



AVALIAÇÃO DE IMPACTO AMBIENTAL NA CADEIA DE PRODUÇÃO DO
POLI(SUCCINATO DE BUTILENO) (PBS)

Mariana Teixeira Gomes Aben-Athar

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientador: José Carlos Costa da Silva Pinto

Rio de Janeiro
Agosto de 2023

AVALIAÇÃO DE IMPACTO AMBIENTAL NA CADEIA QUÍMICA DE PRODUÇÃO
DO POLI(SUCCINATO DE BUTILENO) (PBS)

Mariana Teixeira Gomes Aben-Athar

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ
COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA DA
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS
NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM ENGENHARIA
QUÍMICA.

Orientador: José Carlos Costa da Silva Pinto

Aprovada por: Prof^a Alessandra da Rocha Dualibe Monteiro

Prof^a Bettina Suzanne Hoffman

Prof. Luiz Eduardo Pizzaro Borges

Prof. Márcio Nele de Souza

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

AGOSTO DE 2023

Aben-Athar, Mariana Teixeira Gomes

Avaliação de impacto ambiental na cadeia química de produção do poli(succinato de butileno) (PBS) / Mariana Teixeira Gomes Aben-Athar. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2023.

XIV, 105 p.: il.; 29,7 cm.

Orientadores: José Carlos Costa da Silva Pinto

Dissertação (mestrado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Química, 2023.

Referências Bibliográficas: p. 95-105.

1. Avaliação de Impactos Ambientais. 2. PBS. 3. Polímeros renováveis. 4. Ácido Succínico. 5. 1,4-Butanodiol. I. Pinto, José Carlos Costa da Silva *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Química. III. Título.

AGRADECIMENTOS

A meus pais, Jayme e Patrícia, que me apoiaram imensamente em todas as etapas desse trabalho, assim como fazem com tudo na minha vida. Muito obrigada, de coração, vocês são minhas maiores inspirações para serem ir atrás do que se acredita.

Ao Breno, que não satisfeito em ser meu colega de graduação e mestrado, também resolveu dividir a vida comigo. Obrigada por tornar ela tão mais leve e alegre todos os dias.

Para os amigos e colegas que fiz no PEQ. A Tayná, Débora, Luciana e demais colegas do Engepol e da turma de 2020. Muito obrigada pelo suporte nesses tempos e por dividirem suas ideias geniais. O mestrado pandêmico foi muito melhor graças a vocês.

Ao Zé, meu orientador brilhante, que sempre acreditou nesse trabalho e até quando eu me via desanimada e confusa conseguia me animar e seguir firme e forte.

A meus amigos, por todo o suporte, apoio e companheirismo durante o desenvolvimento do trabalho. Obrigada por me incentivarem e me emprestarem seus ouvidos quando eu precisei em todos os momentos.

À FAPERJ pelo apoio financeiro.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Química (M.Sc.)

AVALIAÇÃO DE IMPACTO AMBIENTAL NA CADEIA QUÍMICA DE PRODUÇÃO DO POLI(SUCCINATO DE BUTILENO) (PBS)

Mariana Teixeira Gomes Aben-Athar

Agosto/2023

Orientador(es): José Carlos Costa da Silva Pinto

Programa: Engenharia Química

O modelo de produção e consumo linear já mostra que não é capaz de suprir a demanda da sociedade por itens essenciais à manutenção do estilo de vida atual. Fica clara a necessidade da migração do sistema atual para um modelo de produção circular. O poli(succinato de butileno) (PBS) é um candidato à essa nova economia, visto que se trata de um polímero reciclável, compostável e potencialmente obtido de fontes renováveis. O material é produzido por meio da policondensação entre o ácido succínico (AS) e 1,4-butanodiol (1,4-BDO), que podem ser obtidos tanto por via petroquímica quanto via processamento de biomassa. A manufatura de polímeros de condensação também podem sofrer variações, visto que tal é tradicionalmente realizada via polimerização em massa e como solução inovadora, há o processo de polimerização em suspensão. No entanto, ainda não são completamente compreendidos os impactos ambientais associados a esses processos para PBS. O presente trabalho avaliou e comparou o desempenho ambiental da produção do PBS, de ambas rotas de polimerização e origem dos monômeros, no sudeste do Brasil, em 2022, desde a extração de matérias primas até o processo de manufatura (berço ao portão). O trabalho considerará os monômeros ácido succínico e 1,4-butanodiol sendo de origem petroquímica ou obtidos a partir de biomassa; no caso, a glicose oriunda da cana-de-açúcar. A avaliação englobará quatro sistemas de produto: PBS de polimerização em suspensão e origem renovável, PBS de polimerização em massa e origem renovável, PBS de polimerização em suspensão e origem petroquímica e PBS de polimerização em massa e origem petroquímica. Os inventários dos processos de produto foram obtidos da literatura ou realizou-se simulações em AspenPlus

v12.1, para formalização dos balanços de massa e energia. Por meio de uma avaliação de impacto ciclo de vida (AICV), compararam-se os desempenhos ambientais dos sistemas de produto analisados. A AICV foi conduzida no software SimaPro e método de análise empregado foi ReCiPe. As categorias de impacto analisadas foram aquecimento global, eutrofização da água doce, uso de terra, ecotoxicidade terrestre, depleção de recursos fósseis e consumo de água. A avaliação dos resultados sugere que, ao empregar matérias primas oriundas de fontes renováveis, diminuem-se os categorias de impacto relacionados a aquecimento global, mas observam-se perdas de desempenho nas categorias associadas a ecossistemas terrestres por conta dos impactos relacionados à produção de cana-de-açúcar, que demanda área agricultável e emprega fertilizantes e pesticidas químicos na lavoura. Finalmente, o estudo sugere que o processo de polimerização em massa para produção do PBS apresenta desempenho ambiental ligeiramente superior ao da polimerização em suspensão, embora o primeiro resulte em *pellets* de polímero e o segundo resulte em micropartículas de PBS, usados para aplicações potencialmente distintas.

Palavras chaves: 1. PBS. 2. Avaliação de Impactos Ambientais. 3. Polímeros renováveis. 4. Ácido Succínico. 5. 1,4-Butanodiol.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Chemical Engineering (M.Sc.)

ENVIRONMENTAL IMPACT ASSESSEMENT OF THE POLY(BUTYLENE SUCCINATE) (PBS) PRODUCTION CHAIN

Mariana Teixeira Gomes Aben-Athar

August/2023

Advisors: José Carlos Costa da Silva Pinto

Department: Chemical Engineering

The linear production model has already shown that it is unable to meet society's demand for essential items to today's lifestyle. The need to migrate from the current production and consume model to a circular one is clear. Polybutylene succinate (PBS) is a candidate for this new economy, as it is a recyclable, compostable polymer that can potentially be obtained from renewable sources. The material is produced through polycondensation between succinic acid (AS) and 1,4-butanediol (1,4-BDO), which both can be obtained either through petrochemicals or biomass processing. The manufacture of condensation polymers can also undergo variations. It is traditionally carried out via mass polymerization and as an innovative solution, there is the process of suspension polymerization. However, the environmental impacts associated with these processes for PBS are not yet fully understood. This study evaluated and compared the environmental performance of PBS production, from both polymerization routes and monomer origin, in southeastern Brazil in 2022, from the extraction of raw materials to the manufacturing process (cradle to gate). The work will consider the monomers succinic acid and 1,4-butanediol from petrochemical origin or obtained from biomass, in this case glucose from sugar cane. The evaluation will cover four product systems: PBS from suspension polymerization and renewable origin, PBS from mass polymerization and renewable origin, PBS from suspension polymerization and petrochemical origin and PBS from mass polymerization and petrochemical origin. Product process inventories were obtained from the literature or simulations were carried out in AspenPlus v 12.1 to formalize the mass and energy balances. A life cycle impact assessment (LCA) was used to compare the environmental

performance of the product systems analyzed. ReCiPe was the analysis method used. The impact categories analyzed were global warming, freshwater eutrophication, land use, terrestrial ecotoxicity, fossil resource depletion and water consumption. The evaluation of the results suggests that, by using raw materials from renewable sources, the impact categories related to global warming are reduced, but there is a loss of performance in the categories associated with terrestrial ecosystems due to the impacts related to sugarcane production, which demands arable land and uses chemical fertilizers and pesticides in farming. Finally, the study suggests that the mass polymerization process for producing PBS has slightly better environmental performance than suspension polymerization, although the former results in polymer pellets and the latter results in PBS microparticles, used for potentially different applications.

Key words: 1. PBS. 2. Environmental Impact Assessment. 3. Renewable Polymers. 4. Succinic Acid. 5. 1,4-Butanediol.

Índice

<i>Capítulo 1</i>	<i>Introdução</i>	<i>1</i>
1.1	Motivação	1
1.2	Objetivo	3
1.3	Estrutura da dissertação	3
<i>Capítulo 2</i>	<i>Fundamentos Teóricos e Revisão Bibliográfica</i>	<i>5</i>
2.1	Polímeros	5
2.2	Os polímeros e os desafios de seu modelo econômico atual	5
2.3	Os plásticos verdes	8
2.4	Avaliação de Ciclo de Vida (ACV)	12
2.5	Poli(succinato de butileno) (PBS)	20
2.6	Ácido Succínico (AS) e sua plataforma química.....	23
2.7	1,4 – Butanodiol (1,4-BDO)	28
2.8	Cana-de-açúcar e o biorrefino no cenário brasileiro.....	29
2.9	Comentários Finais	32
<i>Capítulo 3</i>	<i>Metodologia</i>	<i>34</i>
3.1	Declaração de objetivo e escopo.....	34
3.2	Inventários de ciclo de vida (ICV).....	37
3.2.1	Sistema de produto de glicose e energia a partir de cana-de-açúcar.....	37
3.2.2	Rotas de produção para AS	38
3.2.2.1	AS de origem petroquímica	38
3.2.2.2	AS de origem renovável.....	38
3.2.2.3	Sistema de produtos do AS	41
3.2.3	Rotas de produção de 1,4-BDO	41
3.2.3.1	Hidrogenação do AS	41
3.2.3.2	Fermentação da glicose a 1,4-BDO	43
3.2.3.3	Sistemas de produto para 1,4-BDO.....	44
3.2.4	Rotas de produção de PBS	45
3.2.4.1	PBS em suspensão.....	45

3.2.4.2	PBS em massa	46
3.2.4.3	Sistema de produtos para PBS	48
3.3	Avaliação de impactos de ciclo de vida (AICV)	48
3.4	Comentários Finais	52
<i>Capítulo 4 Resultados e Discussão</i>		<i>54</i>
4.1	Inventários de ciclo de vida	54
4.1.1	Inventário de processo de produto para AS	54
4.1.2	Inventário de processo de produto para de 1,4-BDO	56
4.1.3	Inventário de processo de produto para PBS	57
4.2	Avaliação de impactos da produção de ácido succínico.....	58
4.2.1	Aquecimento Global	58
4.2.2	Eutrofização da água doce	60
4.2.3	Ecotoxicidade Terrestre	61
4.2.4	Uso da Terra.....	63
4.2.5	Escassez de recursos fósseis.....	64
4.2.6	Consumo de água	66
4.2.7	Interpretação dos resultados para o AS	67
4.3	Avaliação de Impactos da rota de produção 1,4-butanodiol	68
4.3.1	Aquecimento Global	69
4.3.2	Eutrofização da água doce	70
4.3.3	Ecotoxicidade Terrestre	72
4.3.4	Uso de Terra.....	73
4.3.5	Escassez de Recursos fósseis	74
4.3.6	Consumo de água	76
4.3.7	Interpretação de Resultados para 1,4-BDO.....	77
4.4	Avaliação de Impactos da rota de produção de PBS	79
4.4.1	Aquecimento Global	79
4.4.2	Eutrofização da água doce	80
4.4.3	Ecotoxicidade Terrestre	82
4.4.4	Uso de Terra.....	83
4.4.5	Escassez de recursos fósseis.....	85
4.4.6	Consumo de água	86

4.4.7	Interpretações dos resultados para o PBS	88
<i>Capítulo 5</i>	<i>Conclusões</i>	<i>91</i>
5.1	Conclusões.....	91
5.2	Sugestões para trabalhos futuros	93
<i>Capítulo 6</i>	<i>Referências Bibliográficas</i>	<i>94</i>

Lista de Figuras

Figura 2-1 Produção global de plásticos, desde 1950	6
Figura 2-2: Polímeros aplicados em embalagens e possibilidades de substituição por novos materiais de origem renovável (adaptado de WORLD ECONOMIC FORUM, 2016).....	10
Figura 2-3: Capacidade de produção global de plásticos renováveis (adaptado de ifBB, 2022).....	11
Figura 2-4: Estrutura usual de um ACV (adaptado de GOEDKOOOP <i>et al.</i> , 2016).....	12
Figura 2-5: Reação usual de polimerização para síntese do PBS.....	21
Figura 2-6: Derivados da plataforma química do AS (adaptado de DUTRA <i>et al.</i> , 2019).	24
Figura 3-1: Esquemático dos sistemas de produção de PBS	36
Figura 3-2: Esquema do sistema de produção de AS por hidrogenação do AM (adaptado de PINAZO <i>et al.</i> , 2015).	38
Figura 3-3: Diagrama simplificado de processo para a produção de AS a partir de glicose....	39
Figura 3-4: Diagrama de processo simplificado da produção de 1,4-BDO.....	42
Figura 3-5: Diagrama simplificado do processo de fermentação direta de glicose a 1,4-BDO (adaptado de SATAM <i>et al.</i> , 2019).	44
Figura 3-6: Diagrama simplificado do processo de polimerização de AS e 1,4-BDO em suspensão.	46
Figura 3-7: Diagrama simplificado da polimerização de AS e 1,4-BDO em massa.....	47
Figura 3-8: Relação de causa e efeito de emissões de GEE para aumento da temperatura média global (adaptado de HUIJBREGTS <i>et al.</i> , 2017)).....	50
Figura 4-1: Resultado para a categoria aquecimento global dos processos de produção de AS.	59
Figura 4-2: Contribuição das entradas para cada SP de produção do AS para a categoria de impacto aquecimento global.....	60
Figura 4-3: Resultado para a categoria de impacto eutrofização de água doce dos processos de produção de AS.	60
Figura 4-4: Contribuição das entradas para cada SP de produção do AS para a categoria de impacto eutrofização de água doce.....	61
Figura 4-5: Resultado da categoria de impacto ecotoxicidade terrestre dos processos de produção de AS	62

