RK4) ou a integração implícita via o solver **odeint** da biblioteca **SciPy**, que permitem resolver sistemas acoplados de equações de forma eficiente, sendo esse último método o empregado nesse trabalho.

Além disso, para simular o comportamento térmico do processo, pode-se incluir a modelagem do balanço de energia, levando em consideração a transferência de calor e as variações de temperatura ao longo do reator de pirólise. A estrutura do código em Python foi organizada em módulos, onde os dados de entrada, como temperaturas de operação, composição dos polímeros e parâmetros cinéticos, são fornecidos e definidos diretamente no script. A saída do simulador foi representada em gráficos, utilizando bibliotecas como **Matplotlib**, para visualizar a evolução das concentrações dos produtos ao longo do tempo. Por fim, a validação do modelo é realizada por meio da comparação dos resultados simulados com dados experimentais disponíveis na literatura, garantindo que o simulador represente adequadamente o comportamento real da pirólise dos polímeros.

4.1.1 Fundamentação Teórica

A pirólise é um processo termoquímico fundamental na conversão de materiais orgânicos, incluindo polímeros sintéticos, biomassa e resíduos sólidos, em produtos de valor agregado. Esse processo ocorre em atmosfera inerte, ou seja, na ausência de oxigênio, o que evita a combustão direta e promove a quebra das macromoléculas em frações menores. A pirólise pode ser classificada em diferentes categorias, dependendo das condições operacionais, como temperatura e tempo de residência: (i) pirólise lenta, que ocorre a temperaturas moderadas e tempos de residência longos, favorecendo a formação de carvão; (ii) pirólise rápida, que emprega temperaturas mais elevadas e tempos curtos, maximizando a produção de líquidos; e (iii) pirólise flash, que opera em condições extremas de aquecimento rápido, gerando predominantemente produtos gasosos.

A modelagem matemática da pirólise é crucial para compreender e otimizar esse processo, permitindo a previsão da composição dos produtos e a eficiência energética do sistema. Para isso, a equação de Arrhenius é amplamente utilizada para descrever a cinética das reações envolvidas. Essa equação estabelece que a constante de velocidade de reação (k) varia exponencialmente com a temperatura (T), sendo definida como:

$$k = A_0 \times e^{\frac{-E_a}{RT}} \quad (4.1)$$

onde k é a constante de velocidade da reação, A_0 é o fator pré-exponencial (ou fator de frequência), E_a representa a energia de ativação da reação, R é a constante universal dos gases e T é a temperatura absoluta em Kelvin.

Essa relação matemática reflete a sensibilidade da taxa de decomposição dos polímeros à temperatura, indicando que pequenas variações térmicas podem impactar significativamente a velocidade do processo. A energia de ativação (E_a) é um parâmetro fundamental, pois representa a barreira energética que deve ser superada para que a reação ocorra. Polímeros distintos apresentam valores diferentes de E_a , influenciando diretamente a eficiência da pirólise e a distribuição dos produtos finais.

Além disso, a modelagem computacional do processo geralmente requer a solução de equações diferenciais que descrevem a conversão dos polímeros em produtos gasosos, líquidos e sólidos ao longo do tempo

A importância da modelagem baseada na equação de Arrhenius vai além da previsão da taxa de reação; ela permite também a otimização do processo, auxiliando no ajuste das condições de temperatura e tempo de residência para maximizar a produção de determinados produtos, como frações líquidas para combustíveis ou gases para aproveitamento energético. Assim, a aplicação desse conceito na engenharia química e ambiental possibilita avanços na valorização de resíduos plásticos e biomassa, contribuindo para soluções mais sustentáveis no gerenciamento de resíduos e na produção de energia.

Considerando que a Fórmula (4.1) pode ser linearizada aplicando-se a função \ln e utilizando o Método dos Mínimos Quadrados, adquirindo a forma $y = mx + b$, os demais coeficientes utilizados nas simulações são obtidos conforme a Equação 4.2.

$$m = \frac{-E_a}{R} ; \quad b = \ln A_0 \quad (4.2)$$

Para cada uma das reações de decomposição do polímero, foram utilizadas as constantes cinéticas A_0 e E_a específicas, conforme obtidas da literatura disponível, uma vez que, como se trata de um método inovador de sustentabilidade, ainda há pouca disponibilidade de dados experimentais para consultas e comparações. Não obstante, o modelo foi otimizado com a inserção de dados experimentais disponíveis em Ding *et al.* (2012) e Zhang *et al.* (2015). Essas constantes foram aplicadas na

formulação do modelo, permitindo a simulação das concentrações dos produtos ao longo do tempo e da variação de temperatura.

4.1.2. Implementação Computacional

A escolha do Python para a implementação do simulador de pirólise se deve à sua flexibilidade, facilidade de uso e ampla gama de bibliotecas científicas que permitem o desenvolvimento eficiente de modelos matemáticos complexos. Python é uma linguagem de alto nível, interpretada e com sintaxe simplificada, tornando-se ideal para prototipagem rápida e experimentação com diferentes abordagens numéricas. Além disso, sua popularidade na comunidade acadêmica e de pesquisa garante suporte contínuo e acesso a uma vasta documentação e exemplos de implementação.

Dentre as bibliotecas utilizadas, o **NumPy** desempenha um papel fundamental na manipulação eficiente de *arrays* e na realização de operações matemáticas vetorizadas, essenciais para lidar com grandes conjuntos de dados e para otimizar o desempenho dos cálculos numéricos. A pirólise envolve a resolução de sistemas de equações diferenciais acopladas, que descrevem a decomposição térmica dos polímeros em diferentes frações ao longo do tempo. Para resolver essas equações de forma precisa e eficiente, utilizamos a biblioteca SciPy, que fornece ferramentas avançadas de integração numérica. Especificamente, a função **odeint** da sub-biblioteca **scipy.integrate** permite a resolução de equações diferenciais ordinárias (EDOs) por meio de métodos numéricos robustos, como os esquemas de Runge-Kutta e BDF (*Backward Differentiation Formula*), garantindo estabilidade e precisão na simulação (Fernandes, 2024; Novaes, 2025; SCIPY, s.d).

Além do cálculo numérico, a visualização dos resultados é um aspecto crucial para interpretar o comportamento do processo de pirólise sob diferentes condições operacionais. Para isso, a biblioteca Matplotlib é utilizada na geração de gráficos que ilustram a evolução das concentrações de sólidos, líquidos e gases ao longo do tempo. Representações gráficas são essenciais para a validação do modelo, permitindo comparações com dados experimentais e facilitando a identificação de padrões e tendências no processo.

Outra vantagem do uso de Python é a possibilidade de integração com outras ferramentas e ambientes de computação científica. O simulador pode ser facilmente adaptado para execução em notebooks Jupyter, permitindo testes iterativos e análises interativas, além de facilitar a documentação do código. Ademais, a escalabilidade do Python possibilita a expansão do modelo para incluir parâmetros mais complexos, como balanço térmico e modelagem da transferência de calor dentro do reator, aumentando o realismo da simulação.

Por fim, o uso dessas bibliotecas não apenas agiliza o desenvolvimento do simulador, mas também garante reprodutibilidade e confiabilidade nos resultados, aspectos fundamentais para aplicações acadêmicas e industriais. A capacidade de ajustar dinamicamente parâmetros do modelo e simular diferentes cenários torna Python uma escolha ideal para a análise e otimização do processo de pirólise, contribuindo para o avanço de soluções sustentáveis no tratamento de resíduos plásticos e produção de combustíveis alternativos.

4.1.3 Definição dos Parâmetros

Os parâmetros cinéticos do modelo foram extraídos de tabelas fornecidas em estudos anteriores, particularmente aqueles de Ding *et al.* (2012) e Andersen (2017).

As constantes A e E_a para cada reação foram utilizadas na função de Arrhenius, permitindo calcular as taxas de decomposição nas diferentes etapas do processo.

4.1.4 Condições Iniciais e Configurações do Modelo

As condições iniciais do simulador foram configuradas com base na porcentagem inicial de polímero (100%), e o sistema foi aquecido de uma temperatura inicial de 300 °C até 700 °C com uma taxa de aquecimento de 10 °C/min. As equações de Arrhenius foram então aplicadas para calcular as constantes de reação em função da temperatura, enquanto a evolução das concentrações dos produtos foi resolvida usando o método ***odeint*** da biblioteca **SciPy**.

4.1.5 Solução do Sistema de EDOs

A solução do sistema de EDOs foi obtida para um intervalo de tempo que corresponde ao período de aquecimento do reator. As concentrações dos produtos de pirólise foram calculadas, discretizando-se o tempo em 500 pontos, permitindo a obtenção de curvas de concentração em função da temperatura.

Cada um dos modelos (3 e 6 estágios) possuem um conjunto específico de equações diferenciais, conforme apresentados na seção 4.2.

4.1.6 Visualização dos Resultados

Os resultados da simulação foram visualizados por meio de gráficos gerados a partir da biblioteca **Matplotlib**, que representam a variação das concentrações das diferentes frações do polímero (sólidos, líquidos e gases) em função da temperatura e do tempo. Esses gráficos permitem a análise detalhada do comportamento do material durante a pirólise, fornecendo insights valiosos sobre a eficiência do processo e as condições ótimas de operação para a produção dos combustíveis híbridos. (Oliveira, 2021).

4.2 Validação do simulador em PYTHON, a partir da reprodução de resultados da literatura.

Os modelos de um estágio são desenvolvidos a partir de análises de validação laboratoriais, como a análise termogravimétrica (TGA). São adequados para calcular numericamente uma previsão de tempo de decomposição pirolítica de certo componente a certa temperatura, mas falham em definir com precisão as proporções de produtos formados (entre gases, líquidos/óleos e sólidos/*char*).

Para reproduzir os resultados apresentados na literatura, desenvolveu-se um modelo computacional utilizando a linguagem Python, fundamentado nos modelos cinéticos agrupados de pirólise de 3 estágios (Three Lumps), conforme desenvolvido por Ding *et al.* (2012) e de 6 estágios (Six Lumps), conforme proposto por Zhang *et al.*

(2015). As Figuras 6 e 7 ilustram os diagramas de reações empregados nesses modelos, enquanto as equações que regem cada um deles são detalhadas a seguir.

Modelo de 3 Estágios (Three Lumps):

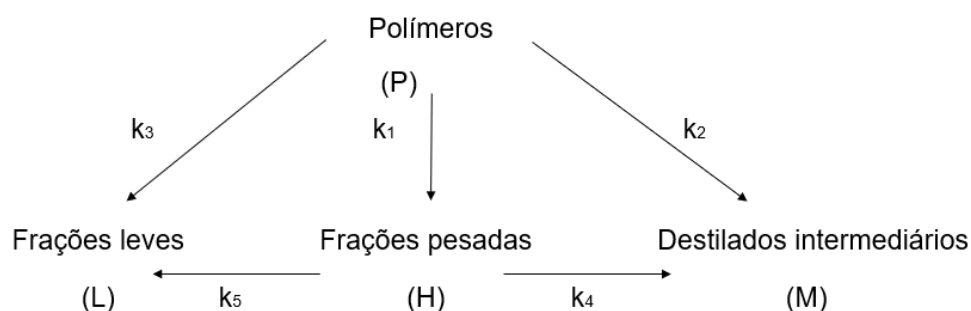
Este modelo segmenta os produtos da pirólise em três categorias principais:

- Frações leves (gases): produtos de baixo peso molecular, como metano, etano e outros hidrocarbonetos leves.
- Frações intermediárias (líquidos/óleos): compostos líquidos resultantes da condensação de vapores orgânicos, incluindo alcatrões e óleos pesados.
- Frações pesadas (ceras e carvão): resíduos sólidos compostos por materiais carbonáceos e ceras de alto peso molecular.

O modelo assume que a pirólise ocorre através de reações simultâneas que produzem essas três frações diretamente a partir do material original.

Ding *et al.* (2012) obtiveram os dados experimentais realizando pirólise em batelada de amostras de polímeros virgens (pellets de HDPE, LDPE e PP) carregando 200,0 g no interior de um reator-autoclave de 1000 mL evacuado a 6,325 kPa, com agitação a 90 rpm e aquecimento controlado por perfil térmico monitorado por termopar, procedendo ao resfriamento por serpentina, quantificando o gás pela perda de massa do reator, separando o óleo por destilação a vácuo e extraíndo os polímeros não convertidos com tetra-hidrofurano para determinação dos rendimentos e composições dos produtos.

Figura 6 - Modelo Agrupado de 3 estágios proposto por Ding *et al.* (2012)



K_i ($i = 1$ até 5) são as constantes de reação.

