



AVALIAÇÃO DOS IMPACTOS AMBIENTAIS NO PROCESSO PRODUTIVO DE ACETONA VIA ISOPROPANOL ATRAVÉS DE SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

Área temática: Gestão Ambiental e Sustentabilidade

Patrick Vaz Mangili

patrickmangili@gmail.com

Diego Martinez Prata

pratadiego@gmail.com

Yuri Pacheco Dias March e Souza

yuri_march@hotmail.com

Pedro Henrique Gonçalves Souza

phgsouza@id.uff.br

Germannna Zoe Lima Botelho

germannna@petrobras.com.br

Resumo: *A mitigação dos impactos ambientais decorrentes das atividades industriais tem ganhado importância no cenário mundial. Desta forma, uma série de conceitos vinculados à sustentabilidade foi desenvolvida. Um destes conceitos, a ecoeficiência, é um objetivo comum das indústrias que visam sustentabilidade e está baseada na avaliação de ecoindicadores - uma métrica que relaciona uma variável ambiental e outra econômica. O objetivo deste trabalho é avaliar quantitativamente, por meio de ecoindicadores, as emissões de CO₂, a geração de efluentes, e os consumos de água e de energia para um processo de produção de acetona, via simulação computacional realizada no software UniSim®. Os resultados se mostraram úteis na avaliação da ecoeficiência do processo e possibilitam estudos futuros estudos de otimização, agregando valor ao processo.*

Palavras-chaves: *Acetona, Consumo de água, Consumo de energia, Emissão de CO₂, Simulação.*



1. INTRODUÇÃO

A partir do fim da 2ª Guerra Mundial, o mundo presenciou uma crescente alarmante nas emissões de CO₂, gás mais impactante em termos de efeito estufa. Apesar dos investimentos em energias limpas, o aumento das emissões globais de CO₂ entre 1950 e 2012 foi de aproximadamente 500%, atingindo a marca de 9,74 milhões de toneladas (Adams, 2013).

Diante deste cenário, discute-se incessantemente a atual situação climática e subsequentes acordos governamentais foram firmados, visando mitigar os impactos ambientais. Deste modo, conceitos relevantes foram concebidos. Um dos mais importantes é o de desenvolvimento sustentável, que representa a capacidade de suprir as necessidades da geração atual sem comprometer as das gerações futuras (WCED, 1987). Este conceito é abrangente, conectando-se com diversos fatores como, por exemplo, a emissão de gases de efeito estufa, geração de resíduos sólidos e efluentes líquidos, e consumos de energia, de água e de recursos naturais.

Face a este quadro, se tornou necessário o desenvolvimento de tecnologias que possibilitassem uma maior eficiência em relação ao consumo dos recursos naturais, qualidade do produto e impactos gerados, além do tradicional retorno financeiro. No relatório da ESCAP (2009) é ressaltada a importância da ecoeficiência como ferramenta para expressar o quão eficiente é uma atividade econômica em relação à exploração dos recursos naturais.

A ecoeficiência é competitividade na produção e colocação no mercado de bens ou serviços que satisfazem às necessidades humanas, melhorando a qualidade de vida, minimizando os impactos ambientais e a intensidade do uso de recursos naturais, sendo geralmente avaliada por ecoindicadores. Um ecoindicador é uma métrica representada de forma simples, pela razão entre uma variável ambiental e uma variável econômica (ESCAP, 2009). Métricas matematicamente mais complexas podem ser desenvolvidas (Callens e Tyteca, 1999).

Geralmente, a ecoeficiência não é claramente observada quando as avaliações são realizadas em um único ecoindicador e, portanto, torna-se necessária a avaliação de mais ecoindicadores, separadamente ou em conjunto.



Um dos principais objetivos dos ecoindicadores é melhorar a tomada de decisões, de modo que o monitoramento e a informação que eles trazem ajudem na diretriz de decisões econômica e ambientalmente seguras, além de permitir a avaliação dos impactos gerados. Essa avaliação pode ser utilizada ainda na fase de projeto de um novo processo, permitindo escolher rotas mais ecoeficientes, ou ainda realizar adaptações na tecnologia produtiva existente.

Diversos são os processos industriais cuja avaliação de sua ecoeficiência seja interessante. Os processos de produção de acetona, por exemplo, são particularmente interessantes pela demanda desse produto no mercado. Em algumas localidades, existem processos para sua recuperação após sua utilização, como por exemplo, na separação da mistura acetona-metanol proveniente da indústria farmacêutica (Luyben, 2008; Gil *et al.*, 2009; Youa *et al.*, 2014).

Dessa forma, esse trabalho visa desenvolver os ecoindicadores de consumo de água, de energia, geração de efluentes e emissões de CO₂ no processo de produção de acetona a partir da desidrogenação do isopropanol, via simulação computacional. Escolheu-se a planta proposta por Turton *et al.* (2012) por representar uma rota viável atualmente, que resulta em um produto de alta pureza e por não terem sido encontrados na literatura trabalhos sobre a avaliação de ecoeficiência desse importante processo, fato que motivou essa pesquisa.

Este trabalho está organizado em cinco seções, além desta introdução. A seção 2 revisa os processos de produção de acetona e ecoindicadores. A seção 3 apresenta a metodologia para desenvolver os ecoindicadores de consumo de água, energia, emissão de CO₂ e geração de efluentes. A seção 4 apresenta a planta de acetona em detalhes. A seção 5 apresenta os resultados para a simulação e os ecoindicadores. Finalmente, a seção 6 conclui o artigo.

2. REVISÃO DA LITERATURA

Esta seção apresenta a revisão da literatura sobre processos de produção de acetona e desenvolvimento de ecoindicadores para indústria, conforme descrito a seguir.

2.1. Produção de Acetona

A acetona (fórmula química C_3H_6O) é um líquido incolor, inflamável e de fácil evaporação. É miscível em água e tem peso molecular de 58,08 g/mol e ponto de ebulição de 56,14 °C (Weber *et al.*, 2014). É utilizada na indústria de cosméticos, hospitais e laboratórios e na indústria química, principalmente na reação com fenol para a fabricação do bisfenol-A e na produção de metacrilato de metila. Ademais, é também muito utilizada como solvente em diversas aplicações, como por exemplo, para extração de gorduras e óleos na indústria farmacêutica (ICIS, 2007).