Figura 4-6: Contribuição das entradas por SP para a categoria de impacto ecotoxicidade terrestre para AS	62
Figura 4-7: Resultado para a categoria de impacto uso da terra dos processos de AS.....	63
Figura 4-8: Contribuição das entradas por SP para a categoria de impacto uso de terra para AS	64
Figura 4-9: Resultados para a categoria de impacto escassez de recursos fósseis dos processos de produção de AS.....	65
Figura 4-10: Contribuição das entradas por SP para a categoria de impacto escassez de recursos fósseis para AS	65
Figura 4-11: Resultado para a categoria de impacto consumo de água dos processos de produção de AS	66
Figura 4-12: Contribuição das entradas por SP para a categoria de impacto consumo de água para AS	67
Figura 4-13: Análise comparativa dos resultados das categorias de impactos para os sistemas de produto do AS.....	68
Figura 4-14: Resultados para a categoria de impacto aquecimento global dos sistemas de produto de 1,4-BDO	69
Figura 4-15: Contribuição das entradas por SP para a categoria de impacto aquecimento global para 1,4-BDO.....	70
Figura 4-16: Resultados para a categoria de impacto eutrofização da água doce dos sistemas de produto de 1,4-BDO	71
Figura 4-17: Contribuição das entradas por SP para o FI eutrofização da água doce para 1,4-BDO.....	71
Figura 4-18: Resultados para a categoria de impacto ecotoxicidade terrestre dos processos de produção de 1,4-BDO.....	72
Figura 4-19: Contribuição das entradas por SP para categoria de impacto ecotoxicidade terrestre para 1,4-BDO	73
Figura 4-20: Fator de impacto uso de terra dos processos de produção de 1,4-BDO	73
Figura 4-21: Contribuição por entrada para a categoria de impacto uso da terra para as rotas de produção do 1,4-BDO.....	74
Figura 4-22: Resultados para a categoria de impacto escassez de recursos fósseis dos processos de produção de 1,4-BDO	75

Figura 4-23: Contribuição por entrada para a categoria escassez de recursos fósseis para as rotas de produção de 1,4-BDO	75
Figura 4-24: Resultados para a categoria de impacto consumo de água dos processos de produção de 1,4-BDO.....	76
Figura 4-25: Contribuição das entradas por SP para a categoria de impacto consumo de água para 1,4-BDO.....	77
Figura 4-26: Análise comparativa dos resultados das categorias de impactos para os sistemas de produto do 1-BDO.	78
Figura 4-27: Resultado da categoria de impacto aquecimento global para as rotas de produção de PBS	79
Figura 4-28: Contribuição por entrada para aquecimento global nas rotas produtivas de PBS80	
Figura 4-29: Resultado da categoria de impacto eutrofização da água doce para as rotas de produção de PBS	81
Figura 4-30: Contribuição por entrada para eutrofização da água doce para as rotas de polimerização de PBS.....	81
Figura 4-31: Resultado do FI ecotoxicidade terrestre para as rotas de polimerização de PBS	82
Figura 4-32: Contribuição por entrada para ecotoxicidade terrestre para as rotas de polimerização de PBS.....	83
Figura 4-33: Resultado da categoria de impacto uso de terra para as rotas de polimerização do PBS	84
Figura 4-34: Contribuição por entrada para uso de terra para as rotas de polimerização de PBS	84
Figura 4-35: Resultado da categoria de impacto escassez de recursos fósseis para as rotas de produção de PBS	85
Figura 4-36 Contribuição por entrada para escassez de recursos fósseis para as rotas de produção do PBS	86
Figura 4-37: Resultado do FI consumo de água nos processos de polimerização do PBS	87
Figura 4-38: Contribuição por entrada para consumo de água para as rotas de produção do PBS	88
Figura 4-39: Análise comparativa dos resultados dos fatores de impacto para os SPs avaliados de produção do PBS	89

Lista de Tabelas

Tabela 2-1 Principais métodos de ACV (adaptado de (MENDES <i>et al.</i> , 2015))	17
Tabela 2-2: Rotas industriais para a produção de AS como função do tipo de microrganismo e de processo (adaptado de MANCINI <i>et al.</i> , 2020).	27
Tabela 3-1: Resumo das categorias de impacto avaliadas pelo ReCiPe e seus respectivos indicadores (adaptado de HUIJBREGTS <i>et al.</i> , 2017).	49
Tabela 4-1: Inventário de ciclo de vida para os SPs de produção de ácido succínico.	55
Tabela 4-2: Resultado do inventário de ciclo de vida das rotas de produção de 1,4 BDO	56
Tabela 4-3: Inventário do ciclo de vida das rotas de produção do PBS	58
Tabela 4-4: Análise comparativa dos resultados das categorias de impactos para os sistemas de produto do AS.	67
Tabela 4-5 Análise comparativa dos resultados dos fatores de impacto para os SPs de produção do 1,4-BDO	77
Tabela 4-6: Análise comparativa dos resultados dos fatores de impacto para os SPs avaliados de produção do PBS.	88

Índice de Siglas

Sigla	Nome
$(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$	Sulfato de diamônio
1,4 BDO	1,4-Butanodiol
ACV	Avaliação de ciclo de vida
AICV	Avaliação de impacto de ciclo de vida
AM	Anidrido maleico
AS	Ácido succínico
CH_3OH	Metanol
CO_2	Gás carbônico
DMS	Sulfato de diamônio
GBL	Gama butirrolactona
GEE	Gases do efeito estufa
GLU	Glicose
H_2SO_4	Ácido sulfúrico
ICV	Inventário de ciclo de vida
IPP	Inventário de processo de produto
NH_3	Amônia
PBS	Poli(succinato de butileno)
PE	Polietileno
PEBD	Polietileno de baixa densidade
PET	Poli(tereftalato de etileno)
PF	Ponto final
PHA	Polihidroxialcanoato
PHB	Polihidroxibutirato
PLA	Poli(ácido láctico)
PM	Ponto médio

PP	Polipropileno
PS	Poliestireno
PVC	Poli(cloreto de vinila)
SP	Sistema de Produto
THF	Tetrahidrofurano

Capítulo 1

Introdução

1.1 Motivação

O plástico é um dos materiais com mais aplicações e importância para a sociedade, permitindo o desenvolvimento de tecnologias e produtos sem os quais o estilo de vida atual seria inimaginável. Atualmente, a despeito de todos os esforços para o desenvolvimento de estratégias de reciclagem e reaproveitamento do material, a economia de plásticos segue um modelo majoritariamente linear, no qual matérias primas são convertidas em produtos que, após o término da vida útil, são descartados e perdem todo o valor. Em aplicações menos nobres, como no caso da fabricação de embalagens, o material perde valor após o uso único, gerando uma perda de valor estimada entre 80 e 120 bilhões de dólares anuais (WEF, 2016). Estima-se que desde 1950, 8,9 bilhões de toneladas de plástico já foram produzidas, das quais 71% foram descartadas sumariamente, culminando em 4,9 bilhões de toneladas acumuladas em aterros e na natureza (FAPESP, 2019), gerando contaminação de solo e água, impondo riscos para a saúde humana, terrestre e marinha, e resultando em desperdício de recursos naturais e tecnológicos.

Em um modelo de desenvolvimento sustentável, deve-se suprir as necessidades da geração atual sem comprometer a capacidade de gerações futuras de atender suas próprias necessidades (BRUNDTLAND, 1987). Pela pressão e demanda que exerce em recursos naturais, o modelo linear de produção não é capaz de atender a essa definição. Nesse contexto, recentemente, esforços têm sido feitos para adequar a economia dos plásticos a um modelo circular, que seja intrinsecamente regenerativo, priorizando a recuperação e a valorização de resíduos e permitindo a reinserção de materiais na cadeia de abastecimento, a fim de finalmente dissociar o crescimento econômico das perdas ambientais (ELIA *et al.*, 2017). Para isso, é fundamental viabilizar processos de reciclagem ou biodegradação e desacoplar a produção de plásticos de matérias primas de origem fóssil, privilegiando a utilização de matérias primas renováveis.

Um candidato em potencial para desenvolvimento de uma economia circular dos plásticos é o poli(succinato de butileno) (PBS). Trata-se de um poliéster alifático com boas propriedades mecânicas e térmicas, além de ser um termoplástico facilmente processável. Essas características são muito vantajosas por serem similares às das principais poliolefinas (DUTRA *et al.*, 2019).

O PBS é resultante da polimerização por policondensação entre o ácido succínico (AS) e o 1,4-butanodiol (1,4-BDO), compostos obtidos por meio do refino de petróleo, mas que têm potencial de serem produzidos de forma renovável a partir de diferentes tipos de matérias primas renováveis, como biomassa de primeira ou segunda geração (MANCINI *et al.*, 2020). Levando em consideração o fim de vida do material, esse se destaca por ser considerado biodegradável, compostável e compatível com rotas de reciclagem mecânica, química ou enzimática (WEF, 2016).

Os polímeros de policondensação são tradicionalmente produzidos por meio do processo de polimerização em massa (JACQUES *et al.*, 2013). Visando o emprego de temperaturas mais baixas, DUTRA *et al.* (2019) desenvolveram um processo inovador para obtenção de micropartículas de PBS baseado na policondensação em suspensão dos monômeros, utilizando óleo de soja como fase contínua dispersante. As grandes vantagens competitivas dessa estratégia são a possibilidade de eliminar a etapa de peletização e cominuição posterior dos *pellets* e de diminuir o tempo de reação.

Um dos principais desafios associados ao desenvolvimento de processos renováveis é que esses podem se provar intensivos no consumo de energia e água ou apresentar baixos rendimentos em relação às tecnologias mais convencionais (MORALES *et al.*, 2016). Desta forma, não é possível afirmar de forma inequívoca que um processo se qualifica como sustentável, do ponto de vista ambiental, apenas por este ser biodegradável ou proveniente de fonte renovável.

Nesse sentido, um estudo mais complexo do desempenho ambiental é sempre necessário para avaliar de forma mais completa os impactos ambientais envolvidos nos processos produtivos e afirmar a sustentabilidade ambiental de um novo produto. Uma opção possível é realizar uma avaliação do ciclo de vida (ACV), ferramenta fundamental para analisar o

desempenho ambiental dos produtos, tendo em conta o ciclo de vida completo de um material, envolvendo desde o período relativo à produção das matérias primas até a eliminação final dos resíduos. A técnica consiste na quantificação de todas as entradas e saídas associadas a um processo, produto ou serviço, a fim de avaliar todos os possíveis impactos ambientais gerados por essas emissões (GOEDKOOOP *et al.*, 2016).

1.2 Objetivo

Com base no exposto, o presente trabalho tem como objetivo comparar o desempenho ambiental da produção do PBS, no sudeste do Brasil, em 2022, desde a extração de matérias primas até o processo de manufatura (berço ao portão). O trabalho considerará os monômeros ácido succínico e 1,4-butanodiol sendo de origem petroquímica ou obtidos a partir de biomassa; no caso, a glicose oriunda da cana-de-açúcar.

Portanto, a avaliação englobará quatro sistemas de produto: PBS de polimerização em suspensão e origem renovável, PBS de polimerização em massa e origem renovável, PBS de polimerização em suspensão e origem petroquímica e PBS de polimerização em massa e origem petroquímica. O trabalho comparará o desempenho ambiental das diferentes rotas usadas para a produção de monômero e polímero por meio de um estudo de avaliação de ciclo de vida (ACV).

1.3 Estrutura da dissertação

O presente capítulo faz uma breve contextualização do tema estudado e a apresentação da motivação para a escolha do assunto como objeto de investigação, apresentando também o objetivo central da dissertação. O Capítulo 2 apresenta uma fundamentação teórica e faz uma breve revisão da literatura acerca dos temas relacionados à nova economia dos plásticos, aos plásticos de origem renovável, à avaliação de ciclo de vida, e aos processos de produção de ácido succínico, 1,4-butanodiol e PBS. Também é feita uma apresentação dos estudos disponíveis na literatura sobre a avaliação de ciclo de vida dos produtos químicos abordados. O Capítulo 3 apresenta a metodologia empregada para realização da avaliação de ciclo vida proposta, envolvendo as declarações de escopo e objetivo e as rotas mapeadas para realização

Capítulo I – Introdução

do inventário do ciclo de vida. É feita também a descrição do método de cálculo utilizado para a avaliação de impactos. O Capítulo 4 disserta em seguida sobre os resultados obtidos a partir da avaliação de ciclo de vida, propondo algumas interpretações e discussões sobre os achados. O Capítulo 5 apresenta as principais conclusões obtidas acerca do presente trabalho e sugere alguns temas para próximos trabalhos. Finalmente, o Capítulo 6 apresenta as referências bibliográficas consultadas no desenvolvimento da dissertação.

O presente trabalho foi integralmente desenvolvido no Laboratório de Engenharia de Polímeros (EngePol) do Programa de Engenharia Química (PEQ) do Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós-Graduação e Pesquisa em Engenharia (COPPE) da Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ).

Capítulo 2

Fundamentos Teóricos e Revisão Bibliográfica

2.1 Polímeros

Polímeros são macromoléculas formadas a partir da união de moléculas menores, chamadas genericamente de monômeros, através de ligações covalentes. As reações que transformam as moléculas de monômero são chamadas de reações de polimerização e as unidades repetitivas ao longo das cadeias poliméricas, resultantes da incorporação dos monômeros, são chamadas de meros (MANO e MENDES, 1999).

As propriedades dos polímeros dependem muito do tamanho das moléculas, da composição, da estrutura química e das interações intra e intermoleculares (MANO e MENDES, 1999), justificando a grande quantidade de diferentes tipos (ou *grades*) de materiais poliméricos que existem. Esta grande variedade afeta as aplicações finais e as utilidades desses materiais, explicando em parte a versatilidade dos materiais plásticos¹ produzidos (PINTO *et al.*, 2012).

2.2 Os polímeros e os desafios de seu modelo econômico atual

O estilo vida moderna, como se conhece, seria impossível sem a existência dos materiais poliméricos. Conhecidos por poderem apresentar uma ampla gama de diferentes propriedades mecânicas, associadas a um baixo custo de produção, o emprego deste material usualmente torna produtos e tecnologias mais acessíveis e eficientes. Um exemplo é o uso em automóveis, que além de diminuir o custo de produção, também os torna mais leves, o que resulta em menor

¹ Plásticos são materiais poliméricos que fundem reversivelmente, embora o jargão da área, usado com frequência no presente texto, use essa mesma palavra como sinônimo de material polimérico.

uso de combustíveis (UNEP, 2014). Outro exemplo é o uso na medicina, que se beneficia dos materiais poliméricos de várias formas, incluindo desde o desenvolvimento de fármacos cada vez mais eficientes e seguros até o uso como materiais hospitalares descartáveis, na forma de utensílios cirúrgicos, seringas, máscaras, entre outros, que, além de evitarem contaminações cruzadas, ainda permitem que tais aparatos atendam à demanda de uso da população. Adicionalmente, são utilizados amplamente para a fabricação de embalagens, prolongando a vida útil de alimentos (GEYER *et al.*, 2017). Além disso, estima-se que indústria de plásticos congregue 12,1 mil empresas e gere 323 mil empregos no Brasil (FAPESP, 2019).

