



## **AVALIAÇÃO DAS EMISSÕES DE CO<sub>2</sub> NO PROCESSO PRODUTIVO DE ANDRIDO MALEICO VIA N-BUTANO UTILIZANDO SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL**

Área temática: Gestão Ambiental e Sustentabilidade

**Patrick Vaz Mangili**  
[patrickmangili@gmail.com](mailto:patrickmangili@gmail.com)

**Yuri Pacheco Dias March e Souza**  
[yuri\\_march@hotmail.com](mailto:yuri_march@hotmail.com)

**Raquel de Freitas Dias**  
[raquelfreitasdias@gmail.com](mailto:raquelfreitasdias@gmail.com)

**Simone Augusto Silva**  
[simone.silva@iff.edu.br](mailto:simone.silva@iff.edu.br)

**Diego Martinez Prata**  
[pratadiego@gmail.com](mailto:pratadiego@gmail.com)

***Resumo:** Um novo objetivo comum das empresas que almejam sustentabilidade é a ecoeficiência, geralmente baseada na avaliação de ecoindicadores. Os ecoindicadores, caracterizados pela relação entre uma variável ambiental e outra econômica, são úteis para a avaliação conjunta do desempenho econômico e dos impactos ambientais decorrentes de atividades industriais e, por isso, são importantes ferramentas em processos de tomada de decisão e melhorias. Este trabalho visa avaliar quantitativamente as emissões de CO<sub>2</sub>, por meio de ecoindicador, para uma planta de produção de anidrido maleico via n-butano com auxílio de simulação computacional. O resultado encontrado foi de 2,474 kgCO<sub>2</sub>/kg. Desta forma, é possível monitorar e reduzir as emissões de CO<sub>2</sub> propondo-se melhorias futuras para novos projetos ou para plantas já existentes, agregando valor ao produto e ao processo.*

***Palavras-chaves:** Anidrido Maleico, n-Butano, Ecoindicadores, Emissão de CO<sub>2</sub>, Simulação.*

## 1. INTRODUÇÃO

O aumento da demanda por produtos e serviços tem gerado preocupação crescente quanto à utilização dos recursos naturais. Tal preocupação está diretamente relacionada aos impactos ambientais decorrentes de diferentes fatores: a possível escassez dos recursos naturais, emissão descontrolada de gases de efeito estufa, consumo excessivo de água e de energia, geração de efluentes (líquidos e/ou resíduos sólidos), entre outros.

Diante desse cenário, surgiu a necessidade, por parte das indústrias, de desenvolver estudos vinculados ao desempenho econômico e ambiental de suas atividades, a fim de mitigar os consequentes impactos ambientais. O desafio passou a ser, então, compartilhar e expandir a conscientização entre as empresas e sociedades. Neste sentido, diversos acordos governamentais foram desenvolvidos a fim de implementar a cooperação mútua entre os agentes governamentais e as indústrias e organizações comprometidas com o desenvolvimento sustentável (WBCSD, 2016).

Tendo em vista a importância da conscientização ambiental e do aumento do desempenho ecológico, as empresas desenvolveram conceitos fundamentais na avaliação econômica e ambiental de suas atividades. Um desses conceitos é a ecoeficiência, baseada em métricas de avaliação e identificação de impactos ambientais decorrentes de operações industriais, os ecoindicadores. Segundo a UNCTAD (2004), os ecoindicadores representam a razão entre uma variável ambiental (consumo de água e de energia, geração de efluentes, emissão de CO<sub>2</sub>, entre outras) e uma variável econômica (receita ou produção). Desta forma, são importantes ferramentas na avaliação do retorno financeiro de atividades sustentáveis e em processos de tomada de decisão (ESCAP, 2009).

A partir de uma detalhada análise qualitativa dos ecoindicadores é possível analisar possíveis modificações e adaptações em processos existentes (ou em fase de projeto), bem como monitorar o desempenho do processo com base nos resultados obtidos. Algumas das possibilidades de realizar avaliações técnico-econômicas de projetos são: análise de dados reais (produção, receita, impactos ambientais, entre outros), consultoria da equipe de projetos e simulação computacional, sendo esta última amplamente utilizada pelas indústrias devido aos seus custos reduzidos e possibilidade de estudos eficientes de otimização e adaptação de processos.

Neste trabalho, o conceito de ecoindicador foi utilizado na avaliação quantitativa das emissões de CO<sub>2</sub> de um processo de produção de anidrido maleico (MAN) via oxidação do n-butano, com auxílio de simulação computacional. Tal processo foi escolhido por representar a rota de produção de MAN mais utilizada atualmente e por não apresentar avaliação de emissões de CO<sub>2</sub>.

Este trabalho está organizado em cinco seções, além desta introdução. A seção 2 revisa os processos e trabalhos sobre plantas de anidrido maleico e ecoindicadores para indústria. A seção 3 apresenta a metodologia para desenvolver o ecoindicador de emissão de CO<sub>2</sub>. A seção 4 apresenta a planta de anidrido maleico em detalhes. A seção 5 apresenta os resultados para a simulação e o ecoindicador. Finalmente, a seção 6 conclui o artigo.