As principais rotas de produção da acetona são: oxidação do cumeno, oxidação do propileno, oxidação do di-isopropil-benzeno, fermentação da biomassa e desidrogenação do álcool isopropílico (Weber *et al.*, 2014).

A rota do cumeno é atualmente a tecnologia mais utilizada (aproximadamente 90% da produção mundial), visto que apresenta menores custos em relação às demais rotas (ICIS, 2007). Entretanto, Wittcoff *et al.* (2004) explicaram que no passado houve um declínio na produção de acetona pois, para as indústrias, não era economicamente viável satisfazer a demanda desse produto ao mesmo tempo que se acumulasse fenol não vendável. Dessa forma, foi necessário desenvolver uma rota alternativa para produção de acetona, a qual pode ser obtida através da desidrogenação do isopropanol, conforme a Eq. (1) (Turton *et al.*, 2012):



A reação descrita na Eq. (1) é endotérmica, com calor padrão de reação de 62,9 kJ/mol, e ocorre na fase vapor, geralmente sobre um catalisador metálico ou óxido metálico (ICIS, 2007; Turton *et al.*, 2012).

Na década de 90, aproximadamente um terço da acetona produzida mundialmente era obtida através da desidrogenação do isopropanol (Chauvel e Lefebvre, 1989). Apesar de esta rota produtiva ter sido cada vez menos utilizada, ainda há algumas plantas que apresentam esse processo devido a sua maior vantagem perante a rota de cumeno: a acetona é obtida livre



de traços de compostos aromáticos. Por essa razão, essa tecnologia é favorável principalmente às indústrias farmacêuticas (Turton *et al.*, 2012).

Em termos comerciais, a acetona é principalmente utilizada na produção de metacrilato de metila (MMA), metil isobutil cetona (MIBK) e bisfenol A (BPA) (Witcoff *et al.*, 2004). Além disso, ICIS (2007) destacou que a demanda de acetona aumentaria em aproximadamente 4% ao ano, decorrente principalmente do crescimento do mercado deste produto na Ásia (5% ao ano) e nos Estados Unidos e Europa (2% ao ano).

No Brasil, as empresas Rodhia e a Quiminvest são as maiores produtoras de acetona, sendo a primeira líder no mercado latino-americano, com capacidade para fornecer 101 mil toneladas de acetona por ano (Juliboni, 2004).

2.2. Ecoindicadores

O emprego de indicadores de ecoeficiência é, geralmente, baseado na relação entre valor econômico do produto ou serviço e seus respectivos impactos ambientais. Os principais ecoindicadores são relacionados aos consumos de água, de energia e de matérias-primas, emissão de gases de efeito estufa e geração de efluentes e resíduos, estabelecendo a razão entre os impactos ambientais e o valor econômico do produto ou serviço (ESCAP, 2009).

Os ecoindicadores são úteis para indústrias e governos, melhorando a previsão do gasto energético industrial, estabelecendo bases realísticas para definição de objetivos e identificando setores e regiões onde há margem para melhorias (IEA, 2007). Com base no trabalho de Siitonen *et al.* (2010) e tomando a variável econômica como a produção, estes ecoindicadores podem ser definidos, como:

- Ecoindicador de Consumo Energético – Razão do total de energia consumida em um determinado período pela produção total equivalente (unidade GJ/t);
- Ecoindicador de Emissão de CO₂ – Razão do total de emissão de CO₂ em um determinado período pela produção total equivalente (unidade tCO₂/t);
- Ecoindicador de Consumo de Água – Razão do total de água consumida em um determinado período pela produção total equivalente (unidade m³H₂O/t);



- Ecoindicador de Geração de Efluente – Razão do total de efluente (água) descartado em um determinado período pela produção total equivalente (unidade $\text{m}^3\text{H}_2\text{O}/\text{t}$).

Como critério de avaliação, quanto menor for o valor destas relações melhor será o resultado e conseqüentemente a ecoeficiência do processo.

3. METODOLOGIA

Esta seção apresenta a metodologia para simulação e para determinação dos ecoindicadores de consumo de água, consumo de energia, emissão de CO_2 e geração de efluentes.

3.1. Metodologia de Simulação

A simulação da planta de acetona foi realizada no software UniSim[®] Design Suite R390, da Honeywell, em um Notebook Intel[®] Core™ i7 a 2,0 GHz com 8 GB de memória e 1TB de armazenamento, no sistema operacional Windows 8.1.

Para obtenção de dados coerentes, foram cautelosamente preenchidas as especificações para as correntes de entrada, os parâmetros cinéticos da reação, as dimensões e condições operacionais dos equipamentos e o modelo termodinâmico, conforme apresentado por Turton *et al.* (2012). Dessa forma, as especificações de saída da planta foram apropriadamente obtidas pela solução numérica (simulação) das equações MESH (*Mass, Equilibrium, Summation and Heat*) que representam o modelo fenomenológico rigoroso do processo.

3.2. Metodologia de Obtenção do Ecoindicador de Consumo Energético

O cálculo do ecoindicador de consumo energético é o mais simples, uma vez que para a determinação deste é necessário apenas contabilizar a demanda total de energia da planta simulada e dividir o resultado pela produção total equivalente, como discutido na seção 2.2.



3.3. Metodologia de Obtenção do Ecoindicador de Emissão de CO₂

Para determinar o ecoindicador de emissão de CO₂ é necessário contabilizar a demanda energética para cada equipamento da planta simulada. Em seguida, deve-se quantificar a emissão de CO₂ considerando-se o tipo de emissão para cada fonte em análise, de acordo com as diretrizes do *Intergovernmental Panel on Climate Change* (IPCC, 2006):

- Emissão por combustão – Proveniente da queima de combustíveis líquidos ou gasosos, para aquecimento direto ou para geração de vapor na caldeira;
- Emissão indireta - Proveniente de fonte externa vapor ou de energia elétrica;
- Emissão fugitiva - Proveniente de pequenos vazamentos (válvulas, flanges, etc.), de veículos de transporte de produtos e, principalmente, por alívio para *flare*.

No caso da planta em questão, apenas emissões por combustão e indireta foram consideradas, uma vez que não há corrente de alívio para *flare* e as emissões por vazamento e transporte são negligenciáveis. Assim, considerando as emissões indiretas e por combustão na caldeira, os valores de conversão utilizados nos cálculos são apresentados na Tabela 1.

Tabela 1 - Fatores de conversão para emissões indiretas de CO₂.