Fonte: Adaptado de Ding *et al.* (2012)

As equações utilizadas para a simulação do modelo agrupado de 3 estágios são:

$$\frac{dX_P}{dt} = -X_p \times (k_1 + k_2 + k_3) \quad (4.3)$$

$$\frac{dX_H}{dt} = X_p \times k_1 - X_H \times (k_4 + k_5) \quad (4.3)$$

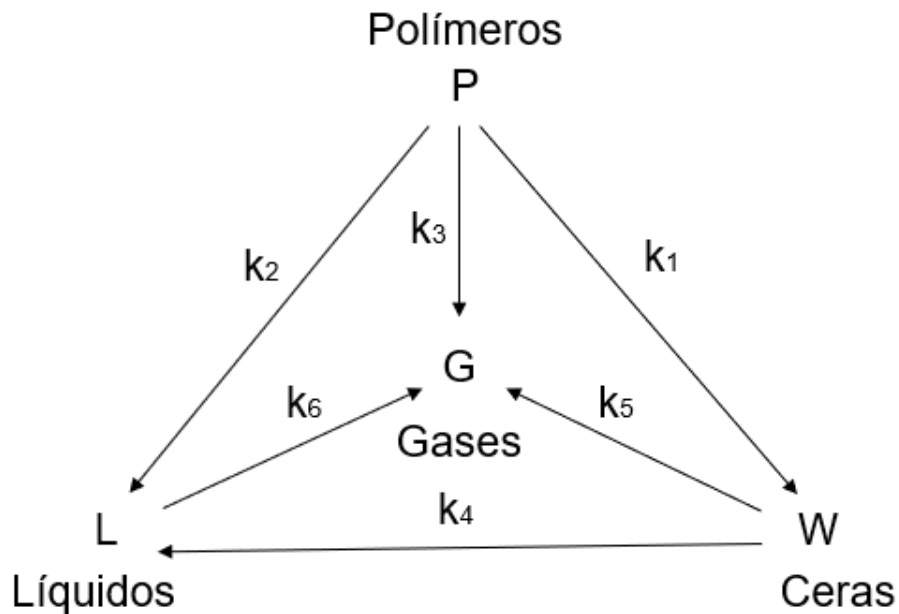
$$\frac{dX_M}{dt} = X_p \times k_2 + X_H \times k_4 \quad (4.5)$$

$$\frac{dX_L}{dt} = X_p \times k_3 + X_H \times k_5 \quad (4.6)$$

Modelo de 6 Estágios (Six Lumps):

Este modelo expande o conceito do modelo de 3 estágios, incorporando reações secundárias que permitem a transformação das frações intermediárias e pesadas em produtos de menor peso molecular ao longo do tempo de reação.

Figura 7 - Modelo Agrupado de 6 estágios proposto por Zhang *et al.* (2015).



K_i ($i = 1$ até 6) são as constantes de reação.

Fonte: Adaptado de ANDERSEN, 2017.

Já as equações utilizadas para a simulação do modelo agrupado de 6 estágios são:

$$\frac{dX_P}{dt} = -X_P \times (k_1 + k_2 + k_3) \quad (4.7)$$

$$\frac{dX_L}{dt} = X_P \times k_2 + X_W \times k_4 - X_L \times k_6 \quad (4.8)$$

$$\frac{dX_W}{dt} = X_P \times k_1 - X_W \times (k_5 + k_6) \quad (4.9)$$

$$\frac{dX_G}{dt} = X_P \times k_3 + X_L \times k_6 + X_L \times k_5 \quad (4.10)$$

Como apresentado nas figuras acima, os modelos agrupados consideram reações ocorrendo em paralelo dentro do reator pirolítico, formando ao mesmo tempo as frações gasosas, líquidas e sólidas.

Como conclusão desta seção, ressalta-se que a aplicação demonstrada do software constitui apenas uma das possíveis modalidades de utilização da ferramenta: além de reproduzir resultados a partir de um conjunto de constantes e condições de contorno obtidas na literatura, o código pode ser empregado para simular outras condições operacionais mediante a substituição das constantes cinéticas e termodinâmicas por valores experimentais alternativos; no entanto, a validade das previsões fora das condições de contorno originais é condicionada à representatividade e à qualidade dos dados de entrada. Para usos posteriores ao tratamento (por exemplo, como matéria-prima química ou para re-polimerização), é imprescindível caracterizar a pureza e a composição molecular das frações obtidas; exceto quando destinadas a uso direto como combustíveis, essas frações provavelmente exigirão etapas posteriores de purificação e separação.

No presente estudo não estão sendo consideradas a etapa de determinação analítica das frações por técnicas cromatográficas (p.ex., GC-MS) e a medição do poder calorífico das frações energéticas, de modo a estabelecer parâmetros de qualidade para diferentes destinos finais. No entanto, o software foi desenhado para que, no futuro, seja possível a realização de ensaios laboratoriais com amostras representativas de resíduos urbanos para obter constantes e condições experimentais específicas, inserir esses dados no modelo (resolução das equações diferenciais) e, em seguida, explorar no software alterações sistemáticas das condições de contorno,

avaliando a robustez e os intervalos de validade das previsões para diferentes cenários operacionais.

4.3 Validação do simulador em PYTHON, a partir de dados públicos de resíduos sólidos em São José dos Campos.

De acordo com o Sindicato Nacional das Empresas de Limpeza Urbana (Selurb), em média, o Brasil produz 79 milhões de toneladas de resíduos sólidos. Desse total, 13,5% do volume é de plásticos, totalizando um descarte de aproximadamente 10,67 milhões de toneladas de resíduos plásticos gerados por ano no Brasil (Fundação Heinrich Böll Stiftung, 2020).

Dessa quantidade, em média 23,4% dos plásticos de pós consumo foram reciclados no Brasil em 2021 (Atlas Brasileiro Da Reciclagem, 2025). A Tabela 3 abaixo apresenta o índice de reciclagem por tipo de plástico.

Tabela 3 – Índices de reciclagem de plásticos pós consumo no Brasil em 2021

Polímero	Índice de reciclagem (%)
PET	56,4
PEAD	29,0
PP	20,3
PEBD	10,6
PS	9,4
PVC	3,0

Fonte: Atlas Brasileiro da Reciclagem, 2025

No município de São José dos Campos, São Paulo, a empresa responsável pela gestão integrada e gerenciamento de resíduos sólidos é a Urbam (URBAM, 2024). Segundo a Urbam, em média, a população da cidade gera 0,81 quilogramas de resíduos sólidos por dia. Os resultados do estudo de caracterização gravimétrica realizado em 2023 podem ser encontrados na Tabela 4 abaixo.

Tabela 4 – Estudo Gravimétrico dos Resíduos Sólidos da Cidade de São José dos Campos em 2023.

Grupo de material	Média ponderada (ton/ano)	Média ponderada (%)
Matéria Orgânica	86 479	45,0
Metal	1.311	0,7
Papel	18.650	9,7
Plástico	21.184	11,0
Vidro	3.455	1,8
Rejeito	61.237	31,8
Total	192.316	100,0

Fonte: Adaptado de URBAM, 2024.

Os resíduos plásticos formam 11% do volume total de resíduos na cidade de São José dos Campos, o que condiz com a média brasileira de 13,5%. Podemos inferir dos dados apresentados pela Urbam que aproximadamente 58 toneladas de plástico chegam diariamente ao aterro.

Tomando como premissa para este estudo a base brasileira de reciclabilidade por tipo de plástico pós consumo, apresentada na Tabela 3, temos que, para o município de São José dos Campos, o potencial de reciclabilidade dos principais plásticos de commodity, foco desse estudo, são apresentados na Tabela 5.

Tabela 5 – Potencial de reciclagem de plásticos pós consumo em São José dos Campos/SP.

Polímero	Potencial de reciclagem (ton/dia)
PEAD	16,28
PP	11,77
PEBD	6,15
PS	5,45

Fonte: Autora, 2025.

Esses dados serão utilizados como dados de entrada no simulador desenvolvido, a fim de avaliar os resultados para a instalação de uma planta piloto de pirólise no aterro municipal da cidade. Os modelos de pirólise foram escolhidos de acordo com os dados dos polímeros disponíveis em literatura (Andersen, 2017, Ding *et al.* 2012, Zhang *et al.* 2015). Foram realizados os seguintes experimentos:

- Quantidade de líquidos (L), ceras (W) e gases (G) formados na pirólise de 16,28 ton/dia de PEAD, considerando uma taxa de aquecimento de 0,5°C/min, e o modelo de 3 estágios agrupados.

- Quantidade de líquidos (L), ceras (W) e gases (G) formados na pirólise de 11,77 ton/dia de PP, considerando uma taxa de aquecimento de 0,5°C/min, e o modelo de 6 estágios agrupados.
- Quantidade de líquidos (L), ceras (W) e gases (G) formados na pirólise de 34,20 ton/dia da mistura de PEAD, PEBD e PP considerando uma taxa de aquecimento de 0,5°C/min, e o modelo de 3 estágios agrupados. A mistura foi proposta conforme potencial de reciclagem de cada polímero, demonstrado na Tabela 5.

5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

5.1 Validação de modelos encontrados em literatura

No Capítulo 5.1, o modelo em PYTHON será validado utilizando-se dados de literatura de estudos sobre pirólise. Já no Capítulo 5.2, o foco será validar o modelo utilizando dados de resíduos sólidos urbanos em São José dos Campos/SP.

5.1.1 Reprodução do Modelo Agrupado de 3 Estágios

Para validar o modelo desenvolvido em PYTHON, foram usados dados do PEAD fornecidos pelo próprio Andersen (2017), que são reproduzidos na Tabela 6. Para esse desenvolvimento, o polímero considerado foi o PEAD.

Tabela 6 – Constantes de reação para PEAD (min^{-1})

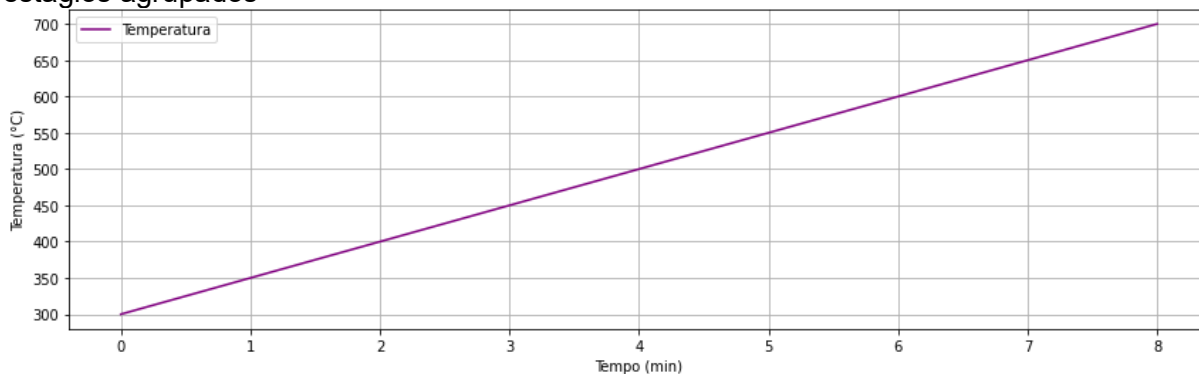
T [°C]	k1	k2	k3	k4	k5
360	0,0034	0,0005	0,0001	0,0003	0,0016
380	0,01	0,0016	0,001	0,0002	0,0003
400	0,0338	0,0006	0,002	0,002	0,0041
420	0,1248	0,0131	0,0089	0,0147	0,0094

Fonte: Ding *et al.* (2012).

Além dos dados da Tabela 6, a Energia de Ativação (E_a) e o Coeficiente de Arrhenius (A_0) para o PEAD também foram fornecidos, sendo eles 216,15 kJ/mol e $2,53 \times 10^{15} \text{ min}^{-1}$, respectivamente.

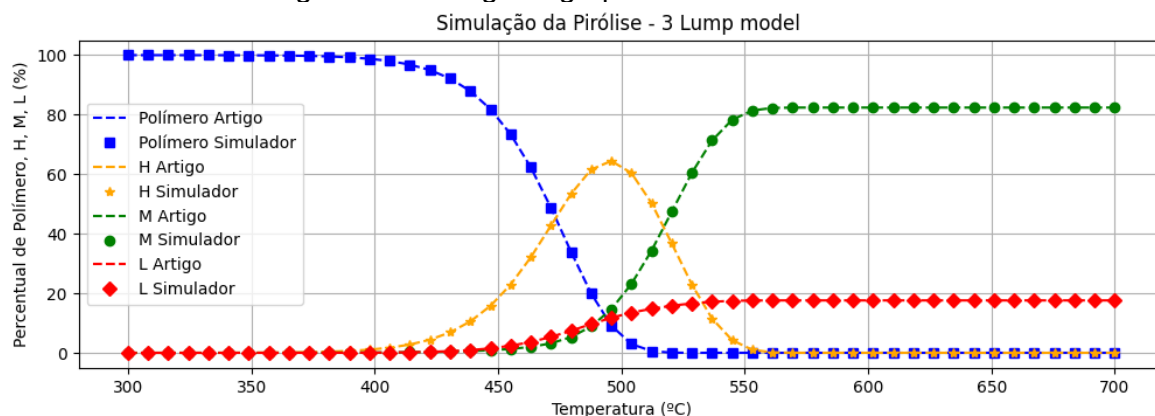
Nas Figuras 8 e 9, estão os gráficos obtidos na simulação, que corroboram com os resultados apresentado por Ding *et al.* (2012). O código usado pode ser encontrado no Apêndice A.

Figura 8 – Gráfico da variação linear da temperatura durante a pirólise modelada com 3 estágios agrupados



Fonte: Autora, 2024.

Figura 9 – Gráfico de decomposição de polímero conforme o aumento de temperatura, utilizando uma modelagem de 3 estágios agrupados.



Legenda: H representa a fração de pesados (*heavy*), M a de intermediários e L a fração mais leve (gases). Essas letras são as mesmas usadas por Ding *et al.* (2012) ao descrever seu modelo.

Fonte: Elaborado pela Autora.

Como é possível observar na Figura 8, a temperatura aumenta em uma taxa constante de 50 °C/min. ao longo do processo de pirólise, ou seja, a taxa de aquecimento foi adotada como constante para essa simulação.