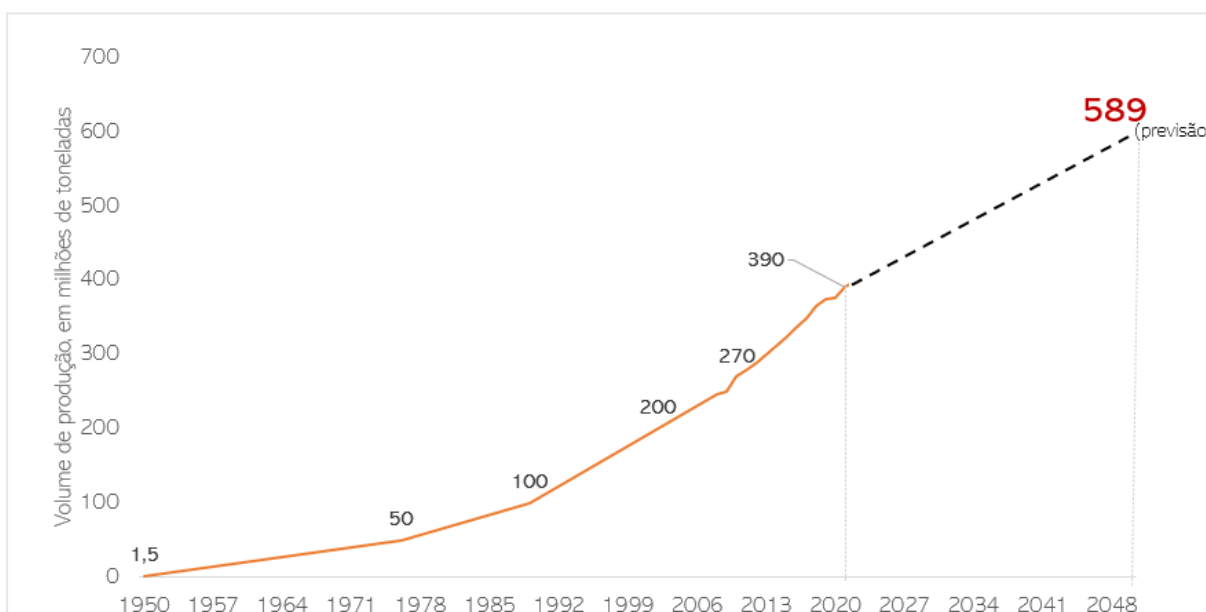


Figura 2-1: Produção global de plásticos, desde 1950 (adaptado de STATISCA, 2023)

Na esfera ambiental, a produção e uso de materiais poliméricos também promove a redução de alguns impactos ambientais. Um relatório elaborado pela Plastics Europe, em 2017, afirma que se outros materiais, que não os plásticos, fossem utilizados para a fabricação de embalagens, a massa usada para a produção desses envoltórios aumentaria em cerca de 3,6 vezes, aumentando o consumo energético para o transporte dos produtos e levando ao aumento das emissões dos gases do efeito estufa (GEE) em cerca de 2,7 vezes. Um outro estudo da Braskem, que compara os desempenhos ambientais de kits cirúrgicos de algodão e de não tecido (polipropileno), indica que a segunda opção resulta em menor impacto ambiental e reduz em

trinta e duas vezes o consumo de água, ainda que possa estar atrelada a uma maior geração de resíduos de natureza reciclável (BRASKEM, 2022).

Apesar de tantos ganhos para a sociedade, o meio ambiente e a economia, muitos impactos negativos podem estar associados ao ciclo de vida desses materiais. Exemplos incluem o uso de aditivos químicos na produção, que podem escapar para o meio ambiente, contaminando solo e água e causando doenças à população local, aos consumidores e aos trabalhadores da indústria (UNEP, 2014). O descarte inadequado dos materiais plásticos também deve ser considerado nessa equação, dados os prejuízos econômicos, ambientais, sociais e estéticos da poluição gerada em aterros sanitários e no meio ambiente. Por fim, a produção destes materiais ainda se baseia majoritariamente no consumo de matérias primas fósseis virgens oriundas do petróleo, o que inclui a produção de monômeros e de aditivos químicos utilizados na manufatura.

Por todas essas razões, a opinião pública sobre os materiais plásticos é geralmente negativa. Dessa forma, existem até o presente momento ao redor do mundo 53 políticas; em âmbito regional, federal e municipal, que restringem ou banem o uso de materiais plásticos, geralmente artefatos de único uso, como sacolas e canudos (CHATAMHOUSE, 2022).

Muitos dos impactos negativos descritos são consequências do modelo produtivo atual, no qual impera a mentalidade linear, por meio da qual recursos são extraídos, utilizados e descartados. WEF (2016) aponta que a maioria dos plásticos é descartada após um rápido uso único, gerando uma perda econômica anual estimada entre 80 e 120 bilhões de dólares. Nesse processo, 14% da quantidade total de lixo plástico seria destinada à recuperação energética ou incineração; 40% seria destinada a aterros sanitários; 32% seria disposta sumariamente na natureza, poluindo ecossistemas marinhos e terrestres; e apenas 14% seria coletada para reciclagem (WEF, 2016).

Pelo que se vê, é urgente a migração desse modelo de negócios para um modelo regenerativo. O conceito de economia circular introduz essa perspectiva, na qual o crescimento econômico é desacoplado do consumo de recursos e emissões poluentes, na medida em que os materiais, ao fim dos respectivos ciclos de vida, são vistos como recursos ao invés de resíduo para descarte. Isso caracteriza modelos econômicos que se configuram como ciclos fechados,

mitigando a necessidade de que matérias primas virgens sejam produzidas em larga escala e que seja feito o descarte dos resíduos (ELIA *et al.*, 2017).

WEF (2016) propõe um modelo circular especificamente para os plásticos, declarando três grandes ambições:

1. Criar um fim de vida eficiente para materiais plásticos, promovendo processos de reciclagem vantajosos economicamente ou de biodegradação para certas aplicações;
2. Reduzir drasticamente a disposição de materiais plásticos em ecossistemas naturais;
3. Desacoplar a produção de plásticos virgens de recursos fósseis, optando-se por recursos de fonte renovável.

Sendo assim, para atingir um ciclo produtivo sustentável para os plásticos, fica clara a necessidade de não apenas encontrar soluções para o gerenciamento de seu fim de vida, mas também de estimular o desenvolvimento de novos polímeros oriundos de matérias primas renováveis e dos respectivos processos de produção. O panorama dessa nova geração de polímeros é aprofundado a seguir.

2.3 Os plásticos verdes

A maioria dos monômeros utilizados para a síntese de polímeros, como polietileno (PE) e polipropileno (PP), é derivada de hidrocarbonetos fósseis (GEYER *et al.*, 2017). No entanto, os primeiros polímeros utilizados pelo homem eram baseados em materiais naturais (por exemplo, caseína, gelatina, celulose, borracha natural, entre outros), o que significa que os polímeros úteis eram originalmente oriundos de fontes renováveis (ifBB, 2021). Apenas a partir de meados do século XX, com o domínio da indústria petroquímica e da tecnologia de polimerização, que surgiram os polímeros comerciais de origem petroquímica. Hoje, por conta das preocupações ambientais e devido à natureza finita dos recursos fósseis, os plásticos verdes voltam a ser objeto de interesse políticas, da indústria, do público em geral, e da comunidade científica.

O termo “plástico verde” é utilizado com pouca clareza, geralmente buscando fazer alguma alusão de que o material pode ser benéfico ao meio ambiente ou tem origem natural.

Nesse sentido, há uma confusão sobre a definição mais apropriada, discutindo-se se um plástico verde é um material de origem renovável, se é compostável, se reduz impactos ambientais em relação a possíveis concorrentes, ou tudo isso. Nesse contexto, faz-se necessário o esclarecimento sobre as possíveis atribuições que o termo plástico verde pode popularmente conter.

Ao dizer que um plástico é de origem renovável, diz-se que os monômeros selecionados (ou ao menos uma parte deles) são produzidos por uma rota que tem origem em uma matéria prima que seja regenerativa em algum ciclo natural, como biomassa, resíduos ou até mesmo gases, como dióxido de carbono e metano (WEF, 2016). Além disso, o polímero pode ser ele mesmo obtido diretamente de uma fonte renovável, como celulose e o amido. Atender a esse critério é suficiente para que um plástico seja chamado de verde ou de bioplástico.

Já o termo “compostável” se refere a uma opção de fim de ciclo de vida do material, por meio da qual ele é passível de compostagem caseira ou industrial e atende aos critérios específicos para um ambiente específico (WEF, 2016). Esse termo também é confundido com “biodegradável”, que se refere a um material que é passível de degradação por microrganismos, liberando idealmente água e dióxido de carbono no processo (DUTRA *et al.*, 2019)

Um plástico de origem renovável não é necessariamente compostável ou biodegradável. O polietileno (PE) verde da Braskem, por exemplo, tem propriedades idênticas às do polietileno de origem petroquímica, o que inclui a não biodegradabilidade (BRASKEM, 2018). O desempenho dos dois produtos é rigorosamente idêntico, pois ambos são constituídos por cadeias de polietileno. A única diferença entre eles é a origem do eteno utilizado no processo: enquanto eteno utilizado para manufatura do PE petroquímico tem origem petroquímica, o eteno utilizado para fabricar o PE verde é oriundo da desidratação do etanol, obtido da fermentação do caldo de cana-de-açúcar (MARQUES *et al.*, 2019)

No processo de desenvolvimento desses novos materiais é possível avaliar outras classificações. Os chamados *drop-ins* são biopolímeros que apresentam propriedades mecânicas e químicas idênticas às dos polímeros petroquímicos, como PE verde ou polipropileno (PP) verde. De outro lado, observam-se os chamados novos materiais, que são polímeros produzidos a partir de moléculas obtidas por rotas renováveis e que apresentam o

potencial para competir com um plástico convencional de origem fóssil em uma certa aplicação, porém apresentando um desempenho diferente (WEF, 2016). A Figura 2-1 mostra as possíveis substituições de plásticos de origem petroquímica por novos materiais.

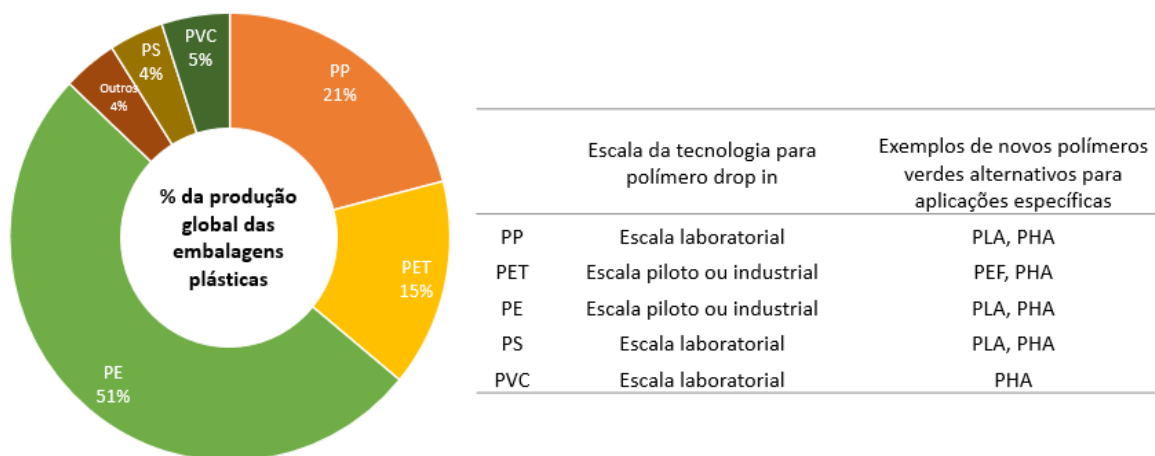


Figura 2-2: Polímeros aplicados em embalagens e possibilidades de substituição por novos materiais de origem renovável (adaptado de WEF, 2016).

Atualmente, a produção de plásticos de origem renovável equivale a cerca de 19 milhões de toneladas anuais, representando 6% do volume de plásticos produzidos globalmente. Vale ressaltar que os polímeros naturais, como borracha natural e celulose, ainda fazem parte desse nicho de mercado, sendo essa produção global avaliada em 17 milhões de toneladas anuais (ifBB, 2021). Vê-se, portanto, que os novos materiais ocupam fração ainda extremamente pequena do mercado global de plásticos. Na verdade, a comparação mostra que a produção de plásticos verdes modernos é quase 10 vezes menor que a dos plásticos verdes convencionais, ocupando uma fração de 11% do mercado de plásticos renováveis.

Atualmente, a produção de bioplásticos ainda não se mostra economicamente competitiva com as rotas de produção convencionais na maior parte dos casos. Plásticos de origem fóssil se beneficiaram de décadas de produção em larga escala, o que viabilizou a otimização de parâmetros de processos e, portanto, dos custos. Em contrapartida, bioplásticos ainda não são produzidos em larga escala e muitos ainda enfrentam desafios para o escalonamento (WEF, 2016). Ainda assim, o SP atual apresenta crescimento, sendo que a

capacidade de produção de plásticos verdes, incluindo a previsão para 2027, é apresentada na Figura 2-2.

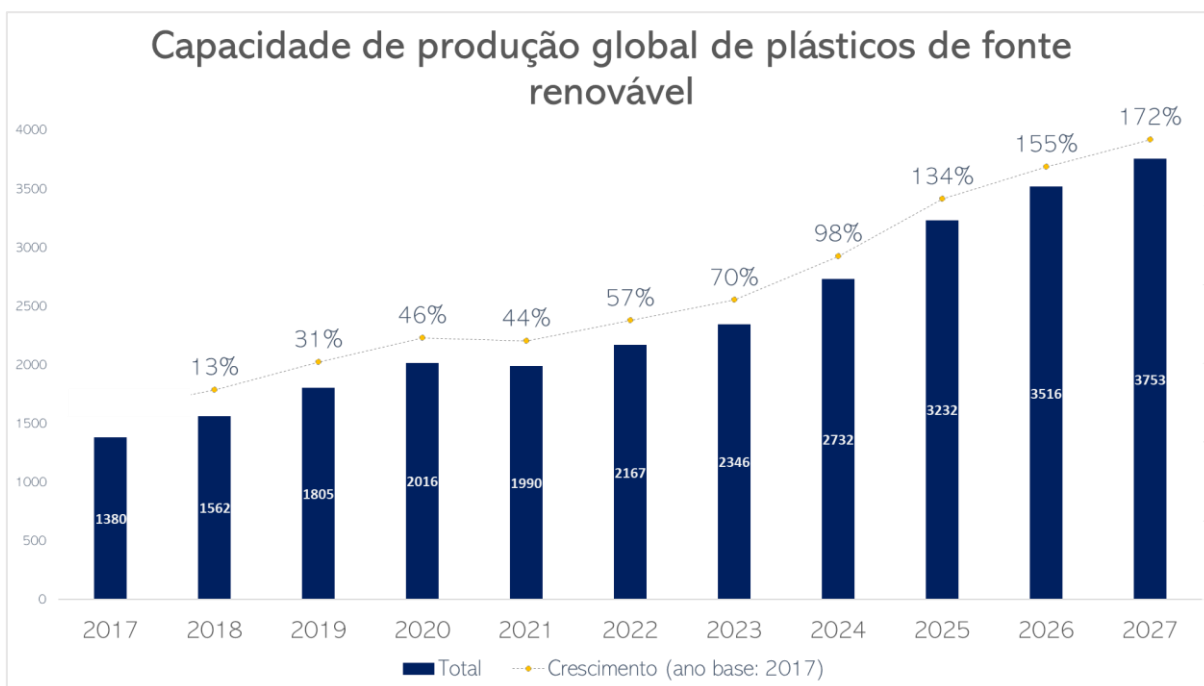


Figura 2-3: Capacidade de produção global de plásticos renováveis (adaptado de ifBB, 2022).