Dados de conversão/ propriedades	Valor	Referência
Conversão Energia Elétrica em CO ₂	0,1244 tCO ₂ /MWh*	MCT (2016)
Conversão de Energia em CO ₂ (base gás natural)	0,0561 tCO ₂ /GJ	IPCC (2006)

*0,03456 tCO₂/ GJ. (1 MWh=3,6 GJ).

O valor de 0,1244 tCO₂/MWh corresponde à média de emissão de CO₂ por geração de energia elétrica do Brasil para o ano de 2015, segundo o MCT (2016). Os ecoindicadores de emissão de CO₂ e, também, consumo de energia, foram determinados considerando que:

- As bombas e compressores operam com energia elétrica e eficiência de 40% - especificação operacional e valores apresentados por Turton *et al.* (2012);
- O forno H-1101 (Fig. 1 na seção 4) opera com eficiência térmica de 85%;
- Os refeedores das colunas de destilação operam com vapor de água gerado pela queima de gás natural na caldeira, que opera com eficiência de 80%.



3.4. Metodologia de Obtenção do Ecoindicador de Consumo de Água

Para o cálculo do ecoindicador de consumo de água devem-se considerar todas as correntes de água e vapor utilizadas, isto é, correntes de processo, água de resfriamento e vapor de aquecimento. Ademais, é preciso calcular a quantidade de água necessária para a geração de vapor de baixa pressão (LPS) e de alta pressão (HPS) provenientes da queima de gás natural na caldeira, a partir da Eq. 2.

$$E_{vapor} = m_{vapor} \cdot \Delta H_{vapor} = m_{água} \cdot (c_{págua} \cdot \Delta T_1 + L_{vapor} + c_{pvapor} \cdot \Delta T_2) \quad (2)$$

Na Eq. 2, E_{vapor} é a quantidade de energia por hora necessária para transformar a água em vapor pela queima de gás natural, considerando eficiência de 100%, em kJ/h; m_{vapor} e $m_{água}$ são as vazões mássicas de vapor e de água, em kg/h, respectivamente; ΔH_{vapor} é a entalpia do vapor d'água, em uma dada temperatura e pressão; L_{vap} é o calor latente de vaporização da água, em kJ/kg; $c_{págua}$ e c_{pvapor} são os calores específicos do vapor e da água, em kJ/kg°C, respectivamente, e ΔT_1 e ΔT_2 são as variações de temperatura na fase líquida e gasosa, respectivamente, em °C.

3.5. Metodologia de Obtenção do Ecoindicador de Geração de Efluentes

De acordo com a WBSCD (2000), o ecoindicador de geração de efluentes é um exemplo de aplicação que pode ser baseada em diferentes parâmetros de medição dependendo da tecnologia avaliada. Isto se deve, pois cada processo gera diferentes tipos de efluentes líquidos e/ou resíduos sólidos.

Considerando que, segundo a resolução CONAMA n° 430 (2011), efluente é caracterizado como despejo decorrente de uma atividade ou processo, o ecoindicador de geração de efluentes é determinado a partir da contabilização dos efluentes orgânicos e inorgânicos. No caso da planta em análise, apenas efluentes inorgânicos (água com traços de isopropanol) são considerados.



4. PLANTA DE ACETONA

A planta de produção de acetona estudada, ilustrada na Fig.1, foi proposta por Turton *et al.* (2012) e simulada, conforme fluxograma ilustrado na Fig. 2, no software UniSim[®] utilizando-se exatamente as mesmas especificações das correntes de entrada, dimensões e condições operacionais dos equipamentos e modelo termodinâmico (UNIQUAC VLE).

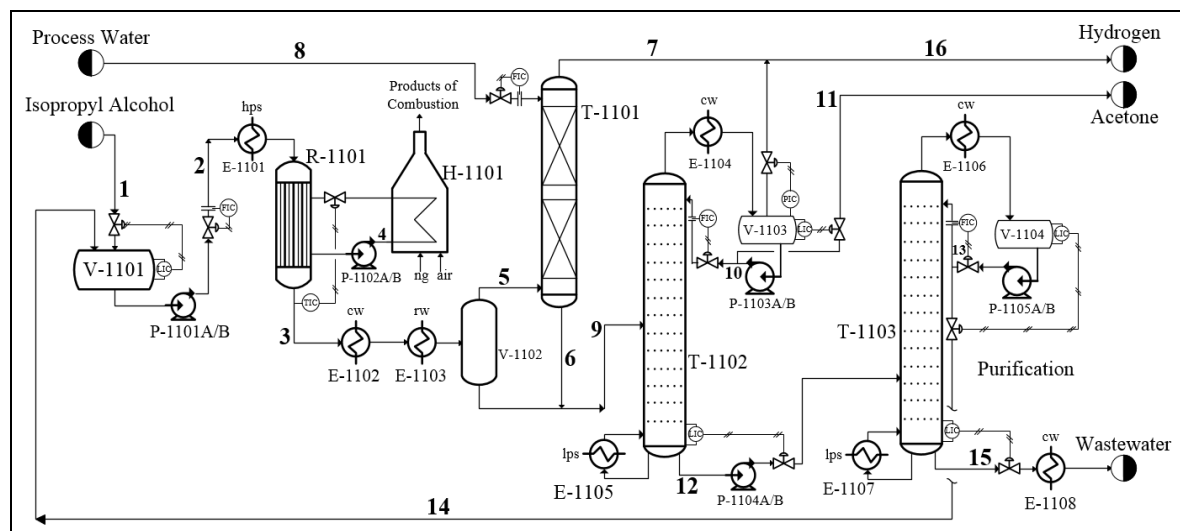


Figura 1 - Planta de produção de acetona apresentada por Turton *et al.* (2012).

Na Figura 1 cw, rw, hps e lps são utilidades e representam as quantidades de água de resfriamento, água refrigerada, vapor de alta e vapor de baixa pressão, respectivamente.