## 2. REVISÃO DA LITERATURA

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

### 2.1. Produção de Anidrido Maleico

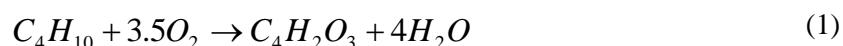
O anidrido maleico (fórmula química C<sub>4</sub>H<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) pode ser obtido através de diferentes rotas tecnológicas: oxidação de benzeno (C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>), oxidação de butenos e oxidação de n-butano (C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>), sendo esta última a mais utilizada mundialmente. Isto é explicado pelo menor custo do n-butano em relação ao benzeno, bem como a relação desse último a problemas toxicológicos (Rase, 2000; Grassian, 2005). Centi *et al.* (2001) explicaram que, além das razões apresentadas, na oxidação no benzeno há perda de dois átomos de carbono, o que resulta em uma redução do rendimento mássico e a reação forma subprodutos pesados, como por exemplo, o anidrido ftálico e a benzoquinona, enquanto a oxidação do n-butano forma subprodutos relativamente mais limpos, como por exemplo, os ácidos acético, acrílico e fórmico.

Além das vantagens e desvantagens de cada rota tecnológica, os processos de produção de anidrido maleico apresentam diferenças operacionais relevantes (até mesmo quando dois processos similares são comparados). Algumas dessas diferenças são: tipo de reator (leito fixo, leito fluidizado ou leito móvel), tipo de recuperação do MAN (aquosa ou

orgânica), método de purificação do MAN (destilação azeotrópica ou evaporação de camada fina), composição da fase gasosa, preparação e ativação do catalisador, entre outras (Baerns, 2004).

O mercado de MAN é amplo, pois este composto é um importante intermediário de diversos polímeros, resinas e solventes, como por exemplo, poliuretanos, tetrahidrofurano, polibutileno tereftalatos (PBT) e pirrolidonas (Lerou e Mills, 1993). Além disso, em regiões como a Europa Central, e em mercados emergentes América Latina e Ásia, a demanda de MAN tem crescido acentuadamente (ICIS, 2007).

A produção de MAN a partir da oxidação de n-butano utiliza geralmente uma mistura de vanádio e fósforo como catalisador e ocorre de acordo com a Eq. (1) (Baerns, 2004):



Devido ao caráter extremamente explosivo e inflamável do n-butano em mistura com oxigênio, sua concentração deve ser rigorosamente controlada, a fim de se evitar acidentes. Por exemplo, a 25°C o limite de inflamabilidade do n-butano é 1,8% e a 400°C este limite é 1,8%, sendo exigido que a concentração deste composto seja mantida entre 1,4% e 1,6% por questões de segurança (Baerns, 2004; Frank, 1975). Ademais, é também requerido um elevado grau de pureza do oxigênio, sendo recomendada uma pureza de 99,5%. Concentrações muito inferiores a esta acarretam em perda excessiva de n-butano não reagido, acarretando em menor qualidade de produto (Baerns, 2004; Centi *et al.*, 2001; Frank, 1975).

Outro fator importante a ser analisado é a conversão de n-butano. A fim de se obter a maior seletividade para o anidrido maleico, é preferível que a conversão do n-butano seja mantida em torno de 80%, resultando em uma seletividade de aproximadamente 65% para o MAN (Baerns, 2004; Frank, 1975).

## 2.2. Ecoindicadores

A ecoeficiência, geralmente avaliada por meio do desenvolvimento de diversos tipos de ecoindicadores, está relacionada à capacidade de realização de operações industriais que visam satisfazer as necessidades humanas em paralelo à preservação ambiental, reduzindo a

utilizações de recursos e os impactos ambientais. Assim, a ecoeficiência está diretamente relacionada ao desenvolvimento sustentável (Aall e Husabø, 2010; WBCSD, 2000).

A utilização de ecoindicadores baseia-se no desenvolvimento de uma relação direta entre valor econômico do produto ou serviço e os impactos ambientais decorrentes da respectiva atividade produtiva. Comumente, os ecoindicadores são relacionados ao consumo de água, energia e matérias-primas, emissão de gases de efeito estufa e demais gases poluentes e geração de efluentes líquidos e resíduos sólidos (ESCAP, 2009).

Os indicadores de ecoeficiência são cada vez mais utilizados por indústrias e governos, sendo úteis na previsão e melhoria dos impactos causados, estabelecendo parâmetros realísticos para definição de objetivos e identificando setores e regiões onde há margem para avanços (IEA, 2007). Particularmente, em relação às emissões de CO<sub>2</sub>, o ecoindicador pode ser definido da seguinte forma:

- Ecoindicador de Emissão de CO<sub>2</sub> – Razão do total de emissão de CO<sub>2</sub> em um determinado período pela produção total equivalente (unidade kgCO<sub>2</sub>/kg). Como critério de avaliação, quanto menor o resultado, melhor a ecoeficiência do processo.

### **3. METODOLOGIA**

Esta seção apresenta a metodologia para simulação e para determinação do indicador de emissão de CO<sub>2</sub>.