Além dos desafios econômicos, um dos principais desafios associados ao desenvolvimento de processos renováveis é que esses podem fazer uso intensivo do consumo de energia e água ou apresentar baixos rendimentos em relação às tecnologias mais convencionais (MORALES *et al.*, 2016). Desta forma, não é possível afirmar que um processo se qualifica como sustentável, do ponto de vista ambiental, apenas por ser biodegradável ou proveniente de fonte renovável. Por essa razão, um estudo mais complexo sempre é necessário para avaliar todos os impactos ambientais envolvidos no processo produtivo e afirmar a sustentabilidade ambiental de um novo produto ou processo. Para tanto, uma opção é realizar uma avaliação do ciclo de vida (ACV), ferramenta fundamental para analisar o desempenho ambiental dos produtos, tendo em conta o ciclo de vida completo de um material, envolvendo desde o período relativo à extração das matérias primas até o descarte final dos resíduos resultantes.

2.4 Avaliação de Ciclo de Vida (ACV)

A avaliação de ciclo de vida (ACV) é uma metodologia científica baseada em padrões internacionais (INTERNATIONAL STANDARD ORGANIZATION, 2006) que tem como objetivo quantificar os impactos ambientais associados ao ciclo de vida de um processo, produto, serviço ou sistema. A técnica consiste na quantificação de todas as entradas e saídas materiais, emissões e resíduos associados a um processo, produto ou serviço, a fim de avaliar todos os possíveis impactos ambientais gerados (GOEDKOOOP *et al.*, 2016). A avaliação é composta usualmente por 4 etapas, resumidas na Figura 2-3. Em seguida, será feito um resumo de cada uma dessas etapas.



Figura 2-4: Estrutura usual de um ACV (adaptado de GOEDKOOOP *et al.*, 2016)

A primeira etapa de um ACV é a definição de objetivo e escopo. Um objetivo e escopo claros são fundamentais para a continuidade consistente das avaliações, uma vez que todos os aspectos e suposições definidos nessa etapa são considerados em todas as próximas fases da ACV (DUALIBE *et al.*, 2019). O objetivo deve abordar de forma clara a aplicação pretendida, motivação do estudo, declaração se o estudo trata de uma investigação comparativa ou não e o público alvo.

O escopo deve propor claramente o sistema a ser estudado e a respectiva finalidade, identificando: a função, a unidade funcional e o fluxo de referência adotados; os sistemas de produto e a fronteira do sistema; os procedimentos de alocação adotados; as categorias de impactos; os requisitos de dados; as suposições e as limitações do estudo; os requisitos de qualidade dos dados; o tipo de revisão crítica e tipo de formato de relatório (INTERNATIONAL STANDARD ORGANIZATION, 2006). Alguns dos elementos do escopo serão aprofundados a seguir.

A função consiste no propósito do produto ou sistema e a unidade funcional é a unidade base para a quantificação da função (ou funções) identificada(s). A unidade funcional fornece uma referência quantitativa das entradas e saídas do sistema analisado e permite que todas as atividades e serviços possam ser analisados e comparados com base em uma mesma unidade (REBITZER *et al.*, 2004). É importante enfatizar que a unidade funcional é o principal conceito em um estudo de comparação de diversas alternativas, uma vez que permite a comparação em uma mesma base e, portanto, deve ser cuidadosamente determinada (MONTEIRO *et al.*, 2018). Dessa forma, a unidade funcional deve ser claramente definida e mensurável, para assegurar que a comparabilidade dos resultados seja praticamente crítica quando diferentes sistemas estão sendo avaliados (DUALIBE *et al.*, 2019).

O sistema de produto (SP) compreende o conjunto de unidades de processos, conectados material e energeticamente, e que realiza uma ou mais funções definidas. Além do sistema, a fronteira do sistema deve ser bem definida, pois ela determina todos os processos e os fluxos ambientais de entrada e saída a serem considerados no estudo da ACV. Além dos processos poderem estar inter-relacionados de forma complexa, a definição da fronteira do estudo constitui uma decisão subjetiva, exigindo que os critérios adotados para a demarcação sejam claramente definidos (DUALIBE *et al.*, 2019).

As fronteiras são formuladas com base no escopo e podem, ou devem, ser reformuladas a medida em que novos dados são coletados ou não são encontrados de acordo com a definição inicial. As fronteiras podem ser entre o sistema e o ambiente, entre o sistema e um ou mais outros sistemas relacionados, e pode ser também entre processos relevantes e irrelevantes, para abordar a remoção dos processos da análise. Dessa forma, todos os dados de saída e entrada, que são relacionados com a unidade funcional e limitados de acordo com a fronteira do sistema,

são coletados e quantificados (VALT *et al.*, 2004). São consideradas quatro diferentes abordagens de análises de ciclo de vida que irão nortear a definição das fronteiras do sistema, são elas (IBICT, 2023):

- ∞ Análise berço-portão (cradle-to-gate): análise desde a extração dos recursos até o portão da fábrica. Não se consideram alguns estágios finais, como o uso e a disposição final do produto.
- ∞ Análise portão-portão (gate-to-gate): análise do processo de manufatura do produto. Não se consideram todos ou alguns estágios iniciais finais;
- ∞ Análise portão-túmulo (gate-to-grave): foco na disposição final do produto. Não se considera impactos da obtenção dos recursos;
- ∞ Análise berço ao túmulo (cradle-to-grave): análise completa desde extração das matérias primas até a fase de eliminação/disposição final do produto.

Os procedimentos de alocação também fazem parte da definição do escopo e consistem na repartição dos fluxos de entrada ou saída de um processo entre o sistema de produto em estudo e outro(s) sistema(s) de produto. Na alocação, as entradas e saídas devem ser alocadas aos diferentes produtos de acordo com critérios claramente definidos e a soma das entradas e saídas de um processo elementar que são alocadas deve ser igual à soma dessas entradas e saídas antes da alocação (DUALIBE *et al.*, 2019).

É importante ressaltar que a norma ISO 14044:2009 coloca como prioritário evitar a alocação, sempre que possível, por meio de divisão dos processos elementares a serem alocados em dois ou mais subprocessos e coleta de dados de entrada e saída relacionados a esses subprocessos ou a expansão do sistema de produto, de modo a incluir as funções adicionais relacionadas aos coprodutos.

Vale ressaltar que a ACV trata de um estudo iterativo e as definições de objetivo e escopo podem ser revisadas a qualquer momento durante a realização da avaliação à medida em que novas informações são obtidas (GOEDKOOOP *et al.*, 2016).

A etapa seguinte à definição do procedimento de alocação é a seleção das categorias de impacto, dos indicadores de categoria e dos modelos de caracterização. Algumas das categorias de impacto que podem ser consideradas em um estudo de ACV são: aumento do teor de acidez

do solo, água e ar (acidificação); aumento dos agentes tóxicos que podem causar danos à biosfera (ecotoxicidade) ou podem causar danos à saúde humana (toxicidade humana); esgotamento de recursos naturais não renováveis, aumento dos buracos na camada de ozônio, entre outros (IBICT, 2023). De acordo com a norma ISO ABNT NBR 14044:2009, a seleção das categorias de impacto deve ser consistente com o objetivo e escopo da ACV. A seleção de categorias de impacto deve refletir um conjunto abrangente de questões ambientais relacionadas ao cenário em estudo, levando em consideração o objetivo pretendido e escopo abordado.

Cada categoria de impacto está associada a um mecanismo ambiental, os quais são definidos como formas de quantificar o impacto causado por uma determinada emissão ou consumo de recursos, vinculando os resultados da análise do inventário do ciclo de vida aos indicadores de categoria e aos pontos finais de categoria. Essa dinâmica será aprofundada em mais detalhes na Seção 3.3.

Seguindo a etapa de seleção de categorias, a etapa de definição dos requisitos de dados é importante para a definição de quais dados devem ser obtidos e da forma como estes dados devem ser obtidos; ou seja, se serão medidos, calculados ou estimados (por especialistas ou com base na literatura). Além dessas opções, os dados também podem ser coletados diretamente ou obtidos de banco de dados. Novamente os dados selecionados são subordinados ao objetivo e do escopo do estudo de ACV (ILCD, 2011).

Em seguida, deve-se colocar com clareza as suposições e limitações do estudo. Como a ACV trata de um modelo, o que se obtém são representações da realidade e, dessa forma, todas as considerações, aproximações, incertezas, etc., do estudo precisam estar registrados com clareza. A necessidade de fazer suposições pode ocorrer na fase de definição da fronteira do sistema, na escolha de categorias de impactos a serem analisadas, na escolha do procedimento de alocação a ser utilizado, entre outros. As limitações do estudo podem estar nos dados desatualizados, no uso de dados fora da realidade do estudo, no uso do balanço de massa, no uso de dados de tecnologias diferentes, etc (CHEHEBE *et al.*, 1998).

Após a declaração do(s) objetivo(s) e escopo do estudo, a avaliação de inventário de ciclo de vida pode ser iniciada. Essa etapa consiste na coleta de dados e nos balanços de massa e energia realizados em função das entradas e saídas das fronteiras do sistema estudado, gerando

o inventário de ciclo de vida (ICV). Os dados devem ser adquiridos para todo o sistema considerado no escopo e devem ser recolhidos em termos de quantidades e tipos de insumos materiais e de tipos e quantidades de insumos energéticos. A descrição de como e onde o dado foi obtido, além de informações adicionais, também é relevante nesse processo (DUALIBE *et al.*, 2019).

Parte dos dados é relacionada a materiais genéricos, ao fornecimento de energia, aos sistemas de transportes e de tratamento de resíduos. Esses dados são chamados de dados de fundo e se referem a sistemas periféricos ao sistema central estudado. São encontrados em bases de dados internacionais, que constituem os Bancos de Dados de Inventário de Ciclo de Vida. Cada banco de dados e respectivas metodologias correspondem a uma realidade local, com dados e informações de um local específico. Por isso, algum cuidado deve sempre ser tomado em relação ao uso desses dados, com comparações críticas em relação à realidade local a que se refere a análise (DUALIBE *et al.*, 2019).

O Programa Brasileiro de Avaliação de Ciclo de Vida, o PBACV, que tem o objetivo de apoiar o desenvolvimento sustentável e a competitividade ambiental da produção industrial brasileira e de promover o acesso aos mercados interno e externo, dando continuidade e sustentabilidade às ações de ACV no Brasil. O banco de dados brasileiro ainda está em formação e, portanto, na maioria das vezes os dados disponíveis se referem a uma aproximação para o resto do mundo (COELHO, 2008).

Após a construção do ICV relacionando as entradas e saídas do(s) processo(s) estudado(s) à unidade funcional, a avaliação de impacto do ciclo de vida (AICV) pode ser iniciada. Essa etapa tem como principal objetivo mensurar a significância dos impactos ambientais potenciais do objeto estudado, utilizando os dados compilados no ICV. Os principais métodos matemáticos que correlacionam as entradas e saídas materiais de um processo à uma ou mais de uma categoria de impacto ambiental são apresentados na Tabela 2-1.

Tabela 2-1 Principais métodos de ACV (adaptado de MENDES et al., 2015)

Método de ACV	Ano	País	Descrição	Detalhamento do método
CML	2002	Holanda	É um manual holandês publicado em 2002 que apresenta diretrizes operacionais para a realização de um estudo passo a passo de ACV, com base nas normas ISO. Método é baseado em uma abordagem midpoint e seus modelos de caracterização foram selecionados através de uma extensa revisão das metodologias existentes no mundo.	(GUINÉE <i>et al.</i> , 2002)
Eco-indicator 99	2001	Holanda	É um método endpoint, que visa simplificar a interpretação e ponderação dos resultados da ACV por meio do cálculo de pontuações únicas (eco indicadores). Entre as aplicações pretendidas está o uso por designers para a tomada de decisão.	(MINISTRY OF HOUSING, 2000)
Ecological Scarcity	2006	Suíça	O método tem como base o princípio "distância do alvo" (Frischknecht <i>et al.</i> , 2009) ao invés de uma avaliação de impacto orientada ao dano (Frischknecht <i>et al.</i> , 2006) e permite ponderação e agregação comparativa de várias intervenções ambientais pelo uso dos chamados ecofatores (Brand <i>et al.</i> , 1998), expressos como ecopontos por unidade de emissão de poluentes ou extração de recursos (Frischknecht <i>et al.</i> , 2009). Trata-se de um método receptivo à inclusão de novos problemas ambientais por meio do cálculo de um ecofator para a nova categoria de impacto (Brand <i>et al.</i> , 1998). Considerando os desenvolvimentos recentes na Suíça sobre efeitos ambientais, bem como a legislação e as metas ambientais europeias, na medida em que são relevantes para a Suíça, além das revisões das normas ISO.	(FRISCHKNECHT <i>et al.</i> , 2009)
EDIP 1997 - 2003	2003	Dinamarca	O método EDIP 97 (Environmental Design of Industrial Products) foi desenvolvido na Dinamarca através do programa Danish EDIP, que representa a Universidade Técnica da Dinamarca (DTU), indústrias dinamarquesas e a Agência de Proteção Ambiental dinamarquesa, e foi financiado pelo Ministério do Meio Ambiente da Dinamarca (WENZEL <i>et al.</i> , 1997). Trata-se de um método midpoint desenvolvido	(WENZEL <i>et al.</i> , 1997)

Capítulo II – Fundamentos Teóricos e Revisão Bibliográfica

Método de ACV	Ano	País	Descrição	Detalhamento do método
			para apoiar avaliações ambientais durante o desenvolvimento de produtos industriais e fornecer fatores de caracterização espacialmente diferenciado	
EPS 2000	1996	Suécia	O EPS 2000 é um método de avaliação endpoint criado para ajudar designers e desenvolvedores de produtos durante a escolha entre dois conceitos de produto e os indicadores de categoria são escolhidos para esse fim, sendo adequados para atribuir valores de categorias de impacto	(STEEN <i>et al.</i> , 1999)
Impact 2002+	Não informado	Suíça	O Impact Assessment of Chemical Toxics, IMPACT 2002+, é um método suíço que propõe a implementação da avaliação combinada midpoint/endpoint ligando todos os tipos de resultados do inventário através de 14 categorias midpoint e quatro endpoint. O escopo do método é válido para o território europeu.	(JOLLIEt <i>et al.</i> , 2003)
Lucas	Não informado	Canadá	O LUCAS (LCIA method Used for a CANadian-Specific context) foi desenvolvido em 2005 pelo Centro de Pesquisa Interuniversitário para o Ciclo de Vida de Produtos, Processos e Serviços (CIRAIG) da Escola Politécnica de Montreal, no Canadá, com o objetivo de fornecer uma metodologia adaptada ao contexto canadense	(TOFFOLETTO <i>et al.</i> , 2007)
Impact World+	Não informado	Canadá, França, Suíça, EUA	O método IMPACT World+ foi desenvolvido diante da necessidade de uma avaliação de impacto regionalizada cobrindo todas as regiões do mundo. Os modelos de caracterização são uma atualização dos modelos existentes nos métodos Impact 2002+, EDIP e LUCAS, o que resultou em fatores de caracterização para diferentes resoluções geográficas, cada um com sua própria incerteza e variabilidade espacial associada	(BULLE <i>et al.</i> , 2019)
ReCiPe	2017	Holanda	O método ReCiPe é uma continuação dos métodos Eco-indicador 99 e CML 2000 que integra e harmoniza as abordagens MP e EP em uma estrutura comum e consistente. Para todas as categorias de emissão princípios e escolhas semelhantes são usados e todas as categorias de impacto da mesma área de proteção têm a mesma unidade de indicador.	(HUIJBREGTS <i>et al.</i> , 2017)

A AICV tem como etapas obrigatórias identificação e seleção das categorias de impactos, dos indicadores de categoria e dos modelos de caracterização; a classificação e a caracterização. A seleção do método a ser utilizado fica a critério do autor do estudo de ACV, devendo-se apenas atentar à seleção daquele método que melhor atende ao objetivo do estudo.