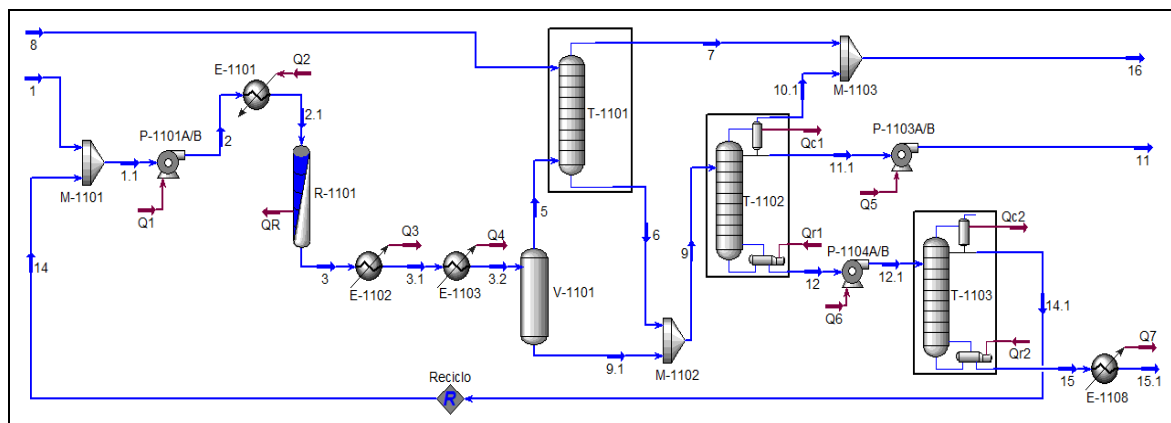


Figura 2 - Planta de produção de acetona simulada no UniSim[®].



4.1. Seção de alimentação

A alimentação (corrente 1), com vazão de 51,96 kmol/h, é composta por isopropanol (67 mol%) e água (33 mol%), a 101 kPa e 25°C. Essa corrente é misturada com a corrente de reciclo (corrente 14), com vazão de 5,88 kmol/h contendo isopropanol (40 mol%) e água 60 mol%) a 120 kPa e 85,5°C e é proveniente da coluna de água (T-1103). A mistura (corrente 1.1) é pressurizada pela bomba P-1101A/B de 101 kPa para 230 kPa e, em seguida, é vaporizada no aquecedor E-1101, tendo sua temperatura elevada de 30,3°C para 234°C antes de ser conduzida ao reator R-1101.

4.2. Seção de reação

A seção de reação consiste em um reator tubular (R-1101), que dispõe de 448 tubos de 2 polegadas de diâmetro cada e 6,1 m de comprimento. A fração de vazios do leito é 1. Os parâmetros da reação (com taxas em kmol/m³.s) estão dispostos na Tabela 2.

Tabela 2 – Parâmetros reacionais.

Reação	Parâmetros		
	E (kJ/kmol)	K (s ⁻¹)	Termos das concentrações (kmol/m ³)
$C_3H_8O \rightarrow C_3H_6O + H_2$	72380	351000	C_{Acetona}

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

4.3. Seção de separação

A corrente de produto do reator (corrente 3), com vazão de 92,55 kmol/h, contém 37,5 mol% de acetona e hidrogênio, 2,7 mol% de isopropanol e 22,3 mol% de água a 191 kPa e 350°C. Essa corrente é conduzida ao refrigerador E-1102, que opera com água, onde sua temperatura e pressão são reduzidas para 40°C e 177 kPa, respectivamente, e em seguida, levada ao refrigerador E-1103, que também opera com água, onde sua temperatura e pressão são reduzidas para 20°C e 163 kPa, respectivamente. Após esta etapa, o efluente é encaminhado ao vaso de *flash* (V-1101), onde a corrente resultante de vapor (corrente 5), com vazão de 39,86 kmol/h contendo 11,6 mol% de acetona, 87,0 mol% de hidrogênio, 1,2 mol%



de água e 0,2 mol% de isopropanol, é alimentada no último prato da coluna de absorção (T-1101). Essa coluna, de 0,33 m de diâmetro e 2,5 m de recheio, é também alimentada no primeiro prato por uma corrente de água tratada (corrente 8) com vazão de 20 kmol/h a 25°C e 200 kPa. O produto de topo (corrente 7), com vazão de 38,85 kmol/h, contém 89,3 mol% de hidrogênio, 3,6 mol% de água, 7,09 mol% de acetona e 0,01 mol% de isopropanol a 34,4°C e 150 kPa. O produto de fundo (corrente 6), com vazão de 21 kmol/h contendo 90,9 mol% água, 8,8 mol% acetona, 0,29% isopropanol e 0,01 mol% hidrogênio a 25,8°C e 163 kPa, é misturado com a corrente líquida (corrente 9.1) proveniente do vaso de *flash*. A mistura resultante (corrente 9), com vazão de 73,7 kmol/h a 21,3°C e 163 kPa, é conduzida à coluna de água (coluna de destilação T-1102).

A coluna T-1102 é composta por 66 pratos com separação de 1,5 pés entre si e diâmetro de 1,25 m, refeedor e condensador parcial. A razão de refluxo é de 2,3 e a alimentação ocorre no prato de número 33. O produto de topo (vapor), corrente 10.1, com vazão de 0,73 kmol/h, é misturado com a corrente 7. O destilado (corrente 11) tem vazão de 32,3 kmol/h e contém 99,8 mol% de acetona, 0,19 mol% de água e 0,01% de isopropanol a 60,2°C e 150 kPa. A corrente de fundo (corrente 12), com vazão de 40,7 kmol/h contendo água (94,3 mol%) e isopropanol (5,7 mol%) a 93,2°C e 140 kPa tem sua pressão elevada para 205,7 kPa pela bomba P-1104A/B e é conduzida à coluna de água (coluna de destilação T-1103).

A coluna T-1103 é dotada de 19 pratos com separação de 2 pés entre si e 1,36 m de diâmetro, refeedor e condensador total. A razão de refluxo é de 8,0 e a alimentação ocorre no prato de número 16. O produto de topo (destilado), corrente 14 é reciclado para a seção de alimentação, conforme previamente descrito. O produto de fundo (corrente 15), com vazão de 34,8 kmol/h contendo água (99,9995 mol%) e isopropanol (0,0005 mol%) a 109,3°C e 140 kPa tem sua temperatura e pressão reduzidas para 45°C e 120 kPa, respectivamente, e é conduzida para tratamento.



5. RESULTADOS

Esta seção apresenta os resultados da simulação e dos ecoindicadores de consumo de água, consumo de energia, emissão de CO₂ e geração de efluentes.

5.1. Simulação

Os principais resultados obtidos na simulação da planta de acetona são apresentados na Tabela 3.

Tabela 3 - Resultados da simulação.