#### **3.1. Metodologia de Simulação**

O preenchimento correto das especificações fornecidas para a planta apresentada por Frank (1975) é de suma importância, pois, desta forma, é possível avaliar os resultados de maneira coerente. Entretanto, alguns dados não foram apresentados pela planta de referência, o que pode causar um desvio relativamente mais significativo dos resultados obtidos.

Portanto, é necessário especificar, de maneira rigorosamente idêntica, as correntes de alimentação (vazões, composições, temperaturas e pressões), os parâmetros reacionais (estequiometria, cinética e catalisador), as dimensões e eficiências dos equipamentos, as condições operacionais e o modelo termodinâmico. Assim, através do modelo matemático

fenomenológico a simulação computacional fornecerá as variáveis dependentes de saída da planta (vazões de saída dos equipamentos, suas composições, temperaturas e pressões).

Como base para a simulação da planta de produção de anidrido maleico via n-butano, foi utilizado neste trabalho o software UniSim<sup>®</sup> Design Suite R390, da Honeywell. A simulação foi realizada em um Notebook Intel<sup>®</sup> Core™ i7 a 2,0 GHz com 8 GB de memória e 1TB de armazenamento, no sistema operacional Windows 8.1.

### 3.2. Metodologia de Obtenção do Ecoindicador de CO<sub>2</sub>

A avaliação da emissão de CO<sub>2</sub> é realizada a partir de diferentes fontes emissoras, baseando-se nas diretrizes do *Intergovernmental Panel on Climate Change* - IPCC (IPCC, 2006). Portanto, no caso da planta em análise as fontes emissoras consideradas foram:

- 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 (concessionária).
- Emissão fugitiva - Proveniente de pequenos vazamentos (válvulas, flanges, etc.), de veículos de transporte de produtos e, principalmente, por alívio para *flare*.

Os fatores de conversão para emissões indiretas de CO<sub>2</sub> utilizados nos cálculos são apresentados na Tabela 1.

**Tabela 1** - Fatores de conversão para emissões indiretas de CO<sub>2</sub>.

Dados de conversão/ propriedades	Valor	Referência
Conversão Energia Elétrica em CO <sub>2</sub>	0,1244 kgCO <sub>2</sub> /kWh	MCT (2016)
Conversão de Energia em CO <sub>2</sub> (base gás natural)	0,0561 kgCO <sub>2</sub> /MJ*	IPCC (2006)

\*0,20196 kgCO<sub>2</sub>/kWh. (1 kWh=3,6 MJ).

O valor de 0,1244 tCO<sub>2</sub>/MWh representa a média de emissão de CO<sub>2</sub> por geração de energia elétrica no Brasil para o ano de 2015, segundo o MCT (2016).

A emissão de CO<sub>2</sub> proveniente do *flare* pode ser estimada com base na estequiometria das reações, assumindo combustão completa. Pode-se calcular a vazão de CO<sub>2</sub> gerada a partir da multiplicação da relação mássica ( $p_c$ ), apresentada na Tabela 2, pela vazão mássica de componente ( $m_c$ ), conforme Eq. (2):



$$m_{CO_2} = m_c \cdot p_c \quad (2)$$

**Tabela 2** - Relação entre a massa de CO<sub>2</sub> emitida para cada componente queimado no *flare*.

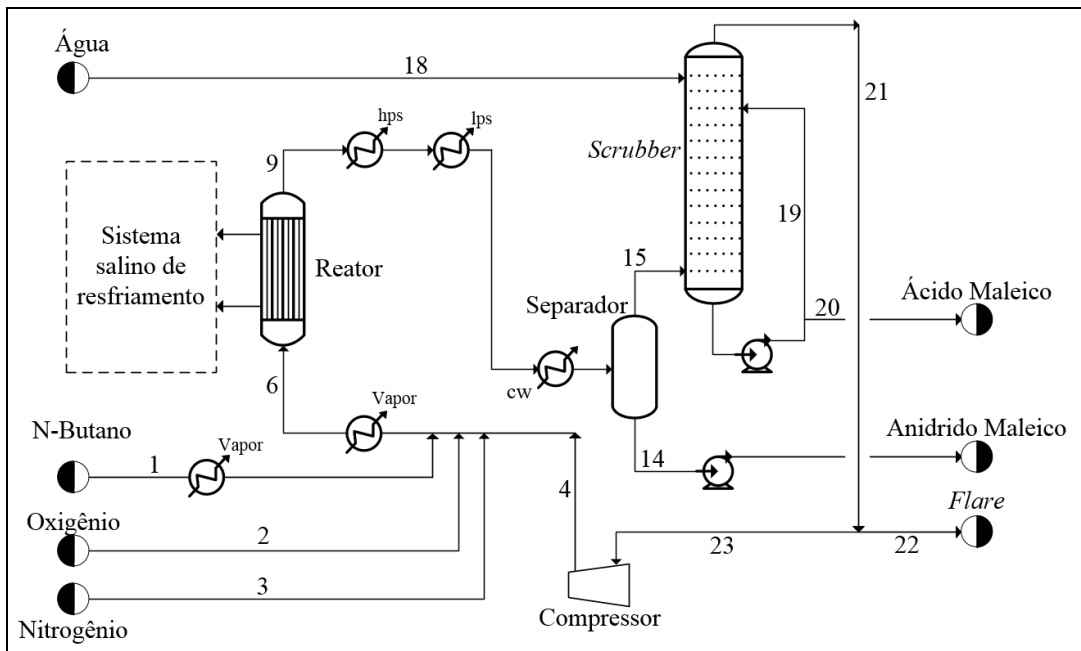
Componente	Reações de Conversão: Reagentes / Produtos	$p_c$ (tCO <sub>2</sub> /t)
Ácido Maleico	$C_4H_4O_4 + 3 O_2 \rightarrow 4 CO_2 + 2 H_2O$	1,6552
Monóxido de carbono	$2 CO + O_2 \rightarrow 2 CO_2$	1,7143