Como a ACV é uma ferramenta que utiliza grande e variada quantidade de dados, que requerem a manipulação para obtenção de resultados. Como tal manipulação requer tempo e recursos computacionais, foram gerados *softwares* para suprir essa necessidade, viabilizando e otimizando diversas pesquisas que envolvem a ACV. Essas ferramentas computacionais têm facilitado o gerenciamento dos estudos, disponibilizando um banco de dados que reduz as dificuldades na coleta de informações, fornecem a avaliação de impactos e interpretação e apresentam resultados de forma compacta e simplificada (RIBEIRO *et al.*, 2009).

Como a AICV consiste em uma etapa iterativa, recomenda-se que as fronteiras sejam revistas, identificando a necessidade de novos refinamentos e dados adicionais. Devem ser realizadas análises de sensibilidade quando necessário e o resultado obtido com o refinamento das fronteiras do sistema deve ser justificado e documentado (RIBEIRO *et al.*, 2009).

A interpretação de resultados deve ser realizada de forma que informações do ICV e da AICV sejam convertidas na forma de conclusões. É importante que as interpretações estejam de acordo com as definições iniciais do objetivo e do escopo e que expliquem as limitações do estudo, realizando uma avaliação crítica com relação à qualidade dos dados e do método de AICV utilizado. Deve ficar claro que todas as etapas de um ACV são iterativas, permitindo rever e revisar as definições iniciais, assim como a qualidade e a natureza dos dados coletados, de forma consistente com o objetivo proposto.

O principal propósito para criação da ferramenta de ACV foi a capacidade de comparar produtos existentes e bem conhecidos; portanto, a maioria dos estudos de ACV foi desenvolvida sob condições e estimativas específicas, associadas a cada aplicação (MONTEIRO *et al.*, 2018). Assim, um estudo de ACV totalmente desenvolvido muitas vezes não pode ser realizado em um estágio inicial de *design* porque as informações necessárias são indisponíveis ou inadequadas (SHIELDS *et al.*, 2011).

A ACV, a princípio, necessitaria de dados consolidados, portanto o processo deveria estar estabelecido e operante, fornecendo dados de chão de fábrica. No caso de um material inovador analisado com ACV, essa condição só poderia ser satisfeita uma vez que o material tivesse sido totalmente desenvolvido e introduzido no mercado (TECCHIO *et al.*, 2016). No entanto, como um estudo de ACV é utilizado como ferramenta de apoio nos processos de tomada de decisão, argumenta-se que é necessária uma expansão do quadro padronizado para superar as limitações da ACV plena, implementando outras abordagens e metodologias (JESWANI *et al.*, 2010). Sendo assim, aceitam-se estudos preliminares com dados de maior incerteza para produtos e processos que ainda se encontram em fases de desenvolvimento, ainda que os resultados apresentem uma maior incerteza.

A ACV, como toda ferramenta, está sujeita a limitações e incertezas. Dependendo das características do processo ou produto, a avaliação pode ser dispendiosa, dada a dificuldade de coleta e a disponibilidade dos dados, exigindo ponderação entre esses elementos e os recursos financeiros e o tempo necessários para o estudo (CHEHEBE *et al.*, 1998; SEO *et al.* 2006). Os resultados das fases de ICV ou AICV devem ser interpretados de acordo com o objetivo e escopo do estudo e a interpretação deve incluir uma avaliação e uma verificação de sensibilidade em relação às entradas, saídas e escolhas metodológicas significativas, visando ao entendimento da incerteza dos resultados. Mais detalhes a respeito da metodologia do estudo de ACV podem ser encontrados na norma ISO 14044:2009.

2.5 Poli(succinato de butileno) (PBS)

O poli(succinato de butileno) é um termoplástico biodegradável, cuja principal aplicação atual é a fabricação de embalagens para as indústrias alimentares e farmacêuticas (GRAND VIEW SEARCH, 2022). A demanda global anual do mercado de PBS é estimada em USD 76,4 milhões, com previsão de crescimento até USD 158 milhões em 2030 (FMI, 2023). Esse crescimento tem sido impulsionado principalmente pela demanda global de materiais biodegradáveis.

O PBS é um poliéster alifático resultante da polimerização por policondensação entre o ácido succínico e o 1,4-butanodiol (Figura 2-4). O PBS é um candidato potencial para o

desenvolvimento de uma economia circular dos plásticos, por ser um polímero que pode ser produzido de forma renovável, biodegradável, compostável e facilmente reciclável por diferentes rotas. Além disso, o PBS é um polímero com boas propriedades mecânicas e térmicas, além de ser um termoplástico facilmente processável. Essas características são muito vantajosas por serem similares às das principais poliolefinas (DUTRA *et al.*, 2019).

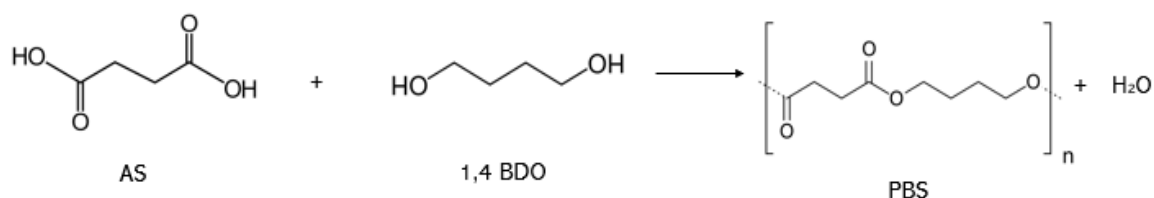


Figura 2-5: Reação usual de polimerização para síntese do PBS.

Os polímeros de policondensação são normalmente produzidos por meio do processo de polimerização em massa, que consiste na reação dos monômeros, na ausência de solventes e na presença de um catalisador, com remoção do subproduto formado (no caso, água) (JACQUES *et al.*, 2013). Nesse processo, a síntese de PBS é normalmente realizada em duas etapas, para permitir o crescimento mais eficiente das cadeias.

A primeira etapa do processo de produção de PBS é chamada de esterificação, ocorrendo a reação entre grupos hidroxila do diálcool e grupos carboxila do diácido. Nela são adicionados os monômeros na presença de excesso de álcool, frequentemente na proporção de 4 partes de álcool para 3 de ácido, sob atmosfera inerte e temperaturas que variam entre 160° a 190°C, por um tempo de residência de 1-3 horas. O excesso de álcool tem o objetivo de garantir o consumo completo dos grupos carboxila, formando oligômeros (cadeias poliméricas com baixas massas molares). A segunda etapa é chamada de transesterificação, ocorrendo a reação entre grupos terminais alcoólicos e levando à eliminação do excesso de diálcool. Essa etapa ocorre a temperaturas entre 200 a 240°C e há uma diminuição considerável da pressão, para facilitar a remoção de subproduto (1,4-butanodiol) do meio e, assim, proporcionar cadeias de maiores massas molares. Essa etapa ocorre geralmente na presença de catalisadores como SnCl₂, trifalatos e ácido p-toluenosulfônico, podendo durar mais de 10h (DUTRA *et al.*, 2019).

DUTRA *et al.* (2019) desenvolveram um processo para obtenção de micropartículas de PBS baseado na policondensação em suspensão dos monômeros, utilizando óleo de soja como fase contínua dispersante. Grandes vantagens competitivas dessa estratégia são a possibilidade de eliminar a etapa de peletização e cominuição posterior dos *pellets* (caso haja interesse na fabricação das micropartículas, como no caso da indústria de cosméticos) e de diminuir o tempo de reação (por conta das trocas de calor e massa mais eficientes no meio disperso que no meio viscoso).

A primeira etapa do processo consiste na dissolução de ácido succínico em 1,4-butanodiol em um tanque agitado, na proporção de 1 parte de álcool para 1 parte de ácido, aquecido a 130 °C por 30 minutos. Em seguida, essa mistura segue para polimerização em suspensão em um reator agitado, sendo a fase contínua o óleo de soja. Essa etapa ocorre entre 160 e 180 °C, sob presença de vácuo e agitação contínua na faixa entre 700 e 800 rpm, sob fluxo contínuo de nitrogênio, com duração aproximada de 90 min. Em uma segunda fase da reação, com o intuito de aumentar o tamanho das cadeias poliméricas, interrompe-se o fluxo de nitrogênio e aumenta-se a intensidade do vácuo, com duração aproximada de 150 min (DUTRA *et al.*, 2019; TOMAZ *et al.*, 2020).

Os dois processos dão origem a PBS's destinados a diferentes aplicações e com desempenhos diferentes, visto que o processo em suspensão fornece um polímero com menor tamanho médio de cadeia e menor diâmetro de partícula, visando a aplicações nas indústrias de cosméticos, produtos farmacêuticos e de nanotecnologia (DUTRA *et al.*, 2019).

Pouco se conhece sobre o desempenho ambiental do PBS frente a outros plásticos de origem renovável e até mesmo materiais de desempenho semelhante e origem petroquímica, muito pela limitação de uma ACV, que demanda o uso de dados robustos e consolidados para seu desenvolvimento. No entanto, é interessante uma avaliação de impactos ambientais para um material inovador em suas primeiras fases de desenvolvimento.

TECCHIO *et al.* (2016) realizaram uma avaliação de ciclo de vida para o PBS, na qual toda a informação necessária para construção do inventário de ciclo de vida foi coletada de estudos de bancada ou em planta piloto, que foram combinadas a simulações termodinâmicas para escalonamento da produção industrial do polímero, chamado de caso teórico. A avaliação

estimou que a emissões de GEE para PET seriam de 2.54 e 2.15 CO₂eq/kg PET, para os casos industrial e teórico, respectivamente. Na avaliação do PBS, o resultado encontrado foi de 6.35 e 5.5 kg CO₂eq/kg PBS, para os casos industrial e teórico, respectivamente. Em seguida, uma avaliação de Monte Carlo foi realizada para aferir a precisão dos resultados. O estudo reforçou a utilidade da metodologia utilizada, tanto em função da fácil reprodução quanto pela consistência dos resultados obtidos.

CHEROENETT *et al.* (2017) compararam o desempenho ambiental de caixas de poliestireno (PS) petroquímico e três tipos de polímeros renováveis: PLA oriundo de cana-de-açúcar, PLA oriundo de mistura de amidos de cana-de-açúcar e PBS oriundo de açúcar de milho e cana-de-açúcar. O estudo foi realizado por meio de ACV, de escopo do berço ao portão, considerando as plantações em províncias da Tailândia. Focou-se em duas categorias de impacto: pegada de carbono e consumo de água doce. O estudo concluiu que as caixas de PBS resultavam no menor consumo de água doce (0.38 m³/kg PBS) e na menor pegada de carbono (0.06 kg CO₂eq/kg PBS) dentre as opções estudadas.

IOANNIDOU *et al.* (2020) avaliaram o desempenho de uma biorrefinaria para produção de PLA e PBS a partir de glicose de milho, palha de milho e polpa de beterraba. A avaliação consistiu no *design* do processo, na avaliação técnico econômica e no estudo ACV. O escopo consistiu numa avaliação de berço ao portão, incluindo o cultivo das matérias primas, a conversão dos açúcares a monômeros (AS, 1,4-BDO e ácido lático) e o processo de polimerização. O estudo sugeriu que realizar esses processos de forma integrada pode favorecer a produção ambientalmente e economicamente sustentável de PBS e PLA, quando comparadas à produção de polímeros homólogos de fonte petroquímica e à produção de um único produto derivado de fonte petroquímica.

2.6 Ácido Succínico (AS) e sua plataforma química

A indústria química tem uma ligação forte com a indústria do petróleo. No entanto, devido às preocupações crescentes acerca da crise ambiental e aos preços flutuantes dos derivados petroquímicos, outras tecnologias têm sido investigadas para substituição desses

compostos. Uma opção cada vez mais explorada inclui os processos bioquímicos, para obter processos mais vantajosos para o meio ambiente e que ainda sejam economicamente viáveis.

Nesse contexto, em 2004, o Departamento de Energia dos Estados Unidos conduziu estudos para avaliar compostos químicos oriundos de fontes renováveis com potencial de substituir insumos de origem petroquímica. Uma série de compostos foi avaliada e foi constatado que essas rotas de produção seriam promissoras e até mesmo economicamente vantajosas. Um dos compostos listados como um dos 10 mais promissores, por conta do potencial para formar uma plataforma química, dando origem a uma série de derivados que podem eventualmente substituir compostos petroquímicos, é o ácido succínico (AS), como mostrado na Figura 2-5.

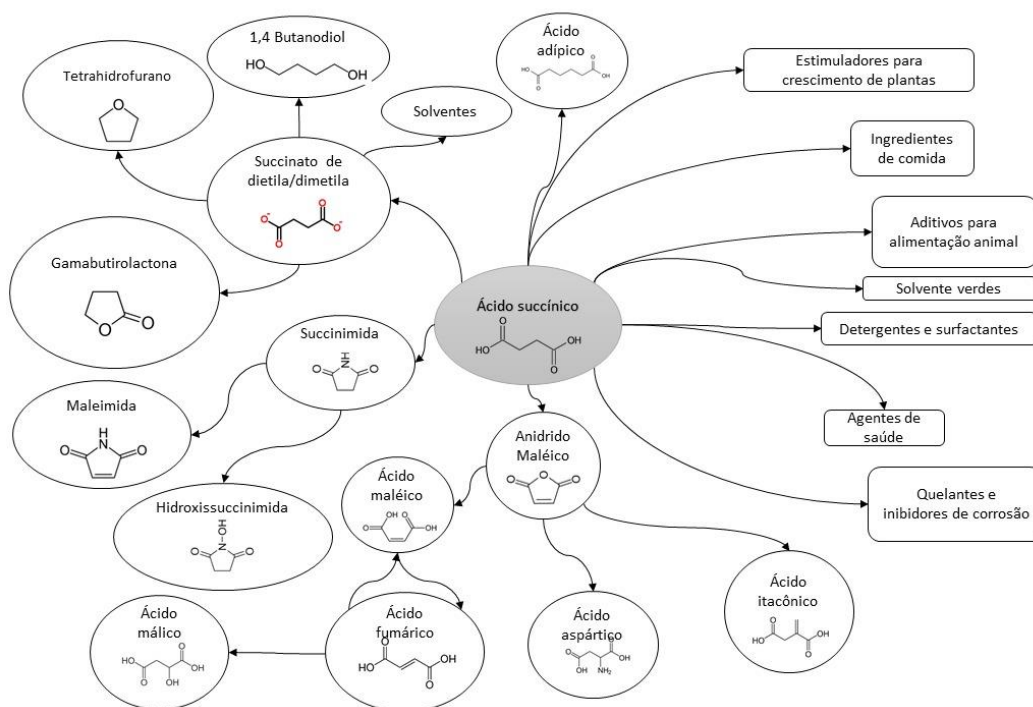


Figura 2-6: Derivados da plataforma química do AS (adaptado de DUTRA et al., 2019).