A decomposição térmica de polímeros, como observado na Figura 9, ocorre predominantemente na faixa de temperatura entre 400°C e 500°C. Nesse intervalo, as cadeias poliméricas sofrem cisão, resultando na formação de produtos de diferentes massas molares. Inicialmente, são gerados compostos de maior massa molar, denominados frações pesadas, que atingem um pico de produção e, subsequentemente, diminuem em concentração. Esse comportamento sugere que as frações pesadas estão sujeitas a reações secundárias de decomposição,

convertendo-se em frações intermediárias e leves ao longo do processo pirolítico. A confirmação desse fenômeno é evidenciada pelo aumento na porcentagem de componentes intermediários conforme a decomposição das frações pesadas avança.

Observa-se também que o pico de produção das frações pesadas coincide temporalmente com a completa degradação do polímero original. Esse sincronismo indica que a pirólise inicial do polímero foi eficaz, resultando na formação de macromoléculas que, por sua vez, continuam a se decompor em espécies de menor massa molar. Esse processo sequencial reflete a dinâmica das reações térmicas, onde a energia fornecida promove a quebra progressiva das ligações químicas, facilitando a transição de compostos pesados para intermediários e, eventualmente, para gases.

Adicionalmente, verifica-se que a produção de gases ocorre em menor escala em comparação às frações líquidas e sólidas. Esse fenômeno pode ser atribuído à maior energia de ativação necessária para a quebra completa das ligações covalentes, resultando em moléculas gasosas de baixa massa molar. Experimentalmente, a literatura corrobora que a formação de produtos gasosos requer condições energéticas mais rigorosas, o que explica sua menor proporção relativa nos produtos finais da pirólise.

Esses aspectos ressaltam a complexidade do processo de pirólise, onde a distribuição dos produtos é fortemente influenciada pelos parâmetros operacionais, especialmente a temperatura, que determina as vias reacionais predominantes e a eficiência na conversão do polímero em produtos de interesse.

Esses resultados são compatíveis com os apresentados Ding *et al.* (2012) e Zhang *et al.* (2015).

5.1.2 Reprodução do Modelo Agrupado de 6 Estágios

Neste caso, o polímero utilizado no estudo foi o PP. Além disso, não foram fornecidas as constantes de reação (k), mas sim a relação de (A_0) e ($-E_a/R$), que são apresentados na Tabela 7.

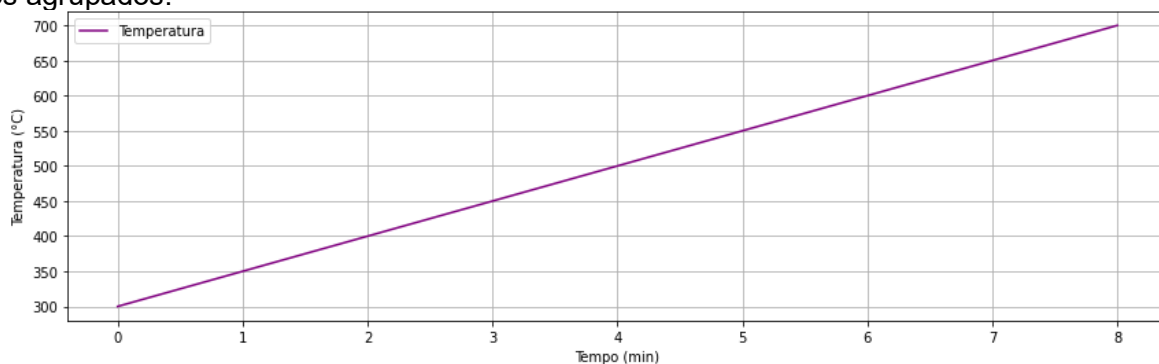
Tabela 7 – Coeficiente de Arrhenius calculados para PP

A_0 (min ⁻¹)	$-E_a/R$ (K)
$4,21 \times 10^{16}$	-25810,69
$3,34 \times 10^{13}$	-22181,99
$1,36 \times 10^{18}$	-29441,75
$2,36 \times 10^{11}$	-19301,91
1,46	-4230,92
$1,32 \times 10^{-64}$	74873,17

Fonte: Adaptado de Zhang *et al.* (2015).

Nas Figuras 10 e 11, estão os gráficos obtidos na simulação. O código usado pode ser encontrado no Apêndice B.

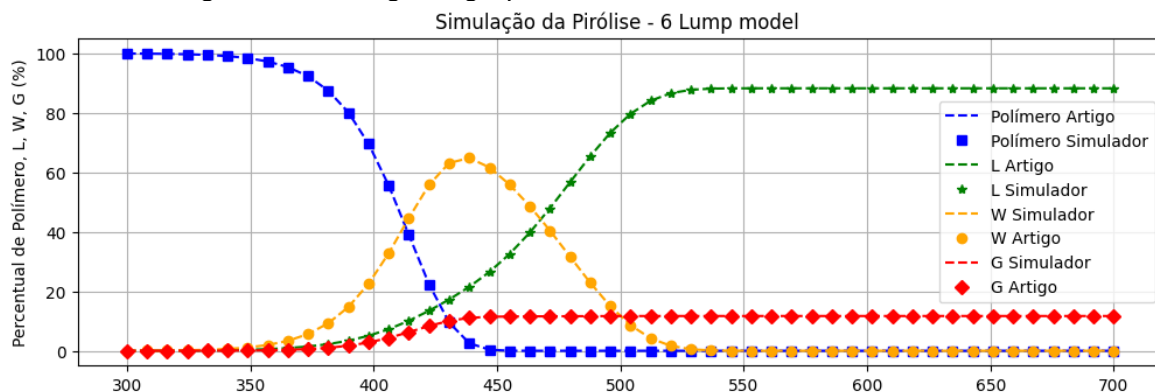
Figura 6 – Gráfico da variação linear da temperatura durante a pirólise modelada com 6 estágios agrupados.



Fonte: Autora, 2024.

Como é possível ver no gráfico acima, para essa simulação se manteve a premissa de utilização de uma taxa de aquecimento constante de 50 °C/min.

Figura 7 – Gráfico de decomposição de polímero conforme o aumento de temperatura, utilizando uma modelagem de 6 estágios agrupados.



Legenda: L representa a fração de líquidos, W a de ceras (pesados) e G a de gases. Essas letras são as mesmas usadas por Ding *et al.* (2012) ao descrever seu modelo.

Fonte: Elaborado pela autora.

Para comparar a faixa de temperatura de decomposição do polímero nessa simulação (aproximadamente 350 a 450°C), que é mais baixa que a apresentada anteriormente, é necessário ressaltar que estão sendo considerados polímeros diferentes em cada caso. Enquanto nessa simulação são usados dados de PP, os resultados anteriores foram obtidos com dados de PEAD.

No entanto, é possível notar que o comportamento da decomposição dos polímeros em suas três principais frações é essencialmente o mesmo. Uma diferença relevante é que o PP produz essencialmente menos gases que o PEAD. Tais resultados corroboram com os resultados apresentados por Zhang *et al.* (2015).

Os resultados obtidos demonstraram forte correlação com os dados experimentais disponíveis na literatura, validando a precisão e a robustez do modelo computacional para a simulação do processo de pirólise de polietileno de alta densidade (PEAD). Essa coerência sugere que os parâmetros cinéticos e as equações diferenciais utilizadas na modelagem foram bem ajustados às condições reais do processo, assegurando a confiabilidade do simulador na reprodução de tendências observadas experimentalmente.

Além disso, a aderência dos resultados ao comportamento esperado reforça o potencial da ferramenta como um instrumento preditivo valioso. A possibilidade de simular diferentes condições operacionais, como variações de temperatura, tempo de residência e composição do resíduo plástico, permite não apenas prever a distribuição dos produtos gerados (gases, líquidos e sólidos), mas também identificar as condições

ótimas para maximizar a produção de frações desejadas. Isso pode ter um impacto direto na viabilização econômica e ambiental da pirólise, uma vez que a otimização do processo pode levar ao aumento do rendimento de combustíveis líquidos de alto valor agregado e à minimização da formação de subprodutos indesejados.

Outro aspecto relevante é a contribuição do simulador para o avanço da reciclagem térmica de plásticos, uma alternativa promissora para o reaproveitamento de resíduos poliméricos que, de outra forma, poderiam ser descartados inadequadamente, agravando os impactos ambientais. Ao fornecer um modelo confiável para a análise do comportamento térmico do PEAD durante a pirólise, a ferramenta permite embasar decisões estratégicas no desenvolvimento de tecnologias sustentáveis, como por exemplo a integração desse método em processos industriais de conversão de resíduos em insumos energéticos.

Por fim, o uso de simulações computacionais reduz a necessidade de ensaios experimentais extensivos e dispendiosos, permitindo uma abordagem mais ágil e econômica para a investigação de novos parâmetros operacionais e o aprimoramento da tecnologia de pirólise. Assim, a validação do modelo fortalece seu potencial como uma ferramenta essencial para pesquisadores e engenheiros na busca por soluções inovadoras e eficientes para a gestão de resíduos plásticos e a produção sustentável de combustíveis alternativos.

5.2 Resultados do simulador desenvolvido usando dados reais para o processo de pirólise em São José dos Campos

Conforme apresentado no Capítulo 4.3, São José dos Campos recebe uma quantidade diária de plástico de 58,03 toneladas. Considerando o potencial de reciclagem do PEAD e PP, temos uma quantidade de 16,28 ton/dia e 11,77 ton/dia, respectivamente.

5.2.1 Resultados do simulador considerando a pirólise do PEAD

De acordo com os dados fornecidos por ANDERSEN, 2017, foi realizada uma adaptação no Modelo de 3 estágios. A Tabela 8 mostra as 5 relações de (A_0) e $(-E_a/R)$ fornecidos para o PEAD.

Tabela 8 – Coeficiente de Arrhenius calculados para PEAD

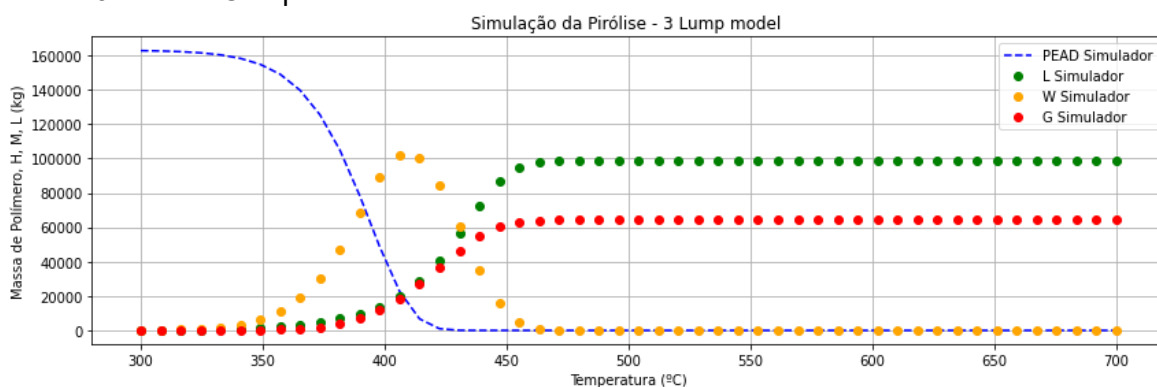
A_0 (min^{-1})	$-E_a/R$ (K)
$3,65 \times 10^{15}$	-26346,06
$5,19 \times 10^9$	-19089,02
$3,12 \times 10^{17}$	-31162,85
$8,92 \times 10^{16}$	-30334,58
$3,11 \times 10^8$	17046,59

Fonte: Andersen, 2017.

Considerando que foram fornecidas 5 relações, o Modelo de 3 estágios foi adaptado para a utilização das relações de (A_0) e $(-E_a/R)$, e não com base nas constantes de reação por temperatura, como apresentado no Capítulo 5.1.1. O código atualizado pode ser encontrado no Apêndice C.

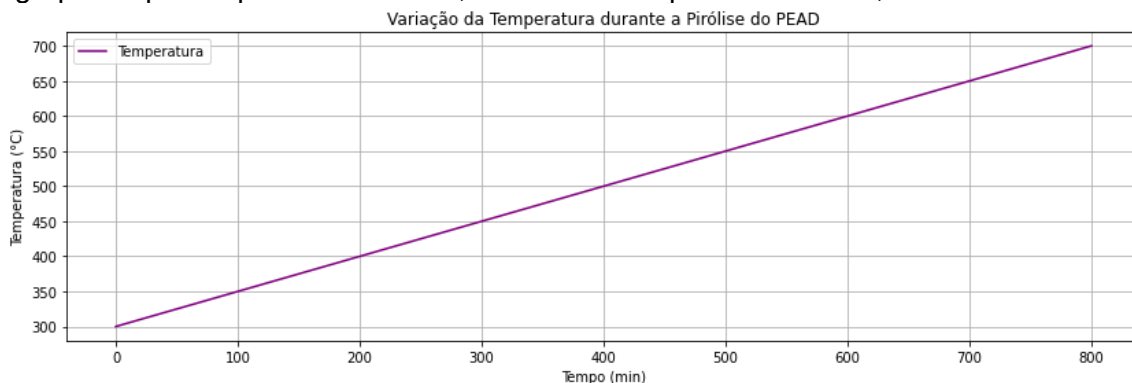
A Figura 12 apresenta o resultado da pirólise, considerando a quantidade de PEAD potencial de ser reciclada em São José dos Campos como 16,28 ton/dia. Já a Figura 13 representa a variação de temperatura durante a pirólise, considerando a taxa de aquecimento constante de $0,5^\circ\text{C}/\text{minuto}$. Adotou-se uma taxa de aquecimento reduzida com o objetivo de minimizar o consumo energético durante o processo de pirólise.