Com base no trabalho de Siitonen *et al.* (2010), a determinação do ecoindicador de CO<sub>2</sub> foi realizada através da razão entre a quantidade de CO<sub>2</sub> emitida (tCO<sub>2</sub>/h) e a produção de MAN (t/h) considerando-se:

- As emissões fugitivas por vazamento e transporte são negligenciáveis;
- As bombas e compressores operam com energia elétrica e com eficiência de 75% (valor padrão do software UniSim<sup>®</sup>);
- Os aquecedores operam com vapor gerado pela queima de gás natural na caldeira, que opera com eficiência de 80%.

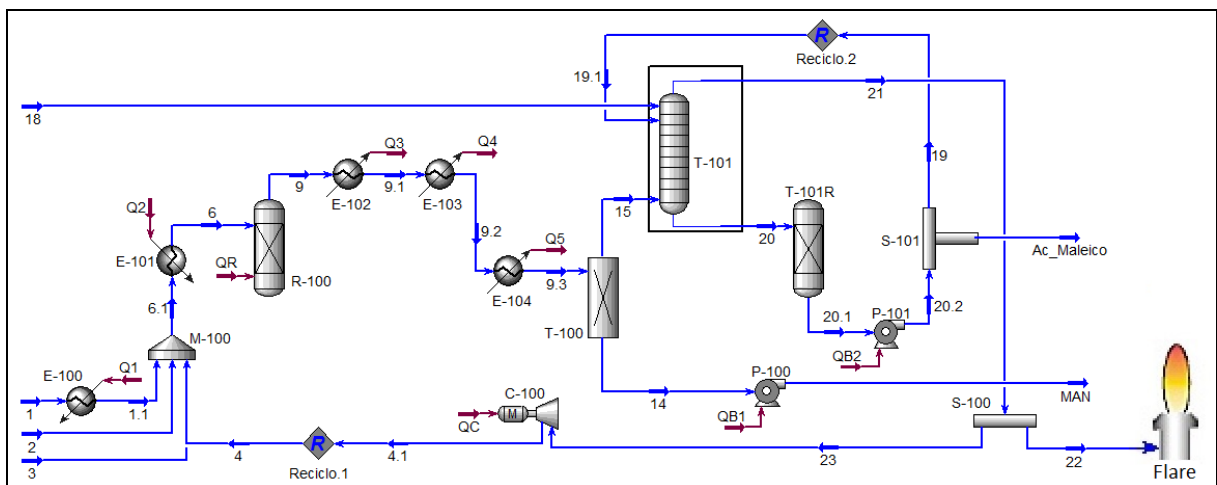
#### 4. PLANTA DE ANIDRIDO MALEICO

A planta de anidrido maleico estudada, ilustrada na Figura 1, foi proposta originalmente por Frank (1975). Na simulação, ilustrada na Figura 2, foi utilizado o pacote termodinâmico NRTL. Para efeitos de simulação, uma vez que não foram encontrados os parâmetros cinéticos para a reação de produção de MAN, utilizaram-se os valores encontrados por Frank (1975) para a conversão de n-butano em um reator tubular catalítico dotado de 15000 tubos de 1 polegada de diâmetro e 16 pés de comprimento e catalisador de óxido de vanádio e fósforo (Frank, 1975).



**Figura 1.** Planta de produção de MAN via n-butano proposta por Frank, 1975.

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



**Figura 2.** Planta de produção de MAN via n-butano simulada no software UniSim®.

#### 4.1. Seção de alimentação

A alimentação da planta é realizada a partir de três correntes distintas. A corrente 1 contém n-butano puro a 14°C e 170 kPa, com uma vazão de 0,2150 kmol/h, sendo aquecida para 25°C no aquecedor E-100 antes de ser conduzida ao reator. Oxigênio e nitrogênio puros são alimentados ao reator pelas corrente 2 e 3, com vazões de 0,9125 kmol/h e 0,7898 kmol/h,





respeçivamente, ambas a 25°C e 170 kPa. Em seguida, essas três correntes são misturadas com a corrente 4, oriunda da reciclagem do produto de topo da coluna absorvedora T-101, com vazão de 11,20 kmol/h a 150,3°C e 170 kPa, resultando na corrente 6.1. Essa corrente encontra-se a 129,4°C e 170,3 kPa, com uma vazão de 13,12 kmol/h, composta por 1,6 mol% de n-butano, 7,3 mol% de oxigênio, 8,0 mol% de CO, 4,9 mol% de CO<sub>2</sub>, 42,1 mol% de água, 35,7 mol% de nitrogênio e 0,2 mol% de ácido maleico é encaminhada ao aquecedor E-101, tendo sua temperatura elevada para 420°C, finalizando as etapas referentes à preparação dos reagentes para entrada no reator tubular catalítico R-100.