Tradicionalmente, o AS é empregado como surfactante, agente quelante e aditivo para as indústrias agrícola, alimentícia e farmacêutica (BIDDY, 2016). Em 2021, o mercado de AS foi estimado em USD 222.9 milhões, com previsão de taxa de crescimento anual de 9.7% de 2022 a 2030, ano no qual atingiria o valor de USD 520 milhões (FMI, 2022). O AS também

tem potencial para ser utilizado na síntese do PBS, além de outros poliésteres e polióis, poliuretanos e 1,4-butanodiol (1,4-BDO).

O AS é um ácido dicarboxílico que pode ser produzido por meio da fermentação de açúcares, empregando bactérias naturais extraídas do estômago de ruminantes, como *Actinobacillus succinogenes*, *Anaerobiospirillum succiniciproducens*, *Mannheimia succiniciproducens* e *Bacillus fragilis* e alguns fungos das espécies *Fusarium*, *Aspergillus* e *Penicillium* (AHN *et al.*, 2016). Uma desvantagem de utilizar um microrganismo natural é que eles apresentam baixa capacidade de produzir todas as vitaminas e aminoácidos necessários para seu crescimento, o que requer a preparação de meios de cultura muito complexos (JANSEN *et al.*, 2014). Uma opção avaliada é o uso de cepas geneticamente modificadas de bactérias que demandam meios menos complexos, como *Escherichia coli* (VEMURI *et al.*, 2002).

Em particular, produtores naturais como *Actinobacillus succinogenes* não suportam baixos valores pH. Sendo assim, uma vez que a produção de ácido se inicia, e conseqüentemente ocorre a acidificação do meio de cultura, ocorre a morte das células, levando à interrupção da produção de AS (FERONE *et al.*, 2019; MANCINI *et al.*, 2020). Por essa razão, é necessário fazer o controle do pH para que a rota biológica seja viável economicamente (JANSEN *et al.*, 2014). Existem duas estratégias empregadas para esse fim: adicionar uma base continuamente ao meio de fermentação, de forma que o pH seja constante e neutro, a chamada fermentação neutra; ou usar uma cepa geneticamente modificada que possa suportar níveis mais baixos de pH, classificada como uma fermentação ácida. Vale ainda ressaltar que o método empregado para purificação dos compostos obtidos está intrinsecamente conectado com o microrganismo, substrato e natureza de fermentação escolhida (NGHIEM *et al.*, 2017).

Para produção de ácido succínico a partir de uma fonte biológica, existem três tipos de biomassa principais: recursos agrícolas ou florestais, coprodutos industriais e resíduos alimentícios (VASSILEV e VASSILEVA, 2016). Quando há competição do insumo químico com o mercado de alimentos, a biomassa é classificada como de primeira geração; como no caso do açúcar oriundo da beterraba, do milho ou da cana. Se tal competição for inexistente, classifica-se então o processo ou a biomassa como de segunda geração, como no caso de açúcares oriundos do bagaço de cana, de biomassa lignocelulósica ou do soro de leite. Nesse

sentido, na última década várias companhias localizadas na América do Norte e Europa iniciaram a produção em larga escala de AS empregando diferentes matérias primas e processos, como descrito na Tabela 2-2.

O desempenho ambiental da produção de ácido succínico oriundo de diferentes rotas já foi estudado. COK *et al.* (2014) avaliaram o ciclo de vida, com escopo de berço ao portão, de diferentes rotas produtoras de ácido succínico a partir da dextrose de milho, a fim de investigar o consumo de energias não renováveis e as emissões de GEE para o SP europeu. Avaliaram-se três processos: (i) fermentação ácida com purificação do produto via cristalização; (ii) fermentação neutra a um sal de succinato, seguida de purificação por eletrodialise sem subprodutos; e (iii) um processo análogo a (ii), com geração de succinato de diamônio como subproduto. Os três processos também foram comparados com rotas petroquímicas de produção de anidrido maleico, ácido succínico e ácido adípico. A fermentação ácida resultou nas menores emissões de GEE e consumo de energia, quando comparada aos demais processos baseados em fontes renováveis e petroquímicas, sendo considerado o mais ambientalmente vantajoso para a produção de ácido succínico. Também foi destacado no estudo que, ao alterar a matriz energética para uma mais rica em energia renovável, observava-se uma diminuição significativa nas emissões de GEE associadas a esses processos.

PINAZO *et al.* (2015) realizaram um estudo comparativo entre rotas produtivas das empresas Myriant e Reverdia, considerando matérias primas de origem petroquímica e renovável (grãos de sorgo e beterraba) para produção de ácido succínico. Um grupo de quatro parâmetros foi avaliado: eficiência material (razão da quantidade de resíduos e da quantidade de produto), aspectos econômicos, eficiência energética e uso da terra. Os resultados apontaram que a eficiência energética para a rota renovável era maior e que a eficiência material era menor, quando comparada às rotas petroquímicas.

MOUSSA *et al.* (2016) compararam o desempenho energético e ambiental de AS petroquímico e da produção de AS a partir de biomassa de segunda geração como matéria prima, em uma unidade industrial da Myriant, localizada nos EUA, por meio de uma ACV de escopo do berço ao portão. Os resultados indicaram que o ácido succínico oriundo de fonte renovável resultava em impactos de emissões de GEE e consumo de recursos não renováveis 385% e 1045% respectivamente mais baixos que das rotas petroquímicas.

Tabela 2-2: Rotas industriais para a produção de AS como função do tipo de microrganismo e de processo (adaptado de MANCINI *et al.*, 2020).

Empresa	Capacidade (ton/ano)	Matéria Prima	Microrganismo	Recuperação e Purificação	Potenciais impeditivos/desafios	Localização
BioAmber (planta piloto)	3	Glicose - Trigo	<i>Escherichia coli</i>	Eletrodíálise	Alta demanda de eletricidade	Pomacle, França
BioAmber, Mitsui & Co	30-50	Glicose - Milho	<i>Candida krusei</i>	Evaporação reativa	Não mencionados	Sarnia, Canada
Biosuccinium (Roquette)	10	Amido/ Açúcar	<i>S.cerevisae</i> (recombinante)	Separação direta do AS	Efeito do pH baixo na performance da fermentação	Cassano Spinola, Itália
Myriant	14	Glicose (sorgo ou biomassa lignocelulósica)	<i>Escherichia coli</i>	Precipitação com amônia	Efeito da amônia na fermentação	Lake Providence, EUA

MORALES *et al.* (2016) realizaram uma avaliação multifatorial para rotas de produção consolidadas e em desenvolvimento para a produção de ácido succínico a partir de açúcar de beterraba e resíduos ricos em lignocelulose. As tecnologias de fermentação a alto e baixo pH foram combinadas com métodos de purificação por extração reativa, eletrodialise e troca iônica. Aspectos econômicos, técnicos, ambientais e de segurança de processos foram avaliados, a fim de incrementar uma perspectiva mais ampla de sustentabilidade. Os resultados mostraram que a fermentação em meio ácido combinada com a extração reativa constituía a opção mais vantajosa ambientalmente. O estudo também afirmou que a integração energética é fundamental para que os processos de origem renovável sejam competitivos frente aos processos petroquímicos.

DICKSON *et al.* (2021) avaliaram o desempenho econômico, o impacto ambiental, o risco e a otimização do processo para a produção de ácido succínico a partir de diferentes matérias primas, incluindo glicose, palha de milho, glicerol e *Squatina japonica* (algas). O estudo indicou que o melhor preço de venda era obtido a partir de glicerol (1.6-1.9 USD/kg), seguido pela palha de milho (1.7-2.0 USD/kg). A rota ótima para a produção de AS a partir de glicerol também apresentava o melhor desempenho ambiental, seguida da palha de milho, da glicose e, por fim, da *Squatina japonica*.

2.7 1,4 – Butanodiol (1,4-BDO)

O 1,4-butanodiol (1,4-BDO) é um produto químico comercializado a volumes de venda altos, com um mercado global anual de aproximadamente 2 milhões de toneladas. Suas aplicações são voltadas principalmente para a produção de polímeros de alto desempenho, incluindo plásticos para as indústrias de automóveis e de eletrônicos; para uso esportivo, como tênis, bolas de futebol; e para a fabricação de *spandex* para roupas (BURGARD *et al.*, 2016). O mercado anual global de 1,4-BDO era estimado em USD 7,8 bilhões em 2019, com projeção para alcançar USD 14,5 bilhões em 2026 (SILVA *et al.*, 2020).

As principais rotas de fabricação do 1,4-BDO. são baseadas em derivados do petróleo, sendo quatro processos conhecidos: hidrogenação do anidrido maleico (AM), isomerização do óxido de propileno, acetoxidação do butadieno, e o processo Reppe, que envolve a reação do

formaldeído e acetileno (SILVA *et al.*, 2020). No entanto, com a crescente preocupação em relação às questões climáticas, têm sido buscadas alternativas aos processos tradicionais. Contudo, o processo tradicional de hidrogenação do AM é particularmente interessante, pois esse reagente pode ser substituído pelo AS (PETROCHEMICAL PROCESS, 2005). Dessa forma, o processo tradicional pode se tornar renovável, apenas baseado na substituição da origem do AS. A empresa BioAmber comprou licenças de operação da hidrogenação de AS a 1,4-BDO, pensando em incorporar o processo a sua operação (LI *et al.*, 2021).

Uma alternativa também explorada é o desenvolvimento de rotas fermentativas para a obtenção direta de 1,4-BDO. A Samsung Eletronic, ALG Chem, a Universidade da Califórnia, a Genomatica e a Showa Denko desenvolveram microrganismos capazes de produzir altas concentração de 1,4-BDO a altas taxas de reação; contudo, apenas a Genomatica teve sucesso em comercializar um bioprocessos (GENO BDO™ process), licenciado para Novamont e BASF (SATAM *et al.*, 2019).

FORTE *et al.* (2016) investigaram, por meio de uma ACV de escopo do berço ao portão da fábrica, o desempenho ambiental da produção de 1,4-BDO a partir da fermentação de açúcares de palha de trigo (segunda geração), em uma biorrefinaria hipotética na região de Campania, no sul da Itália. Esse processo industrial revelou a redução de impactos, quando comparado ao processo Reppe, de origem fóssil, para obtenção de 1,4-BDO. Os menores benefícios foram percebidos nas categorias de acidificação e eutrofização, devido à carga ambiental do cultivo de trigo.

2.8 Cana-de-açúcar e o biorrefino no cenário brasileiro

Biorrefinaria é uma instalação que integra processos de diversos processos de conversão de biomassa em biocombustíveis, insumos químicos, materiais, alimentos, rações e energia. Os conceitos de biorrefinaria e da química verde enfocam o aproveitamento da biomassa, de modo que se obtenham cadeias de valor similares àquelas dos derivados do petróleo, mas com menor impacto no meio ambiente. Para isso, processos bioquímicos, microbianos, químicos e

termoquímicos podem ser empregados, visando ao melhor aproveitamento da matéria prima (VAZ JÚNIOR *et al.*, 2013).

Acredita-se que processos de tratamento da biomassa de segunda geração serão predominantes no futuro. Atualmente, no entanto, são mais onerosos em termos energéticos. Além disso, por não constituírem tecnologias maduras, apresentando ainda gargalos em termos logísticos e de produção em escala industrial, podem comprometer a lucratividade e eficiência (inclusive ambiental) dos processos (MARQUES *et al.*, 2019). Por essas razões, esses processos usualmente elevam consideravelmente o custo de produção na atualidade (MANCINI *et al.*, 2020).

O Brasil se encontra em posição privilegiada para assumir a liderança na produção sustentável de insumos químicos pelo fato de possuir um grande potencial no cultivo de matérias primas renováveis, dispor de culturas agrícolas de grande extensão, apresentar a maior biodiversidade do planeta, estar sujeito a intensa radiação solar, apresentar diversidade de clima, água em abundância e pelo pioneirismo na produção de bicompostíveis oriundos da biomassa em larga escala, com destaque para a indústria canavieira e para o etanol (CGEE, 2010). Em particular, a liderança brasileira na produção de bioetanol representa uma oportunidade estratégica em um cenário de crescente demanda global por energia limpa (CGEE, 2009). O país é o maior produtor mundial de cana-de-açúcar (IEA, 2018) e, na safra 2020/21, foi responsável pela produção de 654,5 milhões de toneladas, destinadas à produção de 41,2 milhões de toneladas de açúcar e 29,7 bilhões de litros de etanol (CONAB, 2021). A produção de etanol anidro da cana-de-açúcar é uma rota conhecida e consolidada, e acontece em larga escala no país desde o lançamento do Programa Pro-Álcool, da década de 1970.

De fato, o Brasil possui grandes complexos industriais baseados em matérias primas renováveis e operando de forma competitiva, como o parque sucroalcooleiro e a indústria de papel e celulose (CGEE, 2010). Além disso, na unidade da Braskem de Triunfo-RS, o etanol obtido de cana-de-açúcar é usado como matéria prima para a desidrogenação catalítica a eteno, monômero convertido a polietileno de baixa densidade (PEBD). Deve-se considerar que toda a cadeia de produção de polietileno a partir do etanol consegue fixar cerca de 3,09 toneladas de CO₂ por tonelada do PEBD (BRASKEM, 2018).

Motivados pela importância da indústria da matéria prima no cenário nacional e pelo potencial de fornecer produtos químicos e energia, SEABRA *et al.* (2011) realizaram uma ACV de produtos derivados de cana-de-açúcar, a fim de avaliar as vantagens ambientais competitivas em relação a consumo de energia e emissões de GEE. Para a produção de açúcar, as emissões de GEE estimadas foram de 234 g CO₂eq/kg de açúcar, considerado menor do que na produção de açúcar por polpa de beterraba na Europa. Para o etanol anidro, estimou-se que as emissões de GEE do ciclo de vida de 21,3 g CO₂eq/MJ, o que significa mitigar 80% das emissões do ciclo de vida da gasolina, mesmo considerando que há um percentual de etanol na gasolina.

KLEIN *et al.* (2017) estimaram o impacto econômico de integrar a produção de AS a partir de pentoses de segunda geração da cana-de-açúcar e a uma biorrefinaria que produz etanol de primeira geração e eletricidade. O balanço de massa do processo foi avaliado por meio de simulações de todo o processo. O custo estimado do AS foi de USD 2,32/kg, comparável aos das fontes mais baratas de açúcar.

PATEL *et al.* (2018) realizaram uma ACV para produtos de PBS na Europa, a fim de avaliar os impactos relacionados a uso de energia não renovável (NREU) e gases do efeito estufa (GEE). Os produtos estudados foram bandejas descartáveis e filme para a agricultura, sendo os cenários de fim de vida incineração, compostagem industrial e degradação em terras agricultáveis. O PBS pode ter origem completamente renovável (AS renovável e 1,4-BDO renovável) ou ser parcialmente renovável (AS renovável e 1,4-BDO não renovável). As matérias primas analisadas foram milho (primeira geração), palhas de milho e de trigo, miscantus e madeira dura (segunda geração). Na avaliação de berço ao túmulo, os produtos de PBS renovável de primeira geração resultaram em impactos ambientais semelhantes aos dos homólogos petroquímicos, enquanto os de segunda geração revelaram uma redução de um terço de GEE e NREU, na condição de haver integração energética do processo de geração dos açúcares com os de produção de monômeros. Sem tal, os impactos dos produtos de PBS de segunda geração renováveis foram apenas aproximadamente 15-20% inferiores aos dos produtos de PBS de primeira geração renováveis.