Figura 12 - Gráfico de decomposição de PEAD conforme o aumento de temperatura, utilizando dados de São José dos Campos.



Fonte: Da Autora, 2025.

Figura 13 – Gráfico da variação linear da temperatura durante a pirólise modelada com 3 estágios agrupados para a pirólise do PEAD, com taxa de aquecimento de $0,5^{\circ}\text{C}/\text{min}$.



Fonte: Da Autora, 2025.

A comparação entre os resultados obtidos na pirólise do polietileno de alta densidade (PEAD), utilizando o método de 3 estágios agrupador original e o método ajustado com dados reais, revela diferenças significativas no comportamento térmico do processo. No método original, com uma taxa de aquecimento constante de $0,5^{\circ}\text{C}/\text{minuto}$, a temperatura inicial da pirólise era aproximadamente 400°C . Por outro lado, ao ajustar o modelo para refletir dados reais, observou-se uma temperatura inicial de pirólise mais baixa, cerca de 350°C . Esse ajuste reflete as condições mais realistas de aquecimento, que podem incluir um perfil de temperatura não-linear, considerando a dissipação de calor durante o processo, que, no caso de experimentos em larga escala, é inevitável. A diferença de aproximadamente 50°C no início da pirólise pode ser explicada por variações nos parâmetros operacionais e nas condições do sistema de aquecimento, o que impacta diretamente a cinética das reações térmicas.

Além disso, a temperatura de estabilização, que corresponde ao ponto em que as taxas de reação se tornam constantes e a conversão do polímero se estabiliza, também apresentou uma diferença significativa entre os dois métodos. Para o modelo ajustado, a temperatura de estabilização foi aproximadamente 450°C , enquanto que para o método original foi cerca de 550°C . Esse decréscimo de 100°C pode ser atribuído a uma maior eficiência no controle térmico e ao ajuste das variáveis do modelo, como a distribuição de temperatura no reator e a eficiência das trocas térmicas durante o processo. Essa redução sugere uma maior precisão na simulação do comportamento térmico do PEAD, o que implica uma maior adequação às condições experimentais reais.

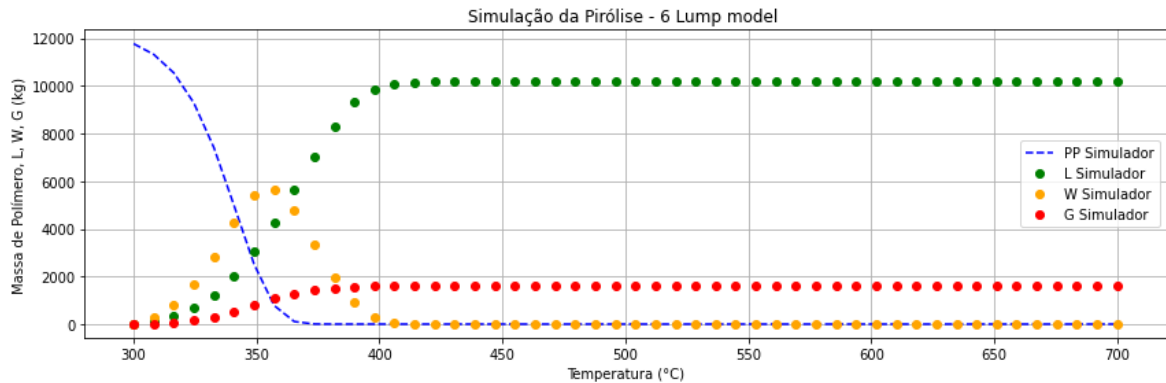
Analisando os dados obtidos para as concentrações finais das frações produzidas ao término do processo de pirólise, verifica-se que, ao atingir a temperatura de 450°C, a distribuição dos produtos é clara. A fração de resíduos pesados (W) apresentou uma concentração de $4,71 \times 10^{-15}$ ton, o que pode ser interpretado como a quase inexistência de produtos dessa classe no final do processo, indicando que a decomposição dos compostos pesados foi eficiente e completa. A fração gasosa (G) teve uma concentração de 6,62 ton, o que representa 39,40% do total, evidenciando uma produção significativa de gases, como metano, etano e outros hidrocarbonetos leves, que são subprodutos comuns em processos de pirólise. Já a fração líquida (L), composta principalmente por óleos e alcatrões, foi a que apresentou maior rendimento, com 10,18 ton, ou 60,59% do total de produtos, o que confirma a predominância da formação de líquidos durante o processo de pirólise do PEAD.

A inferência de que a temperatura de 450°C é alcançada após 300 minutos de processo está diretamente ligada à cinética das reações envolvidas. O tempo de 300 minutos necessário para atingir essa temperatura de estabilização reflete a dinâmica de aquecimento e a necessidade de um período considerável para que as reações de degradação térmica ocorram de forma eficiente, resultando na decomposição das longas cadeias poliméricas em produtos de menor peso molecular. Isso também demonstra que, para o processo ser eficiente e produzir as frações desejadas em proporções adequadas, é necessário um controle rigoroso da taxa de aquecimento e da temperatura durante todo o processo de pirólise.

5.2.2 Resultados do simulador considerando a pirólise do PP

Conforme o Capítulo 4.3, para a pirólise do PP, foi considerado o modelo de agrupado de 6 estágios, utilizando os dados da Tabela 7 como base. O volume considerado foi o de 11,77 ton/dia. O resultado obtido encontrado é apresentado na Figura 14.

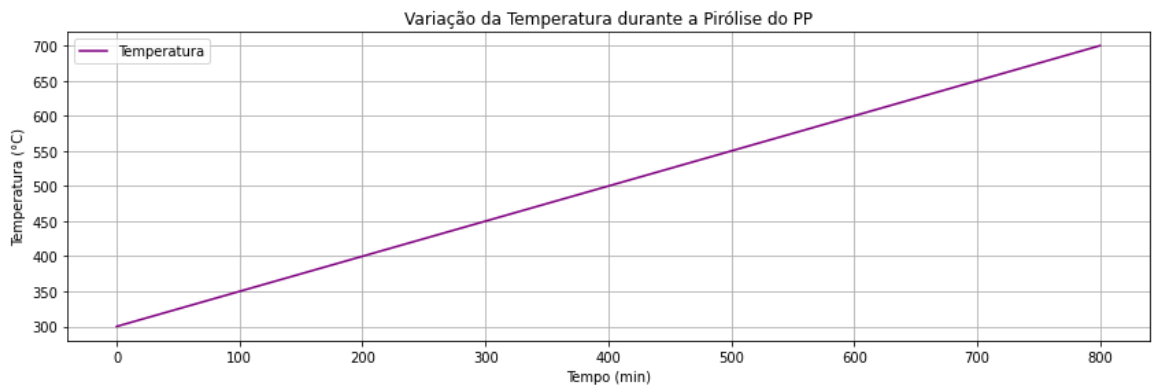
Figura 14 - Gráfico de decomposição de PP conforme o aumento de temperatura, utilizando dados de São José dos Campos.



Fonte: Da Autora, 2025.

Considerando a taxa de aquecimento de $0,5^{\circ}\text{C}/\text{minuto}$ para a quantidade de 11,77 toneladas de PP, temos que são necessários 200 minutos para que se atinja a temperatura de 400°C , conforme Figura 15 abaixo. Essa é a temperatura em que a pirólise começa a se estabilizar.

Figura 15 – Gráfico da variação linear da temperatura durante a pirólise modelada com 6 estágios agrupados para a pirólise do PP, com taxa de aquecimento de $0,5^{\circ}\text{C}/\text{minutos}$.



Fonte: Da Autora, 2025.

Ao comparar os resultados obtidos na etapa de validação com o método de 6 estágios agrupados, conforme apresentado na Figura 11, operando com uma taxa de aquecimento de $50^{\circ}\text{C}/\text{minuto}$, nota-se uma diferença significativa nas temperaturas de início da pirólise e de estabilização entre os dois estudos, semelhante ao observado no teste com o polietileno de alta densidade (PEAD). Para o polipropileno (PP), os resultados obtidos no estudo teórico indicam que a temperatura inicial de pirólise ocorre a cerca de 350°C , e a temperatura de estabilização é observada em torno de 500°C . Esses valores são superiores aos registrados no estudo com dados

experimentais de São José dos Campos, nos quais a temperatura inicial de pirólise foi de 300°C e a temperatura de estabilização foi de 400°C. Essa discrepância pode ser atribuída a diferenças nas condições operacionais entre os dois cenários, como a taxa de aquecimento, as condições térmicas do reator e as características específicas dos resíduos de PP analisados. A variação de temperatura pode refletir tanto a natureza do material quanto os parâmetros de operação do processo, como a velocidade de aquecimento e a capacidade do sistema de absorver e distribuir calor de maneira eficiente.

A análise dos resultados obtidos para as frações de produtos gerados ao final do processo de pirólise de PP revela uma distribuição bastante distinta em comparação com o PEAD. A concentração final de frações de resíduos pesados (W) foi de $6,98 \times 10^{-7}$ ton, uma quantidade bastante reduzida, o que indica que a decomposição do PP gerou uma quantidade mínima de compostos pesados. Em contrapartida, as frações gasosa (G) e líquida (L) apresentaram produções significativas, sendo 1,60 ton (13,59%) de gases e 10,17 ton (86,40%) de líquidos. Esse perfil de distribuição é característico do PP, que tende a gerar uma maior quantidade de combustíveis líquidos (principalmente óleos e alcatrões) em comparação com o PEAD, o que pode ser economicamente vantajoso, dado o valor mais alto desses produtos em mercados de energia e química. A maior produção de líquidos também sugere que, sob as condições operacionais do modelo, a pirólise do PP favorece a formação de compostos com maior potencial de aplicação como combustíveis ou matérias-primas para outros processos industriais.

A produção de gases no processo de pirólise de PP, equivalente a 13,59% do total, também é relevante, uma vez que esses gases podem ser aproveitados de várias maneiras. Uma opção é sua queima em caldeiras para geração de energia térmica, o que pode contribuir para a eficiência energética do processo. Alternativamente, os gases podem ser submetidos a um processo de liquefação fracionada ou adsorção, com o objetivo de separar e purificar os gases, dependendo dos produtos específicos que se deseja obter. Esses processos são comuns em indústrias que buscam recuperar hidrocarbonetos ou outros compostos voláteis de alto valor agregado, como metano, etano e outros alcanos leves.

Por outro lado, observa-se que a quantidade de frações pesadas (ceras) obtidas ao final do processo é extremamente baixa, tanto para o PP quanto para o PEAD. A cera, que é composta por polímeros de cadeia longa, é frequentemente quebrada durante o processo pirolítico em temperaturas elevadas, resultando na formação de produtos mais leves, como líquidos e gases. A baixa produção de cera, portanto, é um reflexo da eficiência da pirólise, onde as cadeias longas de polímeros são fragmentadas, o que facilita a conversão para combustíveis líquidos e gases. Contudo, caso haja interesse econômico na obtenção de ceras, será possível realizar ajustes nos parâmetros do processo, como a temperatura de pirólise e a taxa de aquecimento, para garantir promover uma decomposição mais controlada das moléculas e a preservação das frações de cera.

5.2.3 Resultados do simulador considerando a pirólise da mistura de PE e PP

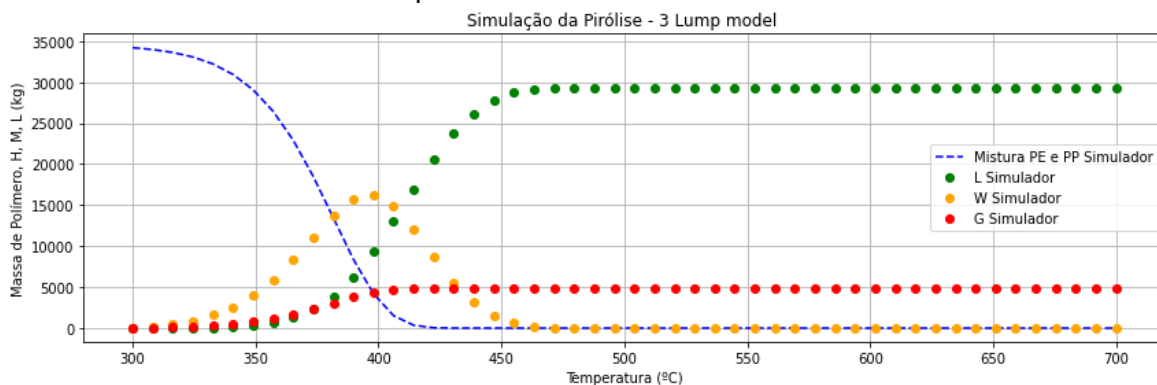
Assim como o caso do PEAD, Andersen fornece apenas 5 relações entre (A_0) e ($-E_a/R$) para a mistura de PEAD e PEBD (abreviado para PE) e PP, apresentadas na Tabela 9. Dessa forma, para a simulação de pirólise dessa mistura, também foi utilizado o modelo de 3 estágios adaptado, apresentado no Apêndice C. O valor total de polímero por carga, segundo dados da Urbam, é de 34,2 ton/dia. Os resultados são apresentados nas Figura 16 e 17.

Tabela 9 – Coeficiente de Arrhenius calculados para a mistura de PE e PP.