	Corrente	Temperatura (°C)	Pressão (kPa)	Vazão (kmol/h)	Acetona	Isopropanol	H ₂ O	H ₂
1	Turton <i>et al.</i>	25,00	101	51,96	0,0000	0,6701	0,3299	0,0000
	UniSim®	25,00	101	51,96	0,0000	0,6701	0,3299	0,0000
2.1	Turton <i>et al.</i>	*	*	*	*	*	*	*
	UniSim®	234,00	216	57,84	0,0000	0,6425	0,3575	0,0000
3	Turton <i>et al.</i>	350,00	191	92,62	0,3772	0,0417	0,2056	0,3755
	UniSim®	350,00	191	92,55	0,3751	0,0265	0,2234	0,3750
5	Turton <i>et al.</i>	20,00	163	39,74	0,1117	0,0030	0,0101	0,8752
	UniSim®	20,00	163	39,86	0,1160	0,0018	0,0118	0,8704
6	Turton <i>et al.</i>	27,00	163	21,14	0,0913	0,0047	0,9040	0,0000
	UniSim®	25,78	163	21,01	0,0880	0,0030	0,9087	0,0003
7	Turton <i>et al.</i>	33,00	150	38,60	0,0650	0,0005	0,0334	0,9011
	UniSim®	34,41	150	38,85	0,0714	0,0001	0,0355	0,8930
9	Turton <i>et al.</i>	22,00	163	74,02	0,4381	0,0352	0,5267	0,0000
	UniSim®	21,33	163	73,70	0,4333	0,0332	0,5332	0,0003
11	Turton <i>et al.</i>	61,00	150	32,29	0,9994	0,0006	0,0000	0,0000
	UniSim®	60,26	150	32,29	0,9980	0,0001	0,0019	0,0000



12	Turton <i>et al.</i>	90,00	140	41,73	0,0038	0,0915	0,9047	0,0000
	UniSim®	93,17	140	40,69	0,0000	0,0575	0,9425	0,0000
14	Turton <i>et al.</i>	83,00	120	5,88	0,0272	0,6497	0,3231	0,0000
	UniSim®	85,53	120	5,88	0,0000	0,3984	0,6016	0,0000
15	Turton <i>et al.</i>	109,00	140	35,85	0,0000	0,0000	1,0000	0,0000
	UniSim®	109,30	140	34,81	0,0000	0,0001	0,9999	0,0000
16	Turton <i>et al.</i>	33,00	120	38,60	0,0650	0,0005	0,0335	0,9010
	UniSim®	35,50	120	39,57	0,0873	0,0002	0,0353	0,8772

*Valores não apresentados por Turton *et al.* (2012).

É possível observar algumas divergências nos resultados apresentados na Tabela 3, sendo a principal a ser destacada referente à composição da corrente de reciclo (corrente 14). Neste trabalho encontrou-se 39,84 mol% de isopropanol e 60,16 mol% de água, contra 64,97 mol% de isopropanol e 32,31% de água encontrados por Turton *et al.* (2012), o que levanta a hipótese de uma inversão dos dados pelos autores. Outras pequenas divergências também são encontradas, apesar do fato de que a simulação foi rigorosamente baseada nas mesmas especificações das correntes de alimentação (correntes 1 e 8), condições operacionais e reacionais e modelo termodinâmico. Como Turton *et al.* (2012) utilizaram o software CHEMCAD, da Chemstation, é possível que essas divergências sejam uma consequência da diferença entre os simuladores utilizados, que não necessariamente apresentam os mesmos parâmetros numéricos para convergência e dados termodinâmicos.

A produção desta unidade é determinada pela vazão mássica da corrente de destilado (corrente 11) da coluna T-1102, o que resulta em um valor de 1,838 t/h (conversão do software UniSim® para vazão molar de 32,29 kmol/h).

5.4. Ecoindicadores de Consumo Energético e Emissão de CO₂

A Tabela 4 apresenta os resultados de cada fonte energética envolvida nos processos de aquecimento e bombeamento, assim como a descrição destas fontes, obtidos neste trabalho.

Tabela 4 - Resultados para as fontes energéticas obtidos neste trabalho.



Fonte	Tipo de Emissão	Eficiência*	Energia (GJ/h)	Quantidade (tCO ₂ /h)
Bomba (P-1101A/B)	Indireta	40%	0,0017	0,00006
Aquecedor (E-1101)	Combustão	80%	4,4687	0,15444
Forno H-1101 (QR)	Combustão	85%	3,1541	0,17695
Refrervedor (Qr1)	Combustão	80%	4,5150	0,25329
Bomba (P-1103A/B)	Indireta	40%	0,0002	0,00001
Bomba (P-1104A/B)	Indireta	40%	0,0002	0,00001
Refrervedor (Qr2)	Combustão	80%	9,0813	0,50946
Total			21,2212	1,09422
Produção (t/h)			1,83800	1,83800
Ecoindicador de consumo energético (GJ/t)			11,5458	
Ecoindicador de emissão de CO₂ (tCO₂/t)				0,59533

*As energias das bombas e do compressor foram calculadas pelo UniSim[®], já considerando suas eficiências, o que não ocorre para os demais equipamentos apresentados. Portanto, para esses últimos, o consumo energético e a quantidade calculada de CO₂ emitida foram divididos pelas suas respectivas eficiências (ou eficiência da caldeira).

As porcentagens referentes a cada fonte de consumo de energia e emissão de CO₂ são apresentadas na Fig. 3.