NIEDER-HEITMANN *et al.* (2019) avaliaram os impactos ambientais de seis cenários de uma biorrefinaria de cana-de-açúcar na África do Sul. Os cenários foram: (i) biorrefinaria de ácido itacônico suplementada para energia com carvão; (ii) biorrefinaria de ácido itacônico

autossuficiente em energia; (iii) biorrefinaria de polihidroxibutirato (PHB) autossuficiente em energia; (iv) biorrefinaria de AS e PHB autossuficiente em energia; (v) biorrefinaria de ácido itacônico autossuficiente em energia; e (vi) uma planta de geração de energia e vapor. Para tal, uma avaliação de ciclo de vida do berço ao portão foi realizada para comparação dos desempenhos das rotas investigadas em relação às respectivas versões fósseis dos produtos. Os parâmetros avaliados foram a pegada de carbono e o potencial de escassez de água. A avaliação concluiu que o cenário (iv) é o mais ambientalmente vantajoso, devido ao alto volume de produção de ácido succínico, ao fato do impacto ambiental ser dividido por uma gama de produtos e à vantagem econômica no preço de venda do PHB.

2.9 Comentários Finais

No presente capítulo foram discutidas a importância e a urgência para adaptação do modelo de produção de consumos de materiais para um modelo regenerativo, o qual deve procurar minimizar e gerenciar os impactos ambientais negativos, buscando alternativas para os processos de descarte inadequado dos materiais e de origem petroquímica não renovável dos insumos petroquímicos usados atualmente. Nesse contexto, os plásticos verdes podem exercer um papel central nessa transição, dada a origem renovável e por apresentarem o mesmo desempenho (ou desempenhos similares) a diversos materiais oriundos de fontes fósseis convencionais. Apesar disso, os plásticos verdes estão presentes no mercado global ainda de forma tímida, visto que seus processos de produção ainda não estão tão maduros e desenvolvidos, sendo hoje usualmente mais onerosos em termos de energia e de insumos químicos. Dessa forma, fica clara a necessidade de avaliar o impacto ambiental desses novos processos, a fim de entender se há uma mitigação de danos ambientais que de fato possam justificar essa mudança de paradigma.

Um estudo de ACV constitui um candidato natural para tal avaliação. O estudo de ACV consiste em 4 etapas fundamentais: definição de objetivo e escopo, inventário do ciclo de vida, avaliação de impactos, e discussão de resultados e conclusões. Apesar de ser inicialmente desenhado para processos e produtos já estabelecidos, há a necessidade de avaliar os impactos ambientais nas etapas de *design* de processo. Para isso, podem ser explorados estudos realizados a partir de dados de laboratório, plantas pilotos e simulações.

O PBS é um polímero que tem potencial particular para atender às premissas da economia circular para plásticos. Obtido por meio da reação de polimerização entre AS e 1,4-BDO, a produção do material também tem o potencial de ser estudada de forma integrada. Uma matéria prima em potencial para a produção no Brasil é a cana-de-açúcar, dada sua importância no cenário nacional. Processos dessa natureza constituem uma oportunidade real para instalar a inovação química por meio da agregação de valor às matérias primas renováveis, permitindo assim que o agronegócio brasileiro passe de uma economia de exportação de *commodities* para uma economia de produtos inovadores e de alto valor agregado – a bioeconomia (CGEE, 2010).

Capítulo 3

Metodologia

Neste capítulo é apresentada a metodologia usada para o estudo do ACV ao longo de 3 seções. Na primeira seção são definidos o escopo e o objetivo do estudo. Em seguida, são descritos os processos adotados para confecção do ICV e os métodos utilizados. Por fim, é descrito o método de cálculo usado para avaliação de impactos e é apresentado o embasamento utilizado para a interpretação dos resultados.

3.1 Declaração de objetivo e escopo

O objetivo do presente trabalho é fornecer um conjunto de dados de inventário de ciclo de vida e comparar os impactos associados a sistemas de manufatura de PBS, na região sudeste do Brasil, em 2022. A função do sistema é produzir PBS, portanto a unidade funcional considera será de 1 kg de PBS produzido.

No presente estudo, quatro sistemas de produto serão considerados, sendo eles: PBS de polimerização em suspensão e origem renovável, PBS de polimerização em massa e origem renovável, PBS de polimerização em suspensão e origem petroquímica e PBS de polimerização em massa e origem petroquímica. No caso de polímeros de origem renovável, considerou-se que os monômeros são obtidos a partir do processamento do açúcar de cana-de-açúcar, considerados, então, biocompostos de primeira geração. Será realizada uma avaliação comparativa com seus homólogos de origem petroquímica, e nesses casos, os monômeros serão considerados obtidos por meio do refino de petróleo.

A fronteira do estudo é do berço ao portão de fábrica, englobando a produção de cana-de-açúcar na região sudeste do Brasil, a extração de petróleo e refino a anidrido maleico (AM) a produção de AS, seja por via petroquímica ou fermentativa, a produção de 1,4-BDO, seja por fermentação da glicose de cana-de-açúcar ou hidrogenação do AS, e a produção de PBS, tanto pela polimerização em massa ou pela polimerização em suspensão, todas realizadas na região sudeste do Brasil. Esses sistemas de produto serão aprofundados no presente capítulo.

As rotas de produção de cana-de-açúcar, AS, 1-4 BDO e PBS foram definidos a partir de revisão da literatura. Como existem relatos de mais de uma rota produtiva para cada um dos processos descritos, foi necessária uma avaliação para seleção da rota estudada, na qual levou-se em consideração a adaptação do processo à realidade brasileira e a sua maturidade industrial. Em alguns casos, foi possível obter os inventários do processo de produto (IPP) da literatura. Em outros casos, foi necessário realizar o formalizar os de balanços de massa e energia e construir o IPP do processo. Para tal, optou-se pela simulação do processo em AspenPlus v12.1 (ASPENTECH, 2021), apesar das limitações dos modelos termodinâmicos da ferramenta para sistemas biológicos e poliméricos, aprofundadas na apresentação dos sistemas de produto.

Será também avaliado o efeito da matriz energética utilizada para produção de vapor, considerando uma opção de origem fóssil, o gás natural, e o aproveitamento do bagaço de cana para produção de vapor. Esse estudo será feito apenas nos sistemas de produto de AS.

Desconsiderou-se o transporte entre as unidades no sistema central, de forma que implicitamente se considera a produção integrada desses materiais, já que acontecem na mesma planta industrial. Os processos adotados e as respectivas premissas adotadas serão descritos na Seção 3.2. Supõe-se dados de transporte para os sistemas periféricos, visto que os dados de fundo obtidos de base de dados fazem essas considerações.

Seguindo a recomendação da ISO 44001:2009, evitou-se a alocação nos sistemas de produto, apesar de as rotas de produção de AS e 1,4-BDO produzem coprodutos como etanol, gama-butirolactona (GBL), tetrahidrofurano (THF) e alguns resíduos orgânicos, como proteínas e células. Essas entradas foram consideradas como consequências dos processos de produção, já que seria impossível produzir os insumos desejados evitando a produção desses compostos. Sendo assim, os impactos ambientais associados a esses compostos foram considerados como impactos do PBS e nenhum método de alocação foi necessário. Demais simplificações e suposições serão descritas na apresentação das rotas selecionadas nos itens a seguir.

As categorias de impactos a serem avaliadas são o aquecimento global, a eutrofização da água doce, o uso de terra, a ecotoxicidade terrestre, a depleção de recursos fósseis e o consumo de água, como discutido na Seção 3.3. Essas foram consideradas por conta por se

tratar de um estudo comparativo de recursos renováveis e petroquímicos e essas categorias tem grande relevância para avaliar impactos referentes a exploração da terra e de recursos petroquímicos.

Para os dados de fundo, referentes aos sistemas periféricos e não modelados no presente trabalho, foi utilizada majoritariamente a base de dados *Ecoinvent Allocation at the Point of Substitution (APOS)* versão 3.9.1 (ECOINVENT, 2023). As exceções serão apresentadas e descritas em suas respectivas secções.

Pelo caráter acadêmico e científico do trabalho e pretende-se avaliar diversas categorias de impacto simultaneamente; como as emissões de GEE, o uso de água, o uso de terra e o consumo de recursos não renováveis e energia, adotou-se o método de AICV como ReCiPe (HUIJBREGTS *et al.*, 2017). Trata-se de um método global de avaliação de impactos, o que significa que é capaz de avaliar mais de uma categoria de impacto por vez e e será aprofundado na Secção 3.3.

Esse trabalho é dirigido à comunidade acadêmica e à sociedade, no sentido de avaliar a possibilidade de quantificar os impactos ambientais relativos ao processo de manufatura de PBS, um polímero inovador, em sua fase de projeto. O esquemático do processo é apresentado na Figura 3-1.

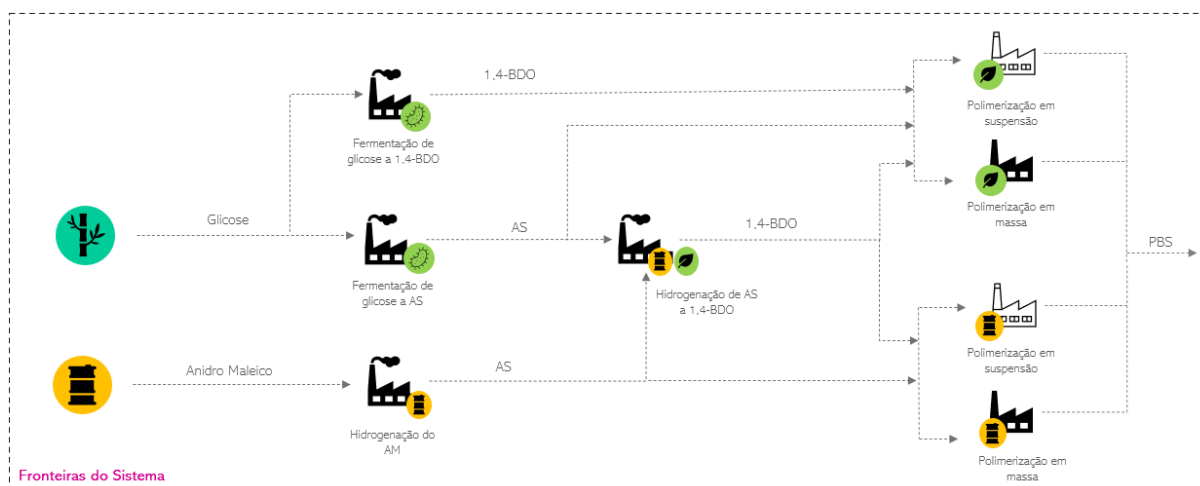


Figura 3-1: Esquemático dos sistemas de produção de PBS

3.2 Inventários de ciclo de vida (ICV)

Como o presente trabalho tratará de um sistema menos complexo, o termo adequado para referência à etapa de ICV é inventário de sistema de produto (IPP). Ambos serão empregados no texto, com o mesmo significado.

As premissas do sistema de produto a serem realizados para obtenção do IPP para a cana-de-açúcar são descritas na Seção 3.2.1; para AS, na Seção 3.2.2; para 1,4-BDO, na Seção 3.3.3; e para PBS, na Seção 3.3.4. O IPP obtido será apresentado na Seção 4.1.

3.2.1 Sistema de produto de glicose e energia a partir de cana-de-açúcar

O sistema de produto (SP) de glicose a partir de cana-de-açúcar foi obtido da base de dados *Agri-foot print* (BLONK, 2023) para a região sudeste do Brasil. O ICV para essa entrada é extraído do trabalho de RENOUF *et al.* (2018), que realizaram um estudo de ACV que definiu como escopo a plantação de cana-de-açúcar até a produção de glicose. O estudo considerou uma plantação de cana mecanizada, com emprego de fertilizantes e nutrientes sintéticos, e que a energia elétrica da planta de açúcar era proveniente do bagaço de cana, subproduto do processo.

Os dados de fundo para energia a de cana-de-açúcar estavam disponíveis na base de dados *Agri-foot print* para a região “resto do mundo”. O sistema considera a queima do bagaço de cana em uma unidade de cogeração de energia.

A mistura de bases de dados deve ser evitada sendo justificada pela ausência do dado necessário na base selecionada. A base *Agri-foot print* pode ser utilizada como uma base complementar a *Ecoinvent* e utiliza dados da mesma como dados de fundo para seus sistemas (BLONK, 2023).

3.2.2 Rotas de produção para AS

3.2.2.1 AS de origem petroquímica

A rota para obtenção de AS de origem petroquímica mais comum é a hidrogenação do anidrido maleico a anidrido succínico, seguida da hidratação do último a AS (PINAZO *et al.*, 2015), como ilustrado na Figura 3-1.

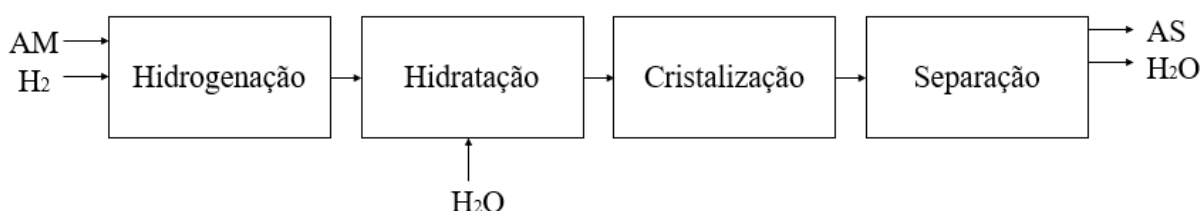


Figura 3-2: Esquema do sistema de produção de AS por hidrogenação do AM (adaptado de PINAZO *et al.*, 2015).

A hidrogenação do anidrido maleico (AM) acontece em um reator em fase líquida, com temperaturas entre 120 e 180 °C, usando hidrogênio a pressões entre 0.5 e 4.0 MPa, geralmente na presença de catalisadores de níquel ou paládio. A etapa de hidratação acontece diretamente por meio da dissolução do anidrido succínico em água quente. O AS é, em seguida, separado por cristalização, filtrado e submetido a um processo de secagem (PINAZO *et al.*, 2015). As entradas materiais e energéticas desse processo já são conhecidas e foram mapeadas por PINAZO *et al.* (2015). Os dados levantados por esse trabalho serão usados como ICV desse sistema e estão descritos na Seção 4.1.1.

3.2.2.2 AS de origem renovável

Para a produção de AS por fonte renovável, optou-se pelo processo de fermentação neutra, seguida de cristalização reativa, descrito em YEDUR *et al.* (2001) e ilustrado na Figura 3-2. Optou-se por esse processo porque ele se inicia com glicose, utilizando um processo de fermentação com menor custo e maior flexibilidade para seleção de microrganismo. Considera-se a formação de sulfato de diamônio (DMS) como subproduto, que pode ser comercializado como fertilizante (NGHIEM *et al.*, 2017).