A_0 (min^{-1})	$-E_a/R$ (K)
$1,52 \times 10^{11}$	-1949,03
$6,60 \times 10^{16}$	-29267,11
$2,13 \times 10^{10}$	-19302,08
$5,80 \times 10^7$	-15019,97
$1,17 \times 10^{-15}$	18313,18

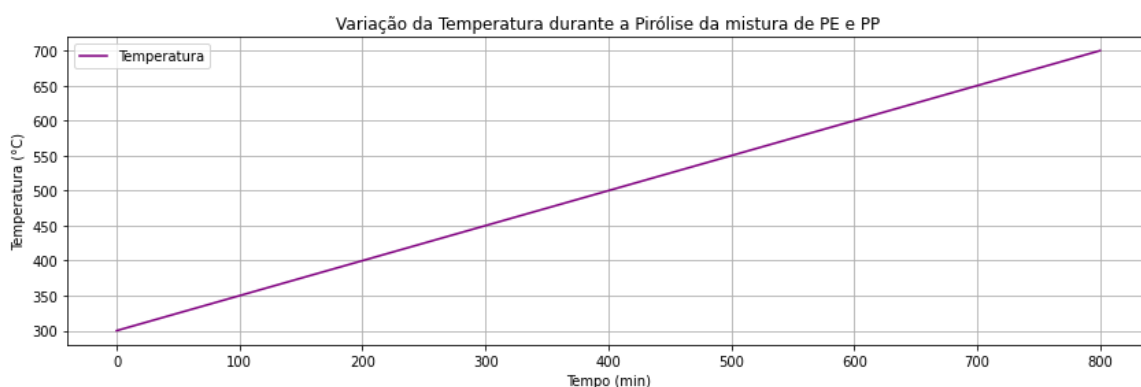
Fonte: Andersen, 2017.

Figura 8 - Gráfico de decomposição de PE e PP conforme o aumento de temperatura, utilizando dados de São José dos Campos.



Fonte: Da Autora, 2025.

Figura 9 – Gráfico da variação linear da temperatura durante a pirólise modelada com 3 estágios agrupados para a pirólise da mistura de PE e PP, com taxa de aquecimento de 0,5°C/minuto.



Fonte: Da Autora, 2025.

A análise dos resultados obtidos ao final do processo de pirólise da mistura de polímeros revela dados significativos quanto à distribuição das frações geradas (líquidos, resíduos sólidos e gases), com importantes implicações para o planejamento e otimização do processo. Especificamente, a concentração de resíduos sólidos (W) foi observada em $1,91 \times 10^{-12}$ ton, um valor extremamente pequeno, indicando que, durante a pirólise, a maior parte da matéria orgânica foi convertida em frações gasosas e líquidas, com a formação de resíduos sólidos sendo mínima. Esse fenômeno é típico de processos de pirólise eficientes, nos quais as cadeias longas dos polímeros são quebradas termicamente, resultando na formação predominante de produtos voláteis e líquidos.

A concentração de frações gasosas (G) ao final do processo foi de 4,89 ton, representando 14,32% do total de produtos gerados. A quantidade de gases

produzidos na pirólise da mistura de polímeros é considerável, embora menor do que a fração líquida. Esse valor está dentro do esperado, considerando a natureza dos materiais envolvidos na pirólise. A quantidade de gases gerados em processos de pirólise é fortemente influenciada pela estrutura química dos polímeros processados. Compostos com cadeias mais curtas, como o polietileno de baixa densidade (PEBD), tendem a gerar uma maior quantidade de gases, enquanto polímeros de maior peso molecular, como o polietileno de alta densidade (PEAD), tendem a produzir mais frações líquidas. Portanto, o fato de a quantidade de gases ser intermediária na pirólise da mistura sugere que a composição do material afeta diretamente a distribuição dos produtos.

Em relação à fração líquida (L), os resultados mostraram que 29,3 ton (85,67%) do material processado foi convertido em líquidos, o que representa a maior parte dos produtos finais da pirólise. Essa predominância de líquidos, composta por uma mistura de óleos e alcatrões, é característica da pirólise de polímeros com cadeias longas e ramificadas, como o PEAD e o PEBD. A quantidade de líquidos gerada pela pirólise de uma mistura de polímeros está diretamente relacionada à sua composição, e neste caso, a pirólise da mistura de polímeros resultou em uma produção considerável de combustíveis líquidos. Esse resultado é interessante do ponto de vista econômico, pois os líquidos gerados, como óleos e frações voláteis, têm grande valor como combustíveis ou como matérias-primas para a produção de outros compostos químicos.

Comparando os resultados obtidos com os de pirólises de PEAD e PP puros, é possível observar que a quantidade de combustível líquido gerado na pirólise da mistura de polímeros se situa em um valor intermediário entre os dois materiais. Esse comportamento sugere que a combinação de diferentes tipos de polímeros afeta a cinética de decomposição e a distribuição dos produtos, resultando em uma composição de frações que pode ser otimizada conforme a proporção de cada polímero na mistura. O polietileno de alta densidade (PEAD) tende a gerar mais líquidos devido à sua estrutura mais rígida e à necessidade de uma maior quantidade de energia para quebrar suas cadeias, enquanto o polipropileno (PP) tende a gerar maior quantidade de gases.

Tabela 10 – Quadro resumo comparativo dos dados experimentais obtidos

Simulação	Tipo de Polímero	Modelo	Fração Líquida (%)	Fração Gasosa (%)	Fração Sólida (%)
Validação (literatura)	PEAD	3 estágios	~60%	~39%	~1%
Validação (literatura)	PP	6 estágios	~86%	~13%	~1%
Dados reais – SJC	PEAD	3 estágios	60,59%	39,40%	~0%
Dados reais – SJC	PP	6 estágios	86,40%	13,59%	~0,01%
Dados reais – SJC	Mistura PE+PP	3 estágios	85,67%	14,32%	~0%

Fonte: A Autora, 2025.

Adicionalmente, a inclusão do PEBD na mistura de polímeros pode ter impactado a distribuição de frações ao final do processo, contribuindo para um aumento na produção de gases. O PEBD, com suas cadeias mais curtas e flexíveis, geralmente resulta em uma maior produção de frações gasosas. Isso é consistente com a observação de que, ao adicionar o PEBD à mistura, a quantidade total de líquidos produzidos permanece alta, mas a distribuição das frações também se modifica, refletindo as características de decomposição específicas de cada polímero.

Do ponto de vista econômico, a pirólise dessa mistura de polímeros pode representar uma opção vantajosa para a cidade de São José dos Campos. A produção de uma quantidade significativa de combustível líquido, aliada a uma redução na formação de resíduos sólidos, sugere que o processo de pirólise pode ser uma alternativa eficaz para a reciclagem de plásticos urbanos. A conversão de resíduos plásticos em combustíveis líquidos tem sido apontada como uma solução potencial para a gestão de resíduos e para a geração de energia a partir de fontes não convencionais, com implicações positivas para a sustentabilidade e a economia local. No entanto, vale ressaltar que para uso posterior seria importante fazer a classificação dessas frações e como podemos utilizá-las, e se for combustível, saber poder calorífico.

Portanto, aqui também, a análise dos resultados obtidos para a pirólise da mistura de polímeros, com a predominância de líquidos, oferece um cenário promissor para o uso dessa tecnologia na reciclagem e aproveitamento de resíduos plásticos,

destacando a viabilidade econômica e ambiental do processo para a produção de combustíveis de alto valor agregado. A otimização do processo e o ajuste das proporções de polímeros na mistura podem ainda aumentar a eficiência do processo, maximizando a produção de frações líquidas, respeitando o mínimo de fração gasosa que precisa ser gerada para que o processo seja autossustentável.

Essa flexibilidade no ajuste de parâmetros torna a pirólise uma tecnologia altamente adaptável, que pode ser otimizada para diferentes objetivos econômicos e ambientais, dependendo das necessidades do processo e das características dos materiais a serem reciclados. A análise detalhada da distribuição dos produtos finais, bem como a capacidade de ajustar as condições operacionais, são fatores-chave para o desenvolvimento de soluções mais eficientes e economicamente viáveis no aproveitamento dos resíduos plásticos.

Por fim, esses resultados destacam a importância do ajuste do modelo para simular de forma mais precisa as condições reais de pirólise, permitindo prever a distribuição dos produtos e otimizar os parâmetros operacionais, como a temperatura e o tempo de processo, para maximizar a produção de frações líquidas e minimizar a formação de subprodutos indesejados. A análise detalhada das concentrações de cada fração ao final do processo fornece informações essenciais para a melhoria da eficiência do processo de pirólise, direcionando estratégias para a obtenção de produtos de maior valor agregado, como combustíveis líquidos.

6. CONCLUSÃO

O estudo demonstrou a viabilidade da simulação computacional do processo de pirólise de resíduos plásticos urbanos utilizando Python e modelos agrupados de 3 e 6 estágios, validando a ferramenta frente a dados reportados na literatura e a dados públicos sobre a composição de resíduos de São José dos Campos. Os resultados apresentados demonstram uma aplicação específica do modelo, baseada em constantes cinéticas e condições de contorno extraídas de experimentos selecionados; não foram considerados efeitos dependentes de pressão nem variações inerentes ao tipo e à geometria de reator. Assim, as estimativas de rendimento e de composição devem ser interpretadas como indicativas para as condições adotadas.

Uma vez que o modelo pode aplicações reais, torna-se necessário caracterizar analiticamente a pureza e a composição molecular das frações obtidas por pirólise: exceto quando o óleo for utilizado diretamente como combustível, as frações destinadas a uso químico ou à re-polimerização provavelmente exigirão etapas posteriores de purificação e separação, tais como a cromatografia (p.ex., GC-MS) para identificação e quantificação de espécies, além da determinação do poder calorífico das frações energéticas, de modo a estabelecer requisitos de qualidade para diferentes destinos finais.

Para além da aplicação demonstrada, o software foi concebido como uma ferramenta flexível, passível de ser empregada em outras condições operacionais mediante substituição das constantes cinéticas e termodinâmicas por valores obtidos em diferentes experimentos. Destaca-se que a validade das previsões fora do conjunto de contorno original depende da representatividade e da qualidade dos dados de entrada. Recomenda-se, portanto, ampliar o uso da ferramenta para simular cenários com diferentes pressões e tipos de reatores e para incorporar constantes obtidas em ensaios laboratoriais próprios, bem como constantes provenientes de estudos independentes, de modo a caracterizar a sensibilidade do processo e delimitar intervalos de confiança das previsões.

6.1 Trabalhos Futuros e Recomendações

O reator pirolítico desenvolvido por Torres Filho (2014), patenteado como Processos Pyrolix, continua a apresentar grande potencial para o tratamento de resíduos plásticos urbanos; contudo, são necessárias etapas adicionais de adaptação operacional e de modelagem para viabilizar sua aplicação à escala municipal. Recomenda-se a execução de testes piloto destinados a ajustar a capacidade operacional, a taxa de aquecimento e o tempo real de cada ciclo, com réplicas suficientes para caracterizar a variabilidade entre corridas e frações de resíduos. Esses ensaios permitirão determinar a quantidade de unidades Pyrolix necessária para atender à demanda de São José dos Campos, considerando eficiência de conversão, rendimento de frações desejadas e tempo de ciclo.

Sugere-se ainda ampliar o uso da ferramenta computacional desenvolvida, empregando-a para simulações em outras condições operacionais e com constantes cinéticas e termodinâmicas obtidas em diferentes experimentos disponíveis na literatura e em ensaios laboratoriais próprios. A incorporação de constantes experimentais alternativas permitirá avaliar a sensibilidade do processo a parâmetros cinéticos e de contorno e estimar faixas de rendimento mais realistas para variados tipos de resíduos.

Deve-se avaliar a pureza e a composição química de cada produto obtido pela pirólise. Exceto quando o óleo for utilizado diretamente como combustível, será necessário implementar etapas posteriores de purificação e separação para uso como matéria-prima química ou para a produção de novos polímeros. Para tanto, recomenda-se a análise detalhada por técnicas cromatográficas (por exemplo, GC-MS) das frações líquidas e gasosas, com quantificação de espécies relevantes e determinação de indicadores de qualidade, tais como teor de oxigênio, nitrogênio, enxofre e frações aromáticas. Nos trabalhos futuros, a determinação do poder calorífico das frações destinadas a uso energético deve ser incorporada como indicador obrigatório de avaliação, enquanto para frações químicas destinadas à reconversão em monômeros ou polímeros deve ser exigida especificação de pureza mínima compatível com a rota subsequente.

A investigação da pirólise catalítica permanece como linha prioritária: testar diferentes classes de catalisadores, caracterizar seletividade e estabilidade, e analisar o impacto sobre rendimento e composição do óleo. Recomenda-se a integração experimental-computacional, em que dados laboratoriais de catalisadores e condições específicas sejam usados para calibrar modelos que prevejam desempenho sob diferentes cenários operacionais.

Melhorias no modelo computacional são necessárias, incluindo a formulação de equações cinético-termodinâmicas mais detalhadas que descrevam reações paralelas e secundárias, balanços de massa e energia mais completos, e cálculo de intervalos de confiança. Propõe-se implementar módulos para representar efeitos de taxa de aquecimento, tempos de residência distribuídos e influência de contaminação e umidade do material. O modelo deverá ser capaz de receber como entradas as condições experimentais específicas de uma amostra (obtidas em laboratório) e simular alterações nas condições de contorno para prever resultados sob parâmetros alternativos.