## 4.2. Seção de reação

Conforme descrito, devido à falta de informação referente à cinética reacional de oxidação do n-butano, neste trabalho foi utilizado um reator de conversão em substituição ao reator tubular catalítico. Esta simulação é válida, pois Frank (1975) afirmou os valores de conversão do n-butano para MAN, CO e CO<sub>2</sub> (60%, 25% e 15%, respectivamente). A corrente 9 sai do reator R-100 a 470°C e 170 kPa, com vazão de 13,42 kmol/h e 48,24 mol% de água, 34,92 mol% de nitrogênio, 9,50 mol% de CO, 5,70 mol% de CO<sub>2</sub>, 0,96 mol% de MAN, 0,42 mol% de oxigênio e 0,26 mol% de ácido maleico.

Após passar pelo reator, a corrente de produto (corrente 9) é encaminhada a dois resfriadores em série. No primeiro resfriador (E-102), além da redução da temperatura da corrente 9 para 308°C, há geração de vapor de alta pressão (cuja quantidade não foi calculada neste trabalho). Após o segundo resfriador (E-103), a temperatura do efluente é de 166°C. Em seguida, o produto é levado a um terceiro resfriador (E-104), que reduz a temperatura do fluido para 104,4°C e o efluente é, então, direcionado ao vaso de *flash* T-100, onde MAN e ácido maleico são separados dos demais componentes.

## 4.3. Seção de separação

O produto de fundo (corrente 14) do vaso de *flash* T-100 é composto por MAN (69,28 mol%) e ácido maleico (30,72 mol%) em fase líquida, com vazão de 0,1117 kmol/h a 181,6°C e 170 kPa e, posteriormente tem sua pressão elevada para 400 kPa, após passagem pela bomba P-100. Essa corrente corresponde ao produto final, podendo ser encaminhada para

etapas de separação adicionais, caso uma maior pureza de MAN seja requerida. A corrente de topo (corrente 15) é composta por 48,64 mol% de água, 35,21 mol% de nitrogênio, 9,58 mol% de CO, 5,75 mol% de CO<sub>2</sub> e traços irrisórios de MAN e oxigênio, com vazão de 13,31 kmol/h a 100,5°C e 170 kPa. Essa corrente deve ser encaminhada à coluna absorvedora T-101, onde parte da água e os traços de MAN e ácido maleico são removidos.

A coluna absorvedora (T-101) é dotada de 20 pratos com separação de 0,5 m entre si e 100% de eficiência, não dispondo de refulvador ou condensador. O diâmetro da coluna é de 1,5 m. A corrente 15, proveniente do vaso de *flash*, é alimentada na base da coluna, enquanto água pura (corrente 18) é alimentada no topo, com vazão de 0,3314 kmol/h a 45°C e 100 kPa. Além dessas correntes, uma fração do produto de fundo (corrente 19.1) é realimentada no prato 7 da própria coluna T-101 e é constituída majoritariamente por água (91,27 mol%) e ácido maleico (8,73 mol%), com uma vazão de 0,4750 kmol/h a 82,8°C e 100 kPa. Este reciclo é feito para que a água, solvente utilizado na coluna absorvedora, seja reaproveitada. O produto de fundo da coluna (corrente 20) é composto por 91,95 mol% de água, 8,02 mol% de MAN e traços irrisórios de ácido maleico, com vazão de 0,6432 kmol/h a 83,3°C e 100 kPa.

Nessa corrente, durante o trajeto tanto da recirculação de volta à coluna quanto da retirada da corrente de Ácido Maleico (Ac\_Maleico), MAN é totalmente convertido a ácido maleico por meio de uma reação de hidrólise. Como a simulação de uma coluna reativa requer dados e parâmetros reacionais não encontrados na literatura para esta reação, esta foi simulada a partir da inserção de um reator de conversão T-101R hipotético. Neste trabalho, a coluna reativa apresentada por Frank (1975) é, então, representada pelo conjunto dos dois equipamentos T-101 e T-101R. Nesse reator, há alteração da composição da corrente 20.1 para 91,25 mol% de água e 8,75 mol% de ácido maleico, com vazão de 0,5916 kmol/h e temperatura e pressão idênticas às da corrente 20. A fração recirculada à coluna corresponde a 80% da vazão molar da corrente 20.1, enquanto o restante (corrente Ac\_Maleico) é retirado do sistema, correspondendo à vazão de 0,1183 kmol/h.

## 5. RESULTADOS

Esta seção apresenta os resultados da simulação e do ecoindicador de emissão de CO<sub>2</sub>.

### 5.1. Resultados da Simulação

Os resultados da simulação da planta de anidrido maleico são apresentados na Tabela 4. Devido à falta de espaço para apresentação completa dos dados, apenas os resultados principais são detalhados (dados para N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O foram omitidos).