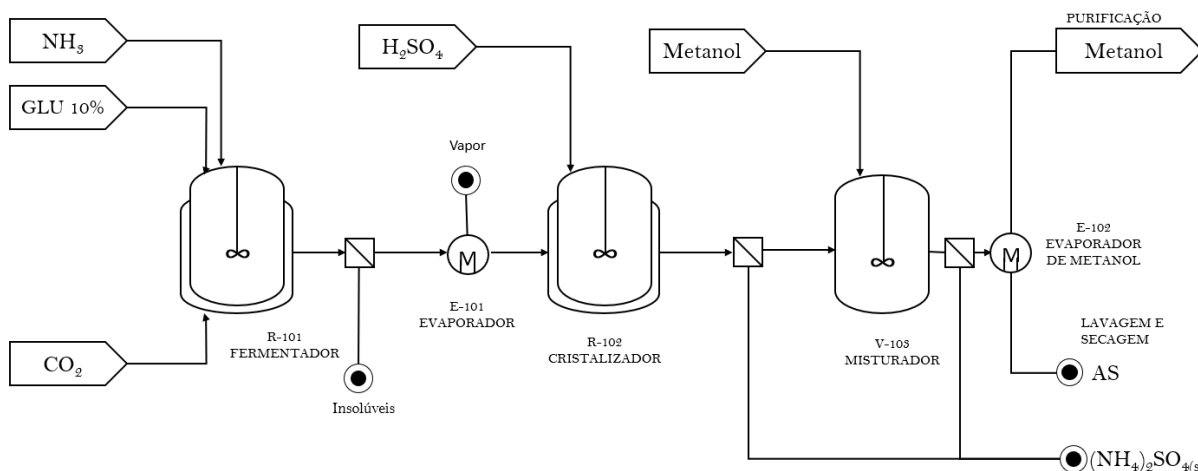
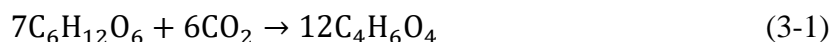


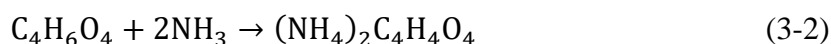
Figura 3-3: Diagrama simplificado de processo para a produção de AS a partir de glicose.

O processo se inicia com a fermentação anaeróbica da glicose a ácido succínico. A fermentação acontece na temperatura de 37 °C, mantida constante pela camisa no fermentador. A cepa industrial de *Actinobacillus succinogenes* (YEDUR *et al.*, 2001) compatível com o processo, apresenta rendimento de 0,77 mol de ácido succínico por mol de glicose. A reação simplificada da fermentação é ilustrada na Equação (3-1) a seguir.



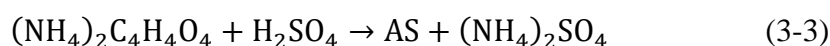
Não é possível considerar qualquer formação de subproduto útil nesse tipo de fermentação (MORALES *et al.*, 2016). Os coprodutos habituais para fermentação de glicoses a AS são outros ácidos orgânicos, mais comumente o etanol, o ácido fórmico ou o ácido láctico (NGHIEM *et al.*, 2017). Como declarado na Seção 3.1, os impactos ambientais associados a esses compostos foram considerados nulos. Sendo assim, o atual estudo desconsiderou a caracterização dos coprodutos formados nessa etapa do processo.

Amônia é adicionada ao meio, a fim de manter o pH neutro, já que o microrganismo é sensível a variações de pH. A reação de neutralização acontece simultaneamente à reação de fermentação e pode ser representada pela Equação (3-2).



A fermentação é seguida por uma etapa de filtragem, a fim de remover insolúveis em suspensão do efluente do reator. Como a reação de neutralização é total, não se espera identificar ácido succínico nessa corrente. Considerou-se ainda que a vazão de insolúveis era desprezível frente ao efluente do reator (YEDUR *et al.*, 2001.) de maneira que essa corrente não foi considerada como efluente e foi desconsiderada do ICV.

A separação do ácido succínico ocorre por meio de cristalização. Nesse processo, acontece a adição de ácido sulfúrico ao meio, provocando a precipitação do ácido succínico. Essa reação pode ser aproximadamente descrita pela Equação (3-3):



Essa etapa acontece a 20 °C (MORALES *et al.*, 2016). O efluente sólido da cristalização consiste em AS sólido contaminado com sulfatos. O efluente líquido consiste em uma solução de $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ (DMS).

A última etapa de purificação consiste na dissolução do ácido AS em solução de metanol, para remoção de sulfatos, insolúveis em uma mistura de metanol e água com alta concentração de metanol (YEDUR *et al.*, 2001). A mistura líquida de AS-metanol segue para evaporação de metanol e purificação do AS. O metanol é condensado e pode ser reciclado no processo (YEDUR *et al.*, 2001). Considerou-se que essa reciclagem seria possível por 10 ciclos. O produto do processo é AS 99.9% m/m, como especificado para a polimerização.

O processo descrito acima foi simulado em AspenPlus v12.1 (ASPENTECH, 2021) para formalização dos balanços de massa e energia, não se tratando de uma simulação rigorosa, tendo em vista as limitações do simulador para prever a solidificação do AS, a dissolução de AS em metanol e a precipitação de sulfatos. Todavia, foi possível descrever as entradas materiais e energéticas do processo, suficientes para elaboração do IPP para o AS de fonte renovável.

Como mencionado na Seção 2.8, um dos principais pontos para viabilização de uma biorrefinaria é a integração dos processos em massa e em energia. Uma prática comum em unidades sucroalcooleiras é a utilização do bagaço de cana como combustível para produção de calor (MARQUES *et al.*, 2019). Para o sistema de produto petroquímico, selecionou-se gás natural como combustível da planta. No presente trabalho, a fim de avaliar a relevância da

natureza do combustível utilizado na avaliação ambiental, simulou-se um caso de fermentação de glicose a AS, utilizando gás natural como combustível.

3.2.2.3 Sistema de produtos do AS

O presente trabalho, então, engloba três sistemas de produção de AS, descritos a seguir. O resultado da IPP será apresentado na Seção 4.2.

- ∞ SP 1: AS produzido a partir do anidrido maleico petroquímico, via hidrogenação seguida de hidratação com separação via cristalização. Todo vapor utilizado é produzido a partir do gás natural.
- ∞ SP 2: AS produzido a partir da glicose de cana-de-açúcar, via fermentação neutra e cristalização. O vapor é produzido a partir do gás natural.
- ∞ SP 3: AS produzido a partir da glicose de cana-de-açúcar, via fermentação neutra e cristalização. O vapor é produzido por meio da queima bagaço de cana-de-açúcar.

Antes de seguir para o próximo sistema da sequência, uma avaliação comparativa desses processos será realizada. Para a ACV do 1,4-BDO e do PBS, serão mantidos os casos do AS fóssil e do AS renovável com melhores desempenhos ambientais.

3.2.3 Rotas de produção de 1,4-BDO

3.2.3.1 Hidrogenação do AS

Para a produção do 1,4-BDO, foi selecionada a hidrogenação do anidrido maleico em fase gasosa, como descrito em SHARIF e TURNER (1986) e na Figura 3-4. O processo é particularmente interessante porque o anidrido maleico pode ser substituído pelo ácido succínico (PETROCHEMICAL PROCESS, 2005). Dessa forma, o 1,4-BDO pode ter origem tanto petroquímica quanto renovável, a depender a origem do ácido succínico.

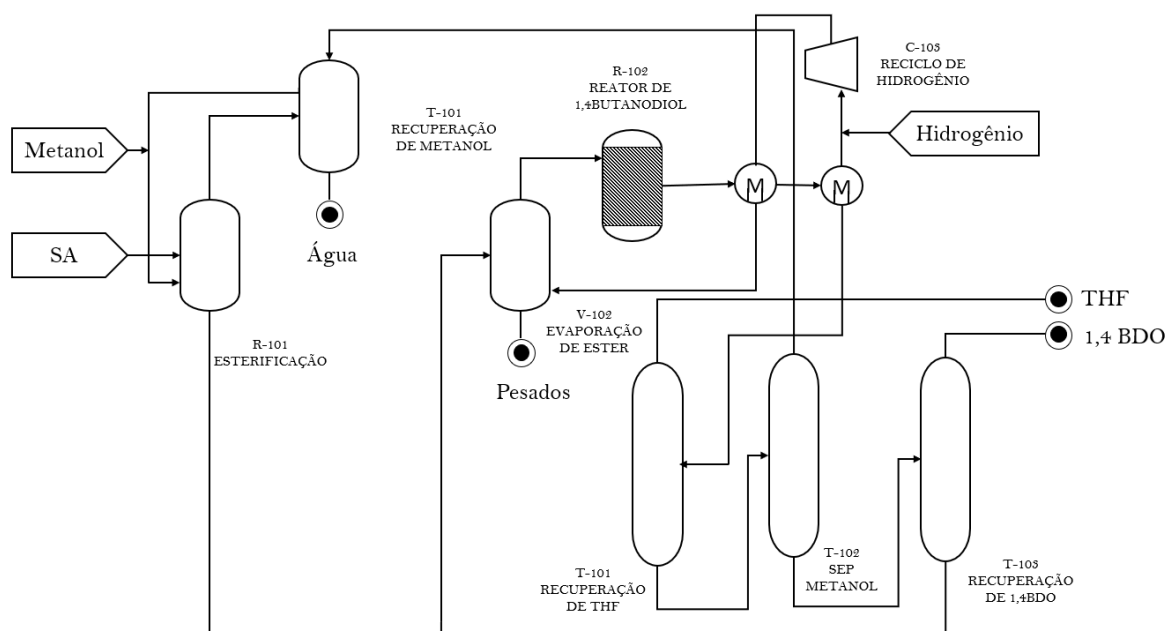


Figura 3-4: Diagrama de processo simplificado da produção de 1,4-BDO.

O processo se inicia com a esterificação do ácido succínico e metanol a dimetilsuccinato em fase gasosa. O reator R-101 consiste em uma coluna de reação (JM, 2021) na qual é possível realizar a reação em alguns estágios de equilíbrio e separar o éster das demais espécies presentes na reação, simplificadas no presente trabalho como sendo apenas metanol e água. Após separado da água, o excesso de metanol é reciclado ao processo. A corrente de éster segue então para a etapa de evaporação com hidrogênio.

A hidrogenação do dimetilsuccinato a 1,4-butanodiol ocorre em 2 etapas. Na primeira, o éster é hidrogenado a gamabutillactona (GBL). Na segunda etapa, GBL é hidrogenada a 1,4-BDO e tetrahydrofurano (THF).

A purificação dos produtos acontece por uma sequência de destilações. Na primeira torre, água e metanol são recuperados no topo. O produto de topo passa então por outra coluna de destilação, gerando uma corrente de metanol, reciclada para etapa de esterificação, e uma corrente de água, considerada efluente do processo. O produto de fundo da primeira coluna consiste em uma mistura de GBL e 1,4-BDO, que também passa por outro processo de separação, que produz uma corrente de GBL e uma corrente de 1,4-BDO.

Esse processo é conhecido e já foi mapeado por PETROCHEMICAL PROCESS (2005). Os dados fornecidos pela revista foram utilizados para o ICV e são apresentados na Seção 384.1.2.

3.2.3.2 Fermentação da glicose a 1,4-BDO

A fermentação ocorre em dois estágios, ambos operados em condições aeróbicas e livres de quaisquer outros microrganismos. O processo utiliza uma cepa geneticamente modificada de *Escherichia coli*. O primeiro estágio ocorre em um fermentador em batelada, no qual a glicose é convertida a 1,4-BDO e subprodutos, como etanol, sais de acetato, GBL e THF. A fermentação ocorre em regime de semibatelada, por 37 h. A alimentação de glicose só cessa nas proximidades do final da campanha, a fim de maximizar o rendimento do produto e minimizar impurezas.

O segundo estágio consiste na purificação do efluente do fermentador, que passa por um sistema de membranas a fim de separar células, proteínas, sais e glicose não reagida do caldo. Um sistema de troca iônica finaliza a remoção de impurezas. A corrente efluente é composta basicamente por 1,4-BDO, água e GBL. A mistura segue para destilação para separação dos produtos. A Figura 3-5: Diagrama simplificado do processo de fermentação direta de glicose a 1,4-BDO apresenta o esquema do processo.

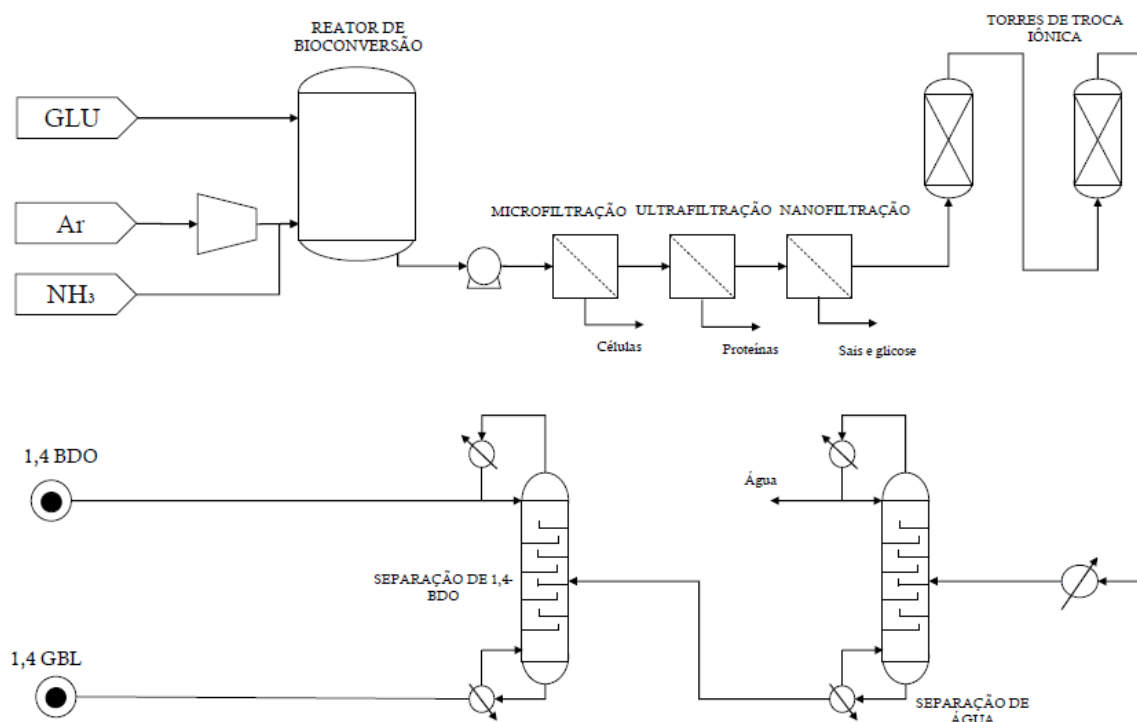


Figura 3-5: Diagrama simplificado do processo de fermentação direta de glicose a 1,4-BDO (adaptado de SATAM *et al.*, 2019).

Esse processo é conhecido e já foi mapeado por SATAM *et al.*, (2019). Os dados fornecidos pela simulação desse trabalho foram utilizados para o ICV e são apresentados na Seção 4.1.2.

3.2.3.3 Sistemas de produto para 1,4-BDO

O presente trabalho engloba, portanto, três sistemas de