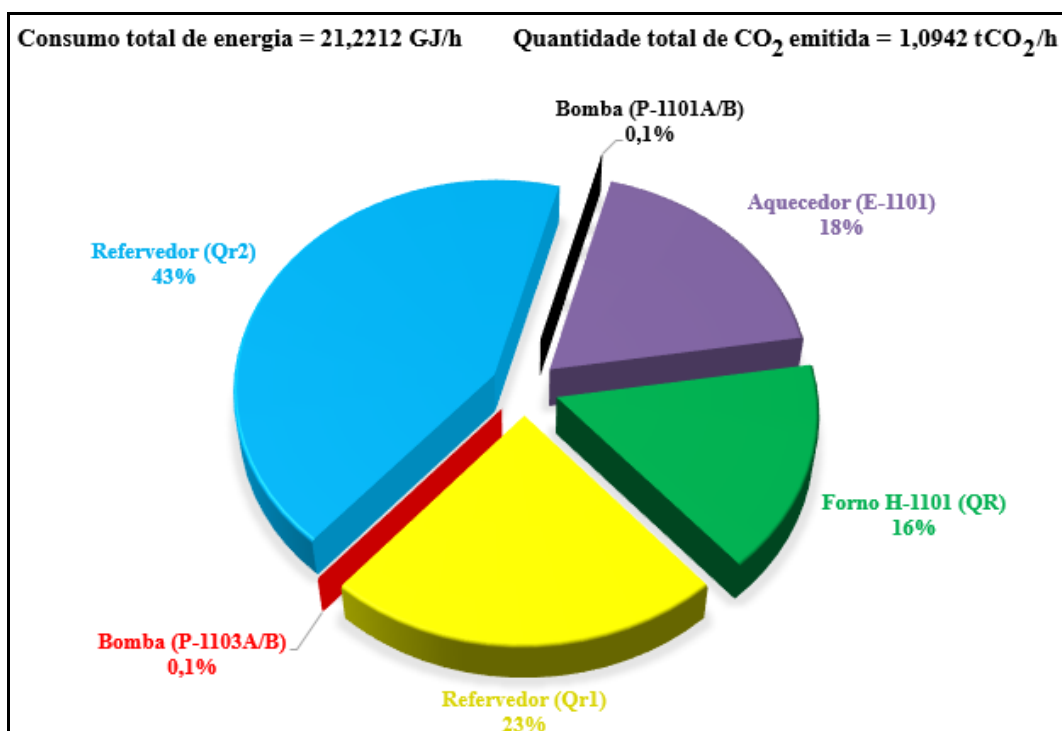


Figura 3 – Porcentagens referentes a cada fonte de consumo de energia e emissão de CO₂ analisada.

5.2. Ecoindicador de Consumo de Água

A quantidade de água necessária para obtenção de vapor (para o aquecedor e refervedores) pela queima do gás natural e para refrigeração nos resfriadores e condensadores foi determinada por simulação no software UniSim[®]. Considerou-se que a temperatura da água (capacidade calorífica 75 kJ/kmol·K) de utilidades, da água de refrigeração e da água desmineralizada para produção de vapor nas plantas é de 30°C (Turton *et al.*, 2012). Desta forma, para a Eq. 2, ΔT_1 corresponde à diferença entre 100°C e 30°C e ΔT_2 à diferença entre 200°C (temperatura de entrada de vapor) e 100°C.

Para calcular a quantidade de água necessária nos resfriadores e condensadores (E-1102, E-1103, E-1104, E-1106 e E-1108), foi preciso copiar os valores de suas energias (Q3, Q4, Qc1, Qc2 e Q7, respectivamente) fornecidos pelo software UniSim[®] e utilizá-los como energia na simulação de aquecedores hipotéticos de água. Para melhor entendimento, o procedimento para calcular a vazão de água no resfriador E-1102 será detalhado a seguir.

Primeiramente, foi necessário criar uma corrente de água (ilustrada na Fig. 4 como Água_1) e especificar sua temperatura (30°C), pressão (516 kPa) e composição (100 mol% de água). Essa corrente foi alimentada em um aquecedor hipotético (ilustrado na Fig. 4 como E-1102*), que corresponde ao resfriador E-1102. É importante verificar que o resfriador E-1102 comporta-se como aquecedor em relação à corrente de água, utilizada para resfriar a corrente 3 (ilustrada na Fig. 2). Em seguida, foi adicionada ao aquecedor E-1102* uma corrente de energia (corrente E1) de valor especificado igual a 3,187 GJ/h (exatamente o mesmo valor da energia Q3 (ilustrada na Fig. 2) e uma corrente de saída de água (corrente Água_2) de temperatura (45°C) e pressão (496 kPa) especificadas, conforme Turton *et al.* (2012).

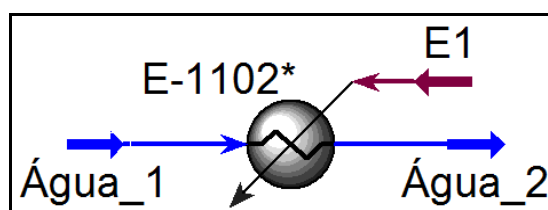


Figura 4 – Simulação para cálculo da vazão de água necessária no resfriador E-1102.

A partir da simulação ilustrada na Fig. 4, uma vazão de água circulante de 54,01 m³/h foi obtida para o refrigerador E-1102. De maneira análoga, o mesmo procedimento foi realizado para os condensadores e demais refrigeradores.

Para calcular a quantidade de vapor de alta pressão necessária no aquecedor E-1101 e vapor de baixa pressão nos refeedores (E-1105 e E-1107), um procedimento análogo ao dos refrigeradores foi realizado. A diferença, agora, corresponde às temperaturas e pressões de entrada do vapor e ao fato de que é necessária a simulação de refrigeradores hipotéticos. É importante ressaltar que, neste procedimento, as eficiências dos equipamentos (ou eficiência da caldeira) devem ser considerados. Segundo Seider *et al.* (2008) o vapor pode ser classificado em três categorias de acordo com as respectivas faixas de temperatura e pressão: vapor de alta pressão (*high pressure steam*), vapor de média pressão (*medium pressure steam*) e vapor de baixa pressão (*low pressure steam*). A Tabela 5 resume essas três classes de vapor.

Tabela 5 - Identificação e faixas de temperaturas e pressões das classes de vapor.

Vapor	Temperatura (°C)	Pressão (kPa)
Alta pressão (HPS)	231 – 254	2860 – 4238
Média pressão (MPS)	163 – 186	790 – 1135
Baixa pressão (LPS)	121 – 135	210 – 310

Fonte: Seider *et al.* (2008).

Segundo Turton *et al.* (2012), para a utilização do vapor como fonte de energia para aquecimento, deve-se considerar que:

- A temperatura de entrada do vapor nos aquecedores deve ser calculada com base na temperatura de saída do fluido a ser aquecido, a qual deve estar dentro da faixa da classe de vapor considerado, sendo utilizadas para o vapor os valores de temperatura e pressão mais elevados;
- Caso a temperatura do fluido não esteja dentro da faixa considerada, assume-se a classe de vapor de uma faixa de temperatura mais elevada;



- Considera-se, geralmente, que apenas troca de calor latente é utilizada. Assim, a corrente de vapor saturado sai do aquecedor como líquido saturado na temperatura adotada, de acordo com as diferentes classes de vapor (baixa, média e alta);
- A queda de pressão no equipamento é desprezível.