**Tabela 4 - Resultados da simulação.**

Corrente	Temperatura (°C)	Pressão (kPa)	Vazão (kmol/h)	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	MAN	Ác. Maleico	CO	CO <sub>2</sub>	
1	Frank	*	*	0,2150	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	
	UniSim®	13,8	170	0,2150	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	
4	Frank	*	*	<b>10,0641</b>	<b>0,0180</b>	0,0000	*	<b>0,1278</b>	<b>0,9570</b>
	UniSim®	606,5	220	<b>10,5467</b>	<b>0,0113</b>	0,0000	<b>0,0031</b>	<b>0,0947</b>	<b>0,9134</b>
6	Frank	420,0	170	<b>12,0008</b>	<b>0,0278</b>	0,0000	<b>0,0008</b>	<b>0,1071</b>	<b>0,0803</b>
	UniSim®	420,0	170	<b>13,1161</b>	<b>0,0164</b>	0,0000	<b>0,0026</b>	<b>0,0908</b>	<b>0,0685</b>
9	Frank	*	*	<b>12,2211</b>	<b>0,0109</b>	<b>0,0106</b>	0,0002	<b>0,1183</b>	<b>0,0887</b>
	UniSim®	33,8	75	<b>16,2673</b>	<b>0,0096</b>	<b>0,0870</b>	0,0002	<b>0,1083</b>	<b>0,0777</b>
15	Frank	<b>189,0</b>	80	<b>12,1436</b>	<b>0,0110</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,0159</b>	<b>0,1190</b>	<b>0,0892</b>
	UniSim®	<b>139,0</b>	80	<b>18,2821</b>	<b>0,0338</b>	<b>0,0006</b>	<b>0,0098</b>	<b>0,0993</b>	<b>0,0562</b>

**Tabela 4 - Resultados da simulação (continuação).**

Corrente	Temperatura (°C)	Pressão (kPa)	Vazão (kmol/h)	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	MAN	Ác. Maleico	CO	CO <sub>2</sub>	
22	Frank	*	*	<b>1,2553</b>	<b>0,0118</b>	0,0000	0,0000	<b>0,1276</b>	<b>0,0957</b>
	UniSim®	330,4	82	<b>1,7612</b>	<b>0,0138</b>	0,0000	0,0000	<b>0,1565</b>	<b>0,0834</b>
23	Frank	*	*	<b>10,0641</b>	<b>0,0118</b>	0,0000	0,0000	<b>0,1278</b>	<b>0,0957</b>
	UniSim®	81,0	100	<b>11,2021</b>	<b>0,0017</b>	0,0000	0,0000	<b>0,1185</b>	<b>0,0947</b>

\* Valores não apresentados por Frank (1975).

Apesar de especificar exatamente as mesmas especificações das correntes de entrada (correntes 1 e 4), é possível observar a existência de pequenas divergências na Tabela 4. Uma



possível explicação para tal fato é a ausência de informação, por parte de Frank (1975), a respeito das condições operacionais de reação e de separação do MAN. Ademais, é possível, ainda, que essas diferenças sejam uma consequência da divergência entre os reatores utilizados. Frank (1975) utilizou um reator tubular de leito catalítico, enquanto neste trabalho um reator de conversão foi utilizado, devido à falta de informação a respeito da cinética reacional (como discutido na seção 4.2 deste trabalho).

A produção desta unidade é calculada pela vazão mássica da corrente de fundo (corrente MAN) do vaso de *flash* T-100, o que resulta em um valor de 11,57 kg/h (conversão do software UniSim<sup>®</sup> para vazão molar de 0,112 kmol/h).

## 5.2. Resultados do Ecoindicador de CO<sub>2</sub>

A Tabela 5 apresenta os resultados obtidos de cada fonte energética envolvida nos processos de aquecimento e bombeamento, assim como a descrição dessas fontes.

**Tabela 5** - Resultados para as fontes energéticas obtidos neste trabalho.

Fonte	Tipo de Emissão	Energia	Eficiência*	Quantidade (kgCO <sub>2</sub> /h)
Compressor (C-100)	Indireta	7,03 kW	75%	1,1660
Bomba (P-100)	Indireta	0,001 kW	75%	0,0002
Aquecedor (E-100)	Combustão	1,40 kW	80%	0,3534
Aquecedor (E-101)	Combustão	38,11 kW	80%	9,6287
Bomba (P-101)	Indireta	0,87 kW	75%	0,1443
<b>Total</b>				<b>11,2926</b>

\*As energias das bombas e do compressor foram calculadas pelo UniSim<sup>®</sup> já considerando suas eficiências, o que não ocorre para os aquecedores. Portanto, para esses últimos a quantidade calculada energia de CO<sub>2</sub> emitida foi corrigida dividido-se o valor encontrado pela eficiência da caldeira.

A Tabela 6 apresenta as vazões mássicas de cada componente da corrente 22, enviada para queima no *flare* e as respectivas vazões mássicas de CO<sub>2</sub>.