Por fim, tendo já sido criada a ferramenta de simulação, é imprescindível explorá-la em outras condições experimentais e destacar essa exploração nos resultados e na conclusão da dissertação. A continuidade do trabalho deverá contemplar um ciclo integrado: coleta representativa de amostras de resíduos urbanos, caracterização laboratorial (incluindo cromatografia e poder calorífico), testes piloto no reator adaptado e atualização/calibração do modelo computacional com as constantes e condições obtidas, permitindo assim projetar cenários de escala e requisitos de purificação conforme o uso final dos produtos.

REFERÊNCIAS

- ABIPLAST. **Perfil 2025**: as Indústrias de Transformação & Reciclagem de Plástico no Brasil. São Paulo: Associação Brasileira da Indústria do Plástico, 2025. Disponível em: [PERFIL_2025ABIPLAST_digital.pdf](https://www.abiplast.org.br/perfil-2025-abiplast-digital.pdf). Acesso em: 19 out. 2025.
- ADENIYI, A. G. *et al.* Production of synthetic fuels from high density polyethylene (HDPE) waste through pyrolysis: experimental and simulation approaches. **ANNALS of Faculty Engineering Hunedoara – International Journal of Engineering**, v. 3. p. 159 – 164, 2019.
- ALLA, M. M. G.; ALI, S. O. A. Simulation and design for process to convert plastic waste to liquid fuel using Aspen Hysys program. **Integrated Journal of Engineering Research and Technology**, v.1, n. 6, 2014.
- ALI, Z. *et al.*. Jet fuel produced from waste plastic with graphite as a catalyst. *Materials today: proceedings*. 2022. V. 52, Part 3. P- 716-723.
- AHAMED, A. *et al.* Environmental impact assessment of converting flexible packaging plastic waste to pyrolysis oil and multi-walled carbon nanotubes. **Journal of Hazardous Materials**, v. 390, 2019.
- ANDERSEN, M. **Process simulation of plastic waste to environmentally friendly fuel**. MSc. In Process Technology. University College of Southeast Norway. 2017.
- ASSOUMANI, N. *et al.* Numerical study of cylindrical tropical woods pyrolysis using Python Tool. **Sustainability**, v.13, n.24, 2021. Disponível em: [Sustainability | Free Full-Text | Numerical Study of Cylindrical Tropical Woods Pyrolysis Using Python Tool \(mdpi.com\)](https://www.mdpi.com/2076-3433/13/24/13242). Acesso em: 23 jul. 2024.
- ATLAS BRASILEIRO DA RECICLAGEM. **Reciclagem em números**. S.d. Disponível em: [Atlas da reciclagem](https://atlas.reciclagem.org.br/). Acesso em: 18 jan. 2025.
- AZEVEDO, J. L. A economia circular aplicada no Brasil: uma análise a partir dos instrumentos legais existentes para a logística reversa. *In: CONGRESSO NACIONAL EM EXCELÊNCIA EM GESTÃO*, 11., 2015, Niterói. **Anais [...]**. Niterói: Unilassale, 2015. Disponível em: (PDF) A ECONOMIA CIRCULAR APLICADA NO BRASIL: UMA ANÁLISE A PARTIR DOS INSTRUMENTOS LEGAIS EXISTENTES PARA A LOGÍSTICA REVERSA | Juliana Laboissiere de Azevedo - Academia.edu Acesso em: 06 out. 2023.
- BELDEN, E. R. *et al.* Machine Learning Predictions of Oil Yields Obtained by Plastic Pyrolysis and Application to Thermodynamic Analysis. **ACS Eng.**, v. 3, n. 2, p. 91-101, 2023. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acseengineeringau.2c00038>. Acesso em: 03 ago. 2024.
- BLAZSÓ, M. Pyrolysis for recycling waste composites. *In: Management, Recycling and Reuse of Waste Composites*. [s.l.]: Elsevier, 2010, p. 102-121. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9781845694623500054>. Acesso em: 29 dez. 2023.

BUEKENS, A. Introduction to feedstock recycling of plastics. *In*: SCHEIRS, J.; KAMINSKY, W. **Feedstock recycling and pyrolysis of waste plastics**. [S. l.]: John Wiley, 2006.

CHEN, W. *et al.* Fast co-pyrolysis of waste newspaper with high-density polyethylene for high yields of alcohols and hydrocarbons. **Waste Management**, v. 67, p. 155–162, 2017.

CONSENZA, J. P.; ANDRADE, E. M. D.; ASSUNÇÃO, G. M. D. Economia circular como alternativa para o crescimento sustentável brasileiro: análise da Política Nacional de Resíduos Sólidos. **Revista de Gestão Ambiental e Sustentabilidade**, [S. l.], v. 9, n. 1, p. e16147, 6 maio 2020. DOI: 10.5585/geas.v10i10.16147.

Disponível em:

[https://periodicos.uninove.br/index.php?journal=geas&page=article&op=view&path\[\]=16147](https://periodicos.uninove.br/index.php?journal=geas&page=article&op=view&path[]=16147). Acesso em: 17 nov. 2025.

DENG, N. *et al.* Simulation analysis of municipal solid waste pyrolysis and gasification based on Aspen plus. **Front. Energy**, v. 13, p. 64-70 2019.

DEVASAHAYAM, S. Deep learning models in Python for predicting hydrogen production: a comparative study. **Energy**, v. 280, 2023, Disponível em:

https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360544223014822?ssrnid=4376390&dgcid=SSRN_redirect_SD. Acesso em: 23 jul. 2024.

DEWANGAN, A. *et al.* Co-pyrolysis of sugarcane bagasse and low-density polyethylene: Influence of plastic on pyrolysis product yield. **Fuel**, v. 185. p. 508-516, 2016.

DING, Fei *et al.* Kinetic study of low-temperature conversion of plastic mixtures to value added products. **Journal of Analytical and Applied Pyrolysis**, [S. l.], v. 94, p. 83–90, mar. 2012. DOI: [10.1016/j.jaap.2011.11.013](https://doi.org/10.1016/j.jaap.2011.11.013).

BURRA, K. G.; GUPTA, A. K. Thermochemical reforming of wastes to renewable fuels. *In*: RUNCHAL, A. *et al.* **Energy for Propulsion**. (Green Energy and Technology). Singapore: Springer, 2018.

DUTTA, N.; GUPTA, A. An experimental study on conversion of high-density polyethylene and polypropylene to liquid fuel. **Clean Technologies and Environmental Policy**, v. 23, p. 2213–2220, 2021.

ELLIS, L. D. *et al.* Chemical and biological catalysis for plastics recycling and upcycling. **Nature Catalysis**, [S. l.], v. 4, n. 7, p. 539–556, 22 jul. 2021. DOI:

[10.1038/s41929-021-00648-4](https://doi.org/10.1038/s41929-021-00648-4). Disponível em: <https://www.nature.com/articles/s41929-021-00648-4>. Acesso em: 17 nov. 2025.

FERNANDES, G. NumPy e SciPy – Conhecendo duas bibliotecas do Python. 2024.

Disponível em: <https://www.meuguru.com/blog/numpy-e-scipy-conhecendo-duas-bibliotecas-do-python/>. Acesso em: 24 fev. 2025.

FIORELLI, F. C. C. **Pirólise de resíduos plásticos: revisão e perspectivas futuras**. 2020. 87f. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Química) - Universidade Federal Fluminense, Niterói, 2020.

FOSTER, A. *et al.* Economia circular e resíduos sólidos: uma revisão sistemática sobre a eficiência ambiental e econômica. *In: ENCONTRO INTERNACIONAL SOBRE GESTÃO EMPRESARIAL E MEIO AMBIENTE*, 18., 2016. **Anais [...]**. São Paulo: Engema, 2016. Disponível em: [115.pdf \(submissao.com.br\)](#) Acesso em: 06 out. 2023.

FUNDAÇÃO HEINRICH BÖLL STIFTUNG. **Atlas do Plástico: fatos e números sobre o mundo dos polímeros sintéticos**. Rio de Janeiro: Heinrich Böll Stiftung, 2020. Disponível em: [Atlas do Plástico - versão digital - 30 de novembro de 2020.pdf](#). Acesso em: 18 jan. 2025.

GRAND VIEW RESEARCH. **Plastic to Fuel Market (2024-2030)**. 2024. Disponível em: <https://www.grandviewresearch.com/industry-analysis/plastic-to-fuel-market>. Acesso em: 10 ago. 2025.

LI, N. *et al.* Conversion of plastic waste into fuels: a critical review. **Journal of Hazardous Materials**, v. 424, p. 127460, 2022

JOHANSSON, A. *et al.* Co-pyrolysis of woody biomass and plastic waste in both analytical and pilot scale. **Journal of Analytical and Applied Pyrolysis**, v.134 p. 102–113, 2018.

JUNG, H. *et al.* Review of polymer technologies for improving the recycling and upcycling efficiency of plastic waste. **Chemosphere**, [S. l.], v. 320, p. 138089, abr. 2023. DOI: [10.1016/j.chemosphere.2023.138089](https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2023.138089). Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0045653523003569>. Acesso em: 17 nov. 2025.

KABIR, M. J. *et al.* Pyrolysis of Municipal Green Waste: A Modelling, Simulation and Experimental Analysis. **Energies**, v. 8 – p. 7522-7541, 2015.

LEITÃO, A. Economia circular: uma nova filosofia de gestão para o séc. XXI. **Portuguese Journal of Finance, Management and Accounting**, v. 1, n. 2, p. 149-171, 2015.

LÓPEZ, A. P. *et al.* Economic and Environmental Assessment of Plastic Waste Pyrolysis Products and Biofuels as Substitutes for Fossil-Based Fuels. **Front. Energy Res.**, v. 9, 2021. Disponível em <https://www.frontiersin.org/journals/energy-research/articles/10.3389/fenrg.2021.676233/full>. Acesso em: 10 ago. 2025.

MARKET RESEARCH FUTURE. **Plastic Waste Pyrolysis Oil Market**, 2024. Disponível em: <https://www.marketresearchfuture.com/reports/plastic-waste-pyrolysis-oil-market-32479>. Acesso em: 10 ago. 2025.

MIRANDA, D. M V. de. **Reciclagem química avançada de poliolefinas pós-consumo via pirólise**. 2024. Tese (Doutorado em Engenharia Química) -

Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2024. Disponível em: https://portal.peq.coppe.ufrj.br/images/16_01_2024_DSc_Débora_Micheline_compressed.pdf. Acesso em: 2 dez. 2025.

MONTEIRO, A. D. **Contribuição da reciclagem química de resíduos plásticos para o desenvolvimento sustentável**. 2018. Tese (Doutorado) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2018.

NOVAES, R. **Python para Machine Learning: Um Guia Completo**. 2025. Disponível em: <https://www.dio.me/articles/python-para-machine-learning-um-guia-completo>. Acesso em: 24 fev. 2025.

OLAFASAKIN, O. *et al.* Machine learning reduced order model for cost and emission assessment of a pyrolysis system. **Energy Fuels**, v. 35, n. 12, p. 9950–9960, 2021. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.energyfuels.1c00490>. Acesso em: 23 jul. 2024.

OLIVEIRA, G. Visualização de dados com seaborn — Introdução à Ciência de Dados. 2021. Disponível em: <https://gcpeixoto.github.io/ICD/ipynb/16-visualizacao-dados-seaborn.html>. Acesso em: 24 de fev. 2025.

OLOFSSON, F. HALVARSSON, H. **Small scale energy conversion of plastic waste**: identification of gasification process parameters through modelling in Aspen Plus. School of Business, Society and Engineering. Degree Project in Industrial Engineering and management with Specialization in Energy Engineering/Degree Project in Energy Engineering. Malardalen University. Sweden. 2020.

OUZZANI, W. T. *et al.* Automotive plastic waste and olive pomace valorization using the pyrolysis process. **Energy Reports**, v. 8, p. 1577–1586, 2022.

OYEDUN, A. O. *et al.* Mixed-waste pyrolysis of biomass and plastics waste e A modelling approach to reduce energy usage. **Energy**, v. 75, p. 127–135, 2014.

RUMAIHI, A. *et al.* Investigation of co-pyrolysis blends of camel manure, date pits and plastic waste into value added products using Aspen Plus. **Fuel**, v. 340, 2023.

SCIPY, [scipy.integrate.odeint](https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.integrate.odeint.html). Disponível em: <https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.integrate.odeint.html>. Acesso em: 24 fev. 2025.

SELVAGANAPATHY, T. *et al.* Simulation of Waste Plastic Pyrolysis Process Using Aspen Hysys V9 Simulator under Steady State Operating Condition. **Emerging Trends in Engineering Research and Technology**, v. 2. p. 108-118, 2020.

SELVAGANAPATHY, T.; MUTHUVELAYUDHAM, R. An Experimental Investigation and Aspen HYSYS Simulation of Waste Polystyrene Catalytic Cracking Process for the Gasoline Fuel Production. Int. **Journal of Renewable Energy Development**, v. 10, p. 891-900, 2021.

SERRAS-MALILOS, A. *et al.* Composite waste recycling: Predictive simulation of the pyrolysis vapours and gases upgrading process in Aspen plus. **Chemosphere**, v. 300, 2022.

SHANDANGI, K. P.; MOHANTY, K. Co-pyrolysis of Karanja and Niger seeds with waste polystyrene to produce liquid fuel. **Fuel**, v. 153. P. 492-498, 2015.

SHARUDDIN, S. D.A. *et al.* A review on pyrolysis of plastic wastes. **Energy conversion and management**, v. 115, p. 308-326, 2016.

SILVA, T. G. E. *et al.* Economia circular: um panorama do estado da arte das políticas públicas no Brasil. **Revista Produção Online**, [S. l.], v. 21, n. 3, p. 951–972, 20 set. 2021. DOI: 10.14488/1676-1901.v21i3.4354. Disponível em: <https://producaoonline.org.br/rpo/article/view/4354>. Acesso em: 17 nov. 2025.