Desta forma, para o aquecedor E-1101, o vapor de entrada apresenta temperatura de 254°C e pressão de 4238 kPa (alta pressão) e o líquido saturado de saída apresenta temperatura de 253,7°C e pressão de 4238 kPa. Para os refervedores, o vapor de entrada se encontra a 135°C e 310 kPa (baixa pressão) e o líquido saturado sai a 134,7°C e 310 kPa.

Os resultados obtidos para as respectivas vazões de água são apresentados na Tabela 6.

Tabela 6 – Quantidade de água consumida.

Fonte	Quantidade (m³H₂O/h)
Corrente 8 (<i>makeup</i> de água)	0,36
HPS (E-1101)	2,62
CW (E-1102)	50,40
RW (E-1103)	8,95
CW (E-1104)	50,39
LPS (E-1105)	2,10
CW (E-1106)	114,30
LPS (E-1107)	4,21
CW (E-1108)	2,68
Consumo total de água	236,01
Produção (t/h)	1,84
Eco-indicador de água (m³H₂O/t)	128,27

Como estimativa, considerou-se que 1% do total de água consumida (equivalente a 2,3601 m³H₂O/h) corresponde principalmente às perdas na geração de vapor na caldeira, na coluna de resfriamento (por arraste, evaporação, vazamento, entre outros fatores) e na própria utilização no processo. As porcentagens referentes a cada fonte de consumo de água são apresentadas na Fig. 5.

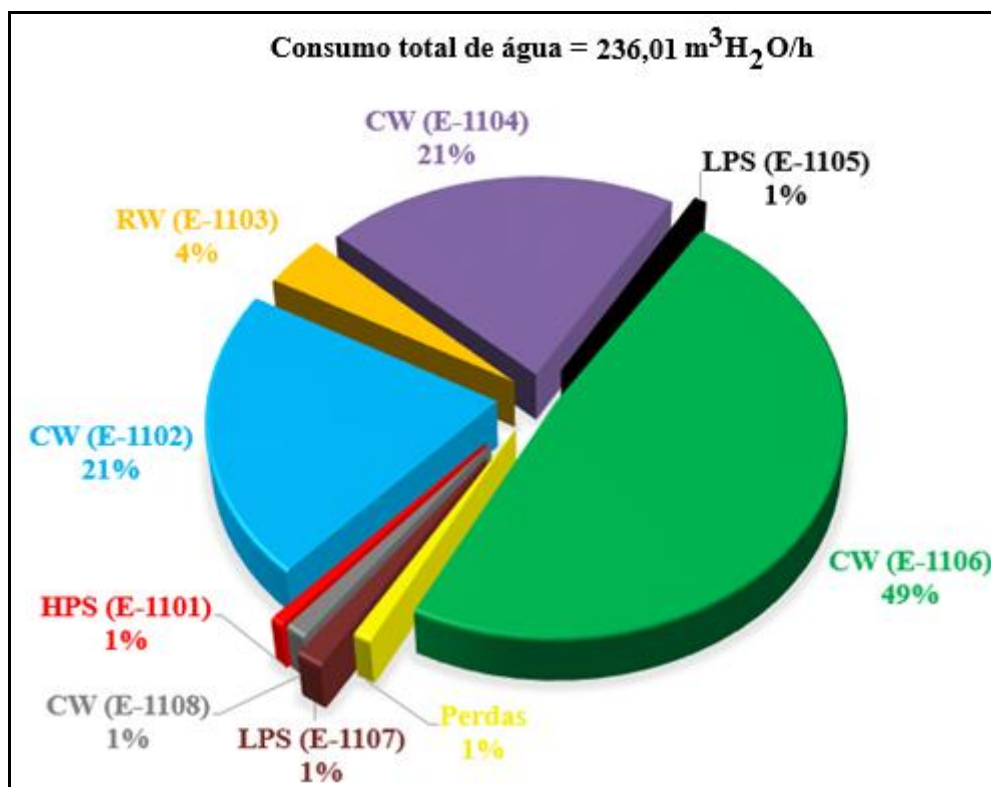


Figura 5 – Porcentagens referentes à cada fonte de consumo de água analisada.

5.3. Ecoindicador de Geração de Efluentes

A quantidade de efluente (água) despejada pela planta em análise foi determinada diretamente através da simulação no software UniSim[®]. A partir dos resultados apresentados na Tabela 3, verifica-se que a vazão de água descartada (corrente 15) é de 0,6284 m³/h (conversão do UniSim[®] para vazão molar de 34,81 kmol/h). Considerou-se, também, que 0,5% do total de água perdido na geração de vapor (2,3601m³H₂O/h) é coletado como água para descarte. Desta forma, o ecoindicador de geração de efluentes foi calculado e é apresentado na Tabela 7.

Tabela 7 – Quantidade de efluente (água) despejado.

Fonte	Quantidade (m ³ H ₂ O/h)
Corrente 15 (efluente líquido)	0,6284
Coletado das perdas de água	0,0118



Total	0,6402
Produção (t/h)	1,8400
Eco-indicador de água (m³H₂O/t)	0,3479

A partir dos resultados obtidos é possível, futuramente, desenvolver um estudo vinculado a uma possível integração energética da planta analisada, bem como avaliar os riscos (método HAZOP) e a viabilidade econômica do processo estudado.

6. CONCLUSÃO

Em comparação com os dados fornecidos por Turton *et al.* (2012), é possível afirmar que os resultados obtidos na simulação foram coerentes, uma vez que há apenas pequenas divergências entre os valores apresentados.

Além disso, foi possível quantificar o consumo de água e de energia, o total de efluente despejado e as emissões de CO₂ da planta de produção de acetona analisada, através da determinação dos respectivos ecoindicadores. A partir desta análise, pode-se observar que a planta apresenta um consumo total de água de 236,01 m³/h e de energia de 21,22 GJ/h, além de emitir 0,595 tCO₂ por tonelada de produção. Ademais, verifica-se que os refrigeradores E-1102, E-1104 e E-1106 são as principais fontes de consumo de água (equivalentes a 21%, 21% e 49% do total, respectivamente), enquanto os refeedores e aquecedores são as principais fontes de consumo energético. Foi possível observar, ainda, que o processo em questão gera 0,3479 m³ de efluente líquido (água com traços de isopropanol) por tonelada de produção.