**Tabela 6** – Resultados para corrente de *flare*.

Componente	Vazão mássica (kg/h)	Quantidade (kgCO <sub>2</sub> /h)
CO	6,0227	10,3246

Ácido Maleico	0,8080	1,3374
H <sub>2</sub> O	20,1850	-
CO <sub>2</sub>	5,6775	5,6775
N <sub>2</sub>	22,1260	-
O <sub>2</sub>	0,3043	-
<b>Total</b>	<b>55,1235</b>	<b>17,3395</b>

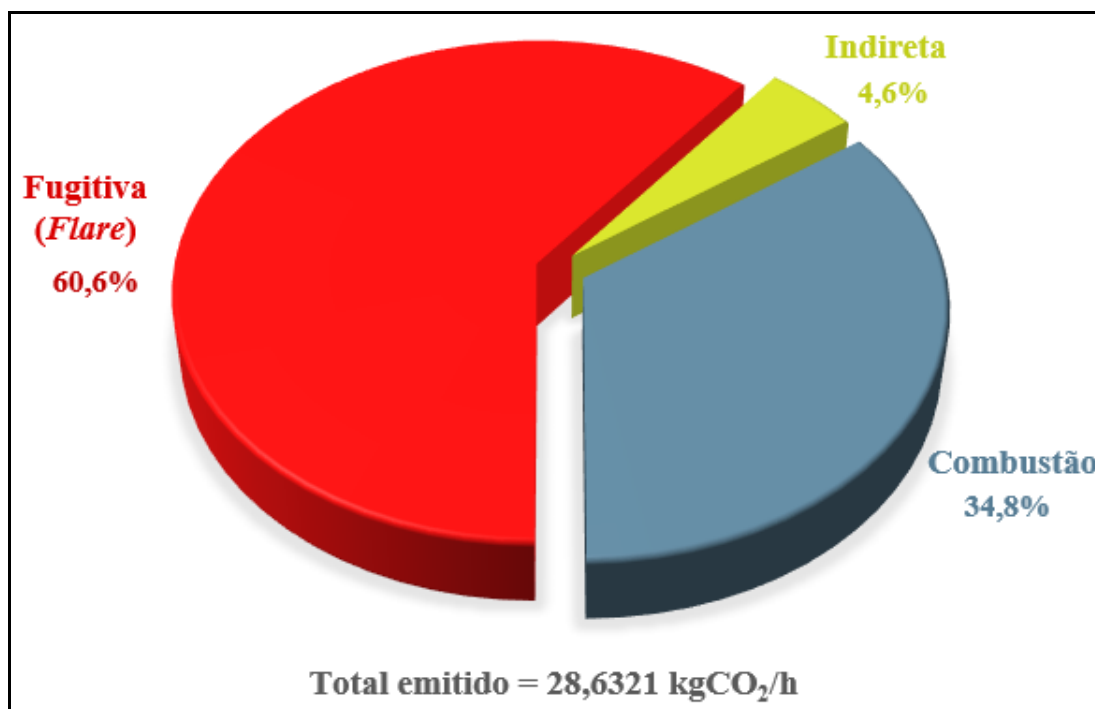
A partir dos resultados apresentados na Tabela 6, verifica-se que a vazão mássica total de CO<sub>2</sub> emitida (somatório das emissões indiretas, por combustão e de alívio para *flare*) é igual a 24,7580 kgCO<sub>2</sub>/h. Portanto, sabendo-se que a vazão de produto é de 11,5740 kg/h, o ecoindicador de emissão de CO<sub>2</sub> para esta planta pode ser determinado conforme Tabela 7.

**Tabela 7** - Resultado para o ecoindicador de CO<sub>2</sub>.

<b>Tipo de Emissão</b>	<b>Quantidade</b>
Indireta	1,3105
Combustão	9,9821
Fugitiva ( <i>Flare</i> )	17,3395
<b>Total (kgCO<sub>2</sub>/h)</b>	<b>28,6321</b>
<b>Produção (kg/h)</b>	<b>11,5740</b>
<b>Ecoindicador de CO<sub>2</sub> (kgCO<sub>2</sub>/kg)</b>	<b>2,4738</b>

A porcentagem referente à cada tipo de emissão é representada na Fig. 3. O valor de 2,4738 kgCO<sub>2</sub>/kg indica que há um elevado índice de emissão de CO<sub>2</sub> na planta analisada. Observando-se os resultados, pode-se avaliar uma possível integração energética para essa planta, a fim de amenizar os consequentes impactos ambientais.

A partir dos resultados obtidos é possível desenvolver um estudo comparativo de duas ou mais plantas de produção de anidrido maleico com diferentes tecnologias produtivas e base nos ecoindicadores. É possível, ainda, comparar duas ou mais plantas de produção de MAN via n-butano considerando-se as diferentes características apresentadas na seção 2.1 deste trabalho.



**Figura 3** - Porcentagem referente aos tipos de emissão.

Segundo Frank (1975), há geração de vapor tanto de alta pressão e de baixa pressão, nos resfriadores E-102 e E-103, respectivamente. Deste modo, este vapor gerado poderia ser utilizado para integrar energeticamente a planta, o que diminuiria seu consumo energético e, conseqüentemente, diminuiria também o ecoindicador de emissão de CO<sub>2</sub>, apresentando uma alternativa interessante à venda deste vapor.