START&GO. Economia Circular. **Empreendedorismo Start&Go**, n. 20, p. 3-9, mar./abr. 2018. Disponível em: [startgo20.pdf \(startandgo.pt\)](#). Acesso em: 6 out. 2023.

TANGSRIWONG, K. *et al.* Modeling of chemical processes using commercial and open-source software: a comparison between Aspen Plus and DWSIM. **IOP Conference Series: Earth and Environmental Science**, v. 463, p. 012057, 2020. Disponível em: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1755-1315/463/1/012057/meta>. Acesso em: 2 dez. 2025.

TORRÊS FILHO, A. **Aplicação do processo de pirólise para valoração, cogeração de energia e tratamento de resíduos**. 2014. Tese (doutorado em saneamento, meio ambiente e recursos hídricos). Universidade Federal de Minas Gerais/Belo Horizonte, 2014.

URBAM. **Gestão Integrada e Gerenciamento de Resíduos Sólidos**. 2024. Disponível em: https://urbam.com.br/atuacao_residuos_solidos. Acesso em: 18 jan. 2025.

WANG, B. *et al.* Upcycling of thermosetting polymers into high-value materials. **Royal Society of Chemistry**, v. 10, p. 41-51, 2022.

WANG, S. *et al.*. A machine learning model to predict the pyrolytic kinetics of different types of feedstocks. *Energy Conversion and Management*, Volume 260, 2022. Disponível em: <[A machine learning model to predict the pyrolytic kinetics of different types of feedstocks - ScienceDirect](#)> Acesso em: 03 de Agosto de 2024.

XU, Z. *et al.* Chemical upcycling of polyethylene, polypropylene, and mixtures to high-value surfactants. **Science**, [s. l.], v. 381, n. 6658, p. 666–671, 2023. Disponível em: <https://www.science.org/doi/10.1126/science.adh0993>. Acesso em: 17 nov. 2025.

ZHANG, H. *et al.* Kinetics of the Low Temperature Conversion of Polypropylene to Polypropylene Wax. **Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects**, v. 37, n. 15, p. 1612-1619, 2015.

ZHAO, X. *et al.* Plastic waste upcycling toward a circular economy. **Chemical Engineering Journal**, [s. l.], v. 428, p. 131928, 2022. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1385894721035087>. Acesso em: 17 nov. 2025.

APÊNDICE A – CÓDIGO DA VALIDAÇÃO DO MODELO AGRUPADO DE 3 ESTÁGIOS

''''

''''

Created on Jun 23, 2024

@author: Amanda Arthuzo Corrêa

Modelo baseado em Arndersen, 2017

''''

#%%

import numpy as np

from scipy.integrate import odeint

import matplotlib.pyplot as plt

#%%

Constantes do Polimero para valores individuais, obtidas da 'Table 4-1 - Kinetic parameters for decomposition of polymers, pg 34'

Para o cálculo das frações, os dados foram obtidos de 'Table 4 - Kinetic parameters for some reaction pathways. Ding 2012

'''

$\ln(k) = \ln(A0) - Ea/R * (1/T)$

Thus the A_0 can be calculated taking the exponential of where the line crosses the y-axis, and

the slope is the activation energy (E_a) divided by the gas constant.

```
import numpy as np
```

```
# Se  $x = 1/T$  e  $y = \ln(k)$ :
```

```
x = np.array([x1, x2, x3, x4])
```

```
y = np.array([y1, y2, y3, y4])
```

```
# Calcule a média de x e y
```

```
x_mean = np.mean(x)
```

```
y_mean = np.mean(y)
```

```
# Calcule as diferenças
```

```
x_diff = x - x_mean
```

```
y_diff = y - y_mean
```

```
# Calcule o coeficiente angular (m)
```

```
m = np.sum(x_diff * y_diff) / np.sum(x_diff**2)
```

```
# Calcule o coeficiente linear (b)
```

```
b = y_mean - m * x_mean
```

```
print(f"O coeficiente angular é {m} e o coeficiente linear é {b}")
```

Table 3-1 - Rate constants HDPE (min-1) - Andersen2017

T;	k1;	k2;	k3;	k4;	k5
360;	0.0034;	0.0005;	0.0001;	0.0003;	0.0016
380;	0.01;	0.0016;	0.001;	0.0002;	0.0003
400;	0.0338;	0.0006;	0.002;	0.002	0.0041
420;	0.1248;	0.0131;	0.0089;	0.0147;	0.0094

'''

T_k = [360,380,400,420]

k_xp = [[0.0034,0.01,0.0338,0.1248],

[0.0005,0.0016,0.0006,0.0131],

[0.0001,0.001,0.002,0.0089],

[0.0003,0.0002,0.002,0.0147],

[0.0016,0.0003,0.0041,0.0094]]

R = 8.314 # Constante universal dos gases, J/(mol K)

Constantes do Polimero, obtidas da 'Table 4-1 - Kinetic parameters for decomposition of polymers, pg 34'

Ea_poly = 216.15E3 # J/mol

A0_poly = 2.53E15

Ea_PP = 158.62E3 # J/mol

A0_PP = 1.23E11

Ea_HDPE = 216.15E3 # J/mol

A0_HDPE = 2.53E15

Ea_MIX = 219.58E3 # J/mol

A0_MIX = 1.56E17

#%%

Definindo o sistema de EDOs incluindo

Os parametros iniciais estão representados por percentual %

Na versão final, realizar as conversões para massa e mol

As temperaturas estão convertidas para Kelvin, mas serão exibidas em °C

Condições iniciais

Per_XP = 100 # Percentual inicial de Polimero

Per_XH = 0

```
Per_XM = 0
```

```
Per_XL = 0
```

```
initial_temperature_celcius = 300
```

```
initial_temperature = initial_temperature_celcius + 273 # Temperatura inicial (K)
```

```
final_temperature_celcius = 400
```

```
final_temperature = final_temperature_celcius + 273 #Temperatura final (K)
```

```
taxa_de_aquecimento_celcius = 10 # °C/min
```

```
taxa_aquecimento = 50 # °C/min
```

```
tempo_de_aquecimento = final_temperature_celcius/taxa_aquecimento # Tempo em minutos no qual o reator sai de initial_temperature para final_temperature em com taxa_de_aquecimento_celcius
```

```
tempo_de_residencia = 0 #a ser considerado posteriormente
```

```
#%%
```

```
def arrhenius(A,Ea,R,T):
```

```
    return A*np.exp(-Ea/(R*T))
```

```
#%%
```

```
def ajuste_de_linha(kelvin, y):
```

```
    # Calculate slope and intercept
```

```
    x = [1/i for i in kelvin]
```

```
    y = np.log(y)
```

```

# Calcular os coeficientes da reta usando o método dos mínimos quadrados

A = np.vstack([x, np.ones(len(x))]).T

m, b = np.linalg.lstsq(A, y, rcond=None)[0]

return m, b

#%%

Ea_k = []

A0_k = []

T_Kelvin = [273+i for i in T_k]

for k in k_xp:

    m, b = ajuste_de_linha(T_Kelvin, k)

    Ea_k.append(abs(m*R))

    A0_k.append(np.exp(b))

print("Ea_k:", Ea_k)

print("A0_k:", A0_k)

#%%

def pyrolysis_model(y, t):

    XP, XH, XM, XL, delta_temperatura = y

    k1 = arrhenius(A0_k[0],Ea_k[0],R, delta_temperatura )

    k2 = arrhenius(A0_k[1],Ea_k[1],R, delta_temperatura )

```

```
k3 = arrhenius(A0_k[2],Ea_k[2],R, delta_temperatura )
```

```
k4 = arrhenius(A0_k[3],Ea_k[3],R, delta_temperatura )
```

```
k5 = arrhenius(A0_k[4],Ea_k[4],R, delta_temperatura )
```

```
# Taxa de variação da temperatura (exemplo de aquecimento linear)
```

```
dT_dt = taxa_aquecimento
```

```
# Taxas de variação das concentrações
```

```
dXP_dt = - XP * (k1 + k2 + k3)
```

```
dXH_dt = XP*k1 - XH*(k4 + k5)
```

```
dXM_dt = XP*k2 + XH*k4
```

```
dXL_dt = XP*k3 + XH*k5
```

```
return [dXP_dt,dXH_dt,dXM_dt,dXL_dt, dT_dt]
```

```
###
```

```
###
```

```
# Condições iniciais para o sistema de EDOs
```

```
y0 = [Per_XP, Per_XH, Per_XM, Per_XL, initial_temperature]
```

```
# Intervalo de tempo para a simulação

t = np.linspace(0, tempo_de_aquecimento,50) # Tempo de residência divididos em
500 pontos

#%%

# Resolvendo as EDOs

solution = odeint(pyrolysis_model, y0, t)

poly_concentration = solution[:, 0]

H_Concentration = solution[:, 1]

M_Concentration = solution[:, 2]

L_Concentration = solution[:, 3]

temperature = solution[:, 4]

#%%

# Plotando os resultados

plt.figure(figsize=(12, 8))

plt.subplot(2, 1, 1)

plt.plot(temperature-273, poly_concentration, label='Polímero Artigo',
color='blue',linestyle='--')
```

```

plt.plot(temperature-273, poly_concentration, label='Polímero Simulador', color='blue',
marker='s', linestyle='None')

plt.plot(temperature-273, H_Concentration, label='H Artigo', color='orange',linestyle='-
-')

plt.plot(temperature-273,      H_Concentration,      label='H      Simulador',
color='orange',marker='*',linestyle='None')

plt.plot(temperature-273, M_Concentration, label='M Artigo', color='green',linestyle='--
')

plt.plot(temperature-273,      M_Concentration,      label='M      Simulador',
color='green',marker='o',linestyle='None')

plt.plot(temperature-273, L_Concentration, label='L Artigo', color='red',linestyle='--')

plt.plot(temperature-273,      L_Concentration,      label='L      Simulador',
color='red',marker='D',linestyle='None')

plt.xlabel('Temperatura (°C)')

plt.ylabel('Percentual de Polímero, H, M, L (%)')

plt.title('Simulação da Pirólise - 3 Lump model ')

plt.legend()

plt.axis('tight')

plt.grid(True)

'''

plt.subplot(2, 1, 2)

plt.plot(t, temperature - 273, label='Temperatura', color='purple')

plt.xlabel('Tempo (min)')

plt.ylabel('Temperatura (°C)')

plt.title('Variação da Temperatura durante a Pirólise')

```

```
plt.legend()  
plt.grid(True)  
plt.tight_layout()  
"  
plt.show()  
  
# %%
```

APÊNDICE B – CÓDIGO DA VALIDAÇÃO DO MODELO AGRUPADO DE 6 ESTÁGIOS

Created on Jun 23, 2024

@author: Amanda Arthuzo Corrêa

Modelo baseado em Andersen, 2017

"""

#%%

import numpy as np

from scipy.integrate import odeint

import matplotlib.pyplot as plt

#%%

Constantes do Polimero para valores individuais, obtidas da 'Table 4-1 - Kinetic parameters for decomposition of polymers, pg 34'

Para o cálculo das frações, os dados foram obtidos de 'Table 4 - Kinetic parameters for some reaction pathways. Ding 2012

'''

$\ln(k) = \ln(A_0) - E_a/R * (1/T)$

Thus the A_0 can be calculated taking the exponential of where the line crosses the y-axis, and

the slope is the activation energy (E_a) divided by the gas constant.

```

import numpy as np

# Se  $x = 1/T$  e  $y = \ln(k)$ :
x = np.array([x1, x2, x3, x4])
y = np.array([y1, y2, y3, y4])

# Calcule a média de x e y
x_mean = np.mean(x)
y_mean = np.mean(y)

# Calcule as diferenças
x_diff = x - x_mean
y_diff = y - y_mean

# Calcule o coeficiente angular (m)
m = np.sum(x_diff * y_diff) / np.sum(x_diff**2)

# Calcule o coeficiente linear (b)
b = y_mean - m * x_mean

print(f"O coeficiente angular é {m} e o coeficiente linear é {b}")

```

Table 3-1 - Rate constants HDPE (min⁻¹) - Andersen2017

T; k1; k2; k3; k4; k5

360; 0.0034; 0.0005; 0.0001; 0.0003; 0.0016

380; 0.01; 0.0016; 0.001; 0.0002; 0.0003
 400; 0.0338; 0.0006; 0.002; 0.002 0.0041
 420; 0.1248; 0.0131; 0.0089; 0.0147; 0.0094

T_k = [360,380,400,420]

k_xp = [[0.0034,0.01,0.0338,0.1248],
 [0.0005,0.0016,0.0006,0.0131],
 [0.0001,0.001,0.002,0.0089],
 [0.0003,0.0002,0.002,0.0147],
 [0.0016,0.0003,0.0041,0.0094]]

'''

R = 8.314 # Constante universal dos gases, J/(mol K)

A0_k = [4.2E16,3.3E13,1.3E18,2.36E11,1.4572443,1.32E-64]

Ea_R = [-25810.6859,-22181.9896,-29441.7479,-19301.9116,-
 4230.9154,74873.1962]

Ea_k = x = [abs(i*R) for i in Ea_R]

Constantes do Polimero, obtidas da 'Table 4-1 - Kinetic parameters for
 decomposition of polymers, pg 34'