Tendo em vista essa informação, é possível desenvolver um estudo vinculado a uma possível integração energética entre os equipamentos mencionados, a fim de reduzir não somente os impactos ambientais, como também os custos operacionais, aumentando a ecoeficiência da planta. Ademais, é possível, ainda, realizar um estudo comparativo entre duas (ou mais) plantas de produção de acetona a partir de diferentes rotas tecnológicas e avaliar, entre outros aspectos, a viabilidade técnico-econômica e os impactos ambientais decorrentes de cada uma.



Por fim, acredita-se que este trabalho apresente a utilidade dos conceitos de ecoindicadores de maneira prática e, com isso, contribua para o tema de sustentabilidade e meio ambiente com auxílio de simulação computacional.

REFERÊNCIAS

- ADAMS, E. E. **Fossil Fuel Use Pushes Carbon Dioxide Emissions into Dangerous Territory**. Earth Policy Institute. New Jersey, 23 jul. 2013. Disponível em: <http://www.earth-policy.org/indicators/C52/carbon_emissions_2013>. Acesso em: 14 abr. 2016.
- CALLENS, I., TYTECA, D. **Towards indicators of sustainable development for firms: A productive efficiency perspective**. Ecological Economics, v. 28, p. 41-53, 1999.
- CHAUVEL, A., MARSHALLEFEBVRE, G. **Petrochemical Processes: Technical and Economic Characteristics**. Paris, França: Editions Technip, 1989. 405 p. ISBN-13: 978-2710805632.
- ECONOMIC AND SOCIAL COMMISSION FOR ASIA AND PACIFIC. ESCAP. **Eco-efficiency Indicators: Measuring Resource-use efficiency and the Impact of Economic Activities on the Environment**. Bangkok: United Nations, 2009. Disponível em: <<https://sustainabledevelopment.un.org/content/documents/785eco.pdf>>. Acesso em: 14 abr. 2016.
- GIL, I. D., BOTÍA, D.C., ORTIZ, P., SÁNCHEZ, O. F. **Extractive Distillation of Acetone/Methanol Mixture Using Water as Entrainer**. Ind. Eng. Chem. Res., v. 48, pp 4858–4865, 2009.

ICIS. **Acetone Production and Manufacturing Process**. Houston: ICIS, 2007. Disponível em: <<http://www.icis.com/resources/news/2007/11/01/9074860/acetone-production-and-manufacturing-process/>>. Acesso em: 12 abr. 2016.

ICIS. **Acetone Uses and Market Data**. Houston: ICIS, 2007. Disponível em: <<http://www.icis.com/resources/news/2007/11/01/9074858/acetone-uses-and-market-data/>>. Acesso em: 12 abr. 2016.

INTERGOVERNMENTAL PANEL ON CLIMATE CHANGE. IPCC. **Guidelines for National Greenhouse Gas Inventories**, v. 1. Hayama: Institute for Global Environmental Strategies (IGES), 2006. Disponível em: <<http://www.ipcc-nggip.iges.or.jp/public/2006gl/vol1.html>>. Acesso em: 16 abr. 2016.

INTERNATIONAL ENERGY AGENCY. IEA. **Tracking Industrial Energy Efficiency and CO₂ Emissions**. Paris: IEA, 2007. Disponível em: <https://www.iea.org/publications/freepublications/publication/tracking_emissions.pdf>. Acesso em: 16 abr. 2016.

JULIBONI, M. **Rhodia investe US\$ 10 milhões na ampliação da planta de Paulínia**. Editora Abril S.A.: Revista EXAME, 2004. Disponível em: <<http://exame.abril.com.br/negocios/noticias/rhodia-investe-us-10-milhoes-na-ampliacao-da-planta-de-paulinia-m0068885>>. Acesso em: 24 abr. 2016.

LUYBEN, W. L. **Comparison of Extractive Distillation and Pressure-Swing Distillation for Acetone-Methanol Separation**. Industrial and Engineering Chemistry Research, 47, 2696–2707, 2008.

MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA. MCT. **Fator de Emissão de CO₂ pela geração de energia elétrica no Sistema Interligado Nacional (SIN)**. MCT, 2016. Disponível em: <<http://www.mct.gov.br/index.php/content/view/321144.html#ancora>>. Acesso em: 24 abr. 2016.



MINISTÉRIO DO MEIO AMBIENTE. **Resolução CONAMA, nº 430** – Dispõe sobre as condições e padrões de lançamento de efluentes. Brasília, 2011.

SEIDER, W. D., SEADER, J. D., LEWIN, D. R., WIDAGDO, S. **Product and Process Design Principles**. 3. ed. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, Inc., 2008. 768 p. ISBN-13 978-0470048955.

SIITONEN, S.; TUOMAALA, M.; AHTILA, P. **Variables affecting energy efficiency and CO₂ emissions in the steel industry**. Energy Policy, v. 38, 2477–2485, 2010.

TURTON, R., BAILIE, R. C., WHITING, W. B., SHAEIWITZ, J. A., BHATTACHARYVA, D. **Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Process**. 4. ed. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall, 2012. 1088 p. ISBN-13 978-0-13-261812-0.

WITCOFF, H. A., REUBEN, B. G., PLOTKIN, J. S. **Industrial Organic Chemicals**. 3. ed. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, Inc., 2012. 848 p. ISBN 978-0-470-53743-5.

WORLD BUSINESS COUNCIL FOR SUSTAINABLE DEVELOPMENT. WBCSD. **Measuring Eco-Efficiency: A guide to reporting company performance**. WBCSD, 2000. Disponível em: <http://oldwww.wbcsd.org/web/publications/measuring_eco_efficiency.pdf>. Acesso em: 27 abr. 2016.

WORLD COMMISSION ON ENVIRONMENT AND DEVELOPMENT. WCED. **Report of the World Commission on Environment and Development: Our Common Future**. WCED, 1987. Disponível em: <<http://www.un-documents.net/our-common-future.pdf>>. Acesso em 24 abr. 2016.

YOUA, X., RODRIGUEZ-DONISA, I., GERBAUDA, V. **Extractive Distillation Process Optimisation of the 1.0-1a Class System, Acetone - methanol with Water**. Computer Aided Chemical Engineering, v.33, 1315–1320, 2014.