## 6. CONCLUSÃO

Os resultados da simulação utilizando o software UniSim<sup>®</sup> diferem, em sua maior parte dos resultados apresentados por Frank (1975). A divergência entre os valores obtidos deve-se ao fato de as correntes e equipamentos não serem minuciosamente especificados, característica implícita, geralmente, de processos descritos em patentes, pois essas possuem um caráter generalista, de modo que a patente seja o mais abrangente possível.

Na planta analisada, a queima no *flare* é a principal fonte de emissão de CO<sub>2</sub>, correspondendo a 60,6% do total. Deste modo, é importante ressaltar que a queima é desvantajosa, não somente por questões econômicas, mas especialmente por questões ambientais, pois contribui diretamente na elevação taxa de emissão de CO<sub>2</sub>, gás mais



impactante para o efeito estufa. O valor encontrado para o ecoindicador (2,4738 kgCO<sub>2</sub>/kg) demonstra que a rota de produção de MAN via benzeno é altamente poluente. Contudo, as baixas vazões de reagente e produtos da planta fazem com que, em valores absolutos, sejam bem inferiores à outras plantas químicas e petroquímicas cujas vazões estão na ordem de toneladas.

Tendo em vista esse valor elevado, é possível desenvolver futuramente estudos baseados nos ecoindicadores para se reduzir as emissões de CO<sub>2</sub> na planta analisada, através de integração energética.

## REFERÊNCIAS

AAL, C.; HUSABØ, I. A. **Is Eco-Efficiency a Sufficient Strategy for Achieving a Sustainable Development?: The Norwegian Case.** Western Norway Research Institute. Sogndal, 24 nov. 2010. Disponível em: <<http://www.mdpi.com/2071-1050/2/12/3623/htm>>. Acesso em: 16 abr. 2016.

BAERNS, M. **Basic Principles in Applied Chemistry.** Springer Series in CHEMICAL PHYSICS 75. Berlim, DE: Springer-Verlag, 2004. 557 p. ISBN 978-3-642-07310-6.

CENTI, G., CAVANI, F., TRIFIRÒ, F. **Selective Oxidation by Heterogeneous Catalysis. Fundamental and Applied Catalysis.** Nova York, US: Springer Science + Business Media, 2001. 505 p. ISBN 978-1-4613-6872-4.

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: 26 mar. 2016.

FRANK, M. E., NY. **Recycle process for oxidation of n-butane to maleic anhydride.** US Pat. 3904652, 09 set. 1975. Standard Oil Company (Indiana), Ill. 7 p.

ICIS. **Maleic Anhydride (MA) Uses and Market Data**. Houston: ICIS, 2007. Disponível em: <<http://www.icis.com/resources/news/2007/11/05/9076025/maleic-anhydride-ma-uses-and-market-data/>>. Acesso em: 30 mar. 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: 28 mar. 2016.

INTERNATIONAL ENERGY AGENCY. IEA. **Tracking Industrial Energy Efficiency and CO<sub>2</sub> Emissions**. Paris: IEA, 2007. Disponível em: <[https://www.iea.org/publications/freepublications/publication/tracking\\_emissions.pdf](https://www.iea.org/publications/freepublications/publication/tracking_emissions.pdf)>. Acesso em: 27 mar. 2016.

LEROU, J. J., MILLS, P. L. **DuPont butane oxidation process**. Corporate Catalysis Center Du Pont Central Research and Development Experimental Station. Wilmington, DE: Kluwer Academic Publishers, 1993. Precision Process Technology: Perspectives for pollution prevention. p. 175-195. ISBN 978-94-010-4772-2.

MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA. MCT (2016). **Fator de Emissão de CO<sub>2</sub> pela geração de energia elétrica no Sistema Interligado Nacional (SIN)**. Disponível em: <<http://www.mct.gov.br/index.php/content/view/321144.html#ancora>>. Acesso em: 27 mar. 2016.

RASE, H. F. **Handbook of Commercial Catalysts: Heterogeneous Catalysts**. Boca Raton, FL: CRC Press LLC, 2000. 520 p. ISBN 0-8493-9417-1.

SIITONEN, S.; TUOMAALA, M.; AHTILA, P. **Variables affecting energy efficiency and CO<sub>2</sub> emissions in the steel industry**. Energy Policy, v. 38, 2477–2485, 2010.

UNITED NATIONS CONFERENCE ON TRADE AND DEVELOPMENT. UNCTAD. **A Manual for the Preparers and Users of Eco-efficiency Indicators**. Nova York & Genebra: United Nations, 2004. Disponível em: <[http://unctad.org/en/docs/iteipc20037\\_en.pdf](http://unctad.org/en/docs/iteipc20037_en.pdf)>. Acesso em: 22 mar. 2016.





CONGRESSO NACIONAL DE  
EXCELÊNCIA EM GESTÃO

ISSN 1984-9354



XII CONGRESSO NACIONAL DE EXCELÊNCIA EM GESTÃO  
& III INOVARSE – RESPONSABILIDADE SOCIAL APLICADA.  
29 e 30 de setembro de 2016.

WORLD BUSINESS COUNCIL FOR SUSTAINABLE DEVELOPMENT. WBCSD.

**About:** Organization. WBCSD, 2016. Disponível em:

<<http://www.wbcsd.org/about/organization.aspx>>. Acesso em: 02 abr. 2016.