Ea_poly = 216.15E3 # J/mol

A0_poly = 2.53E15

Ea_poly = 158.62E3 # J/mol

A0_poly = 1.23E11

Ea_PP = 158.62E3 # J/mol

A0_PP = 1.23E11

Ea_HDPE = 216.15E3 # J/mol

A0_HDPE = 2.53E15

Ea_MIX = 219.58E3 # J/mol

A0_MIX = 1.56E17

#%%

Definindo o sistema de EDOs incluindo

Os parametros iniciais estão representados por percentual %

Na versão final, realizar as conversões para massa e mol

As temperaturas estão convertidas para Kelvin, mas serão exibidas em °C

Condições iniciais

Per_XP = 100 # Percentual inicial de Polimero

Per_XL = 0

Per_XW = 0

Per_XG = 0

initial_temperature_celcius = 300

```

initial_temperature = initial_temperature_celcius + 273 # Temperatura inicial (K)

final_temperature_celcius = 400

final_temperature = final_temperature_celcius + 273 #Temperatura final (K)

taxa_de_aquecimento_celcius = 10 # °C/min

taxa_aquecimento = 50 # °C/min

tempo_de_aquecimento = final_temperature_celcius/taxa_aquecimento # Tempo em
minutos no qual o reator sai de initial_temperature para final_temperature em com
taxa_de_aquecimento_celcius

tempo_de_residencia = 0 #a ser considerado posteriormente

#%%%

def arrhenius(A,Ea,R,T):

    return A*np.exp(-Ea/(R*T))

#%%%

def ajuste_de_linha(kelvin, y):

    # Calculate slope and intercept

    x = [1/i for i in kelvin]

    y = np.log(y)

    # Calcular os coeficientes da reta usando o método dos mínimos quadrados

    A = np.vstack([x, np.ones(len(x))]).T

    m, b = np.linalg.lstsq(A, y, rcond=None)[0]

```

```

    return m, b

#%%

# Ea_k = []

# A0_k = []

# T_Kelvin = [273+i for i in T_k]

# for k in k_xp:

#     m, b = ajuste_de_linha(T_Kelvin, k)

#     Ea_k.append(abs(m*R))

#     A0_k.append(np.exp(b))

# print("Ea_k:", Ea_k)

# print("A0_k:", A0_k)

#%%

def pyrolysis_model(y, t):

    XP, XL, XW, XG, delta_temperatura = y

    k1 = arrhenius(A0_k[0],Ea_k[0],R, delta_temperatura )
    k2 = arrhenius(A0_k[1],Ea_k[1],R, delta_temperatura )
    k3 = arrhenius(A0_k[2],Ea_k[2],R, delta_temperatura )
    k4 = arrhenius(A0_k[3],Ea_k[3],R, delta_temperatura )
    k5 = arrhenius(A0_k[4],Ea_k[4],R, delta_temperatura )
    k6 = arrhenius(A0_k[5],Ea_k[5],R, delta_temperatura )

    # Taxa de variação da temperatura (exemplo de aquecimento linear)

```

```

dT_dt = taxa_aquecimento

# Taxas de variação das concentrações
dXP_dt = - XP * (k1 + k2 + k3)
dXL_dt = XP*k2 + XW*k4 - XL*k6
dXW_dt = XP*k1 - XW*(k5 + k4) # Acho que é k4 no lugar de k6 ....
dXG_dt = XP*k3 + XL*k6 + XW*k5

return [dXP_dt,dXL_dt,dXW_dt,dXG_dt, dT_dt]

###

# Condições iniciais para o sistema de EDOs
y0 = [Per_XP, Per_XL, Per_XW, Per_XG, initial_temperature]

# Intervalo de tempo para a simulação
t = np.linspace(0, tempo_de_aquecimento,500) # Tempo de residência divididos em
500 pontos

###

# Resolvendo as EDOs
solution = odeint(pyrolysis_model, y0, t)

poly_concentration = solution[:, 0]
L_Concentration = solution[:, 1]
W_Concentration = solution[:, 2]
G_Concentration = solution[:, 3]

```

```
temperature = solution[:, 4]

#%%

# Plotando os resultados

plt.figure(figsize=(12, 8))

plt.subplot(2, 1, 1)

plt.plot(temperature-273, poly_concentration, label='Polímero', color='blue')
plt.plot(temperature-273, L_Concentration, label='L', color='green')
plt.plot(temperature-273, W_Concentration, label='W', color='orange')
plt.plot(temperature-273, G_Concentration, label='G', color='red')
plt.xlabel('Temperatura (°C)')
plt.ylabel('Percentual de Polímero, H, W, G (%)')
plt.title('Simulação da Pirólise - 3 Lump model ')
plt.legend()

plt.axis('tight')

plt.grid(True)

plt.subplot(2, 1, 2)

plt.plot(t, temperature - 273, label='Temperatura', color='purple')
plt.xlabel('Tempo (min)')
plt.ylabel('Temperatura (°C)')
plt.title('Variação da Temperatura durante a Pirólise')
plt.legend()
```

```
plt.grid(True)
```

```
plt.tight_layout()
```

```
plt.show()
```

APÊNDICE C – CÓDIGO DA VALIDAÇÃO DO MODELO AGRUPADO DE 3 ESTÁGIOS, ADAPTADO PARA A PIRÓLISE DE PEAD E A MISTURA DE PE E PP

''''

Created on Jan 18, 2025

@author: Amanda Arthuzo Corrêa

Modelo baseado em Arndersen, 2017

''''

#%%

import numpy as np

from scipy.integrate import odeint

import matplotlib.pyplot as plt

#%%

Constantes do Polimero para valores individuais, obtidas da 'Table 4-1 - Kinetic parameters for decomposition of polymers, pg 34'

Para o cálculo das frações, os dados foram obtidos de 'Table 4 - Kinetic parameters for some reaction pathways. Ding 2012

'''

$\ln(k) = \ln(A0) - Ea/R * (1/T)$

Thus the A_0 can be calculated taking the exponential of where the line crosses the y-axis, and

the slope is the activation energy (E_a) divided by the gas constant.

```
import numpy as np
```

```
# Se  $x = 1/T$  e  $y = \ln(k)$ :
```

```
x = np.array([x1, x2, x3, x4])
```

```
y = np.array([y1, y2, y3, y4])
```

```
# Calcule a média de x e y
```

```
x_mean = np.mean(x)
```

```
y_mean = np.mean(y)
```

```
# Calcule as diferenças
```

```
x_diff = x - x_mean
```

```
y_diff = y - y_mean
```

```
# Calcule o coeficiente angular (m)
```

```
m = np.sum(x_diff * y_diff) / np.sum(x_diff**2)
```

```
# Calcule o coeficiente linear (b)
```

```
b = y_mean - m * x_mean
```

```
print(f"O coeficiente angular é {m} e o coeficiente linear é {b}")
```

Table 3-1 - Rate constants HDPE (min-1) - Andersen2017

T;	k1;	k2;	k3;	k4;	k5
360;	0.0034;	0.0005;	0.0001;	0.0003;	0.0016
380;	0.01;	0.0016;	0.001;	0.0002;	0.0003
400;	0.0338;	0.0006;	0.002;	0.002	0.0041
420;	0.1248;	0.0131;	0.0089;	0.0147;	0.0094

'''

R = 8.314 # Constante universal dos gases, J/(mol K)

A0_k = [1.52E11, 6.6E16, 2.13E10, 58004738.4, 1.17E-15]

Ea_R = [-19493.03,-29267.11,-19302.08,-15019.97, 18313.18]

Ea_k = x = [abs(i*R) for i in Ea_R]

Constantes do Polimero, obtidas da 'Table 4-1 - Kinetic parameters for decomposition of polymers, pg 34'

Ea_poly = 219.58E3 # J/mol MIX PE e PP

A0_poly = 1.56E17

Ea_PP = 158.62E3 # J/mol

```
# A0_PP = 1.23E11
```

```
# Ea_HDPE = 216.15E3 # J/mol
```

```
# A0_HDPE = 2.53E15
```

```
# Ea_MIX = 219.58E3 # J/mol
```

```
# A0_MIX = 1.56E17
```

```
#%%
```

```
# Definindo o sistema de EDOs incluindo
```

```
# Os parametros iniciais estão representados por percentual %
```

```
# Na versão final, realizar as conversões para massa e mol
```

```
# As temperaturas estão convertidas para Kelvin, mas serão exibidas em °C
```

```
# Condições iniciais
```

```
Per_XP = 34200 # Massa inicial de Polimero - Mistura (kg)
```

```
Per_XH = 0
```

```
Per_XM = 0
```

```
Per_XL = 0
```

```
initial_temperature_celcius = 300
```

```
initial_temperature = initial_temperature_celcius + 273 # Temperatura inicial (K)
```

```
final_temperature_celcius = 400
```

```
final_temperature = final_temperature_celcius + 273 #Temperatura final (K)
```

```

taxa_de_aquecimento_celcius = 10 # °C/min

taxa_aquecimento = 0.5 # °C/min

tempo_de_aquecimento = final_temperature_celcius/taxa_aquecimento # Tempo em
minutos no qual o reator sai de initial_temperature para final_temperature em com
taxa_de_aquecimento_celcius

tempo_de_residencia = 0 #a ser considerado posteriormente

#%%

def arrhenius(A,Ea,R,T):

    return A*np.exp(-Ea/(R*T))

#%%

def ajuste_de_linha(kelvin, y):

    # Calculate slope and intercept

    x = [1/i for i in kelvin]

    y = np.log(y)

    # Calcular os coeficientes da reta usando o método dos mínimos quadrados

    A = np.vstack([x, np.ones(len(x))]).T

    m, b = np.linalg.lstsq(A, y, rcond=None)[0]

    return m, b

```

```

#%%%

def pyrolysis_model(y, t):

    XP, XH, XM, XL, delta_temperatura = y

    k1 = arrhenius(A0_k[0],Ea_k[0],R, delta_temperatura )
    k2 = arrhenius(A0_k[1],Ea_k[1],R, delta_temperatura )
    k3 = arrhenius(A0_k[2],Ea_k[2],R, delta_temperatura )
    k4 = arrhenius(A0_k[3],Ea_k[3],R, delta_temperatura )
    k5 = arrhenius(A0_k[4],Ea_k[4],R, delta_temperatura )

    # Taxa de variação da temperatura (exemplo de aquecimento linear)

    dT_dt = taxa_aquecimento

    # Taxas de variação das concentrações

    dXP_dt = - XP * (k1 + k2 + k3)
    dXH_dt = XP*k1 - XH*(k4 + k5)
    dXM_dt = XP*k2 + XH*k4
    dXL_dt = XP*k3 + XH*k5

    return [dXP_dt,dXH_dt,dXM_dt,dXL_dt, dT_dt]

```

```
###
```

```
###
```

```
# Condições iniciais para o sistema de EDOs
```

```
y0 = [Per_XP, Per_XH, Per_XM, Per_XL, initial_temperature]
```

```
# Intervalo de tempo para a simulação
```

```
t = np.linspace(0, tempo_de_aquecimento,50) # Tempo de residência divididos em  
500 pontos
```

```
###
```

```
# Resolvendo as EDOs
```

```
solution = odeint(pyrolysis_model, y0, t)
```

```
poly_concentration = solution[:, 0]
```

```
W_Concentration = solution[:, 1]
```

```
L_Concentration = solution[:, 2]
```

```
G_Concentration = solution[:, 3]
```

```
temperature = solution[:, 4]
```

```
###
```

```

# Plotando os resultados

plt.figure(figsize=(12, 8))

plt.subplot(2, 1, 1)

#plt.plot(temperature-273, poly_concentration, label='Polímero Artigo',
color='blue',linestyle='--')

plt.plot(temperature-273, poly_concentration, label='Mistura PE e PP Simulador',
color='blue', linestyle='--')

#plt.plot(temperature-273, H_Concentration, label='H Artigo',
color='orange',linestyle='--')

plt.plot(temperature-273, L_Concentration, label='L Simulador',
color='green',marker='o',linestyle='None')

plt.plot(temperature-273, W_Concentration, label='W Simulador',
color='orange',marker='o',linestyle='None')

#plt.plot(temperature-273, M_Concentration, label='M Artigo', color='green',linestyle='-
-')

#plt.plot(temperature-273, L_Concentration, label='L Artigo', color='red',linestyle='--')

plt.plot(temperature-273, G_Concentration, label='G Simulador',
color='red',marker='o',linestyle='None')

plt.xlabel('Temperatura (°C)')

plt.ylabel('Massa de Polímero, H, M, L (kg)')

plt.title('Simulação da Pirólise - 3 Lump model ')

plt.legend()

plt.axis('tight')

```

```

plt.grid(True)

plt.subplot(2, 1, 2)
plt.plot(t, temperature - 273, label='Temperatura', color='purple')
plt.xlabel('Tempo (min)')
plt.ylabel('Temperatura (°C)')
plt.title('Variação da Temperatura durante a Pirólise da mistura de PE e PP')
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.tight_layout()

plt.show()

# %%
matriz = np.array([temperature-273, poly_concentration, W_Concentration,
L_Concentration, G_Concentration])
#np.savetxt('matriz.csv', matriz.T, delimiter=';')

stable=np.where(np.abs(poly_concentration)<10E-13)

# %%
print(f'Concentração de Polímero no final do Processo =
{poly_concentration[stable[0][0]]} kg')
print(f'Concentração de W no final do Processo = {W_Concentration[stable[0][0]]} kg')
print(f'Concentração de G no final do Processo = {G_Concentration[stable[0][0]]} kg')
print(f'Concentração de L no final do Processo = {L_Concentration[stable[0][0]]} kg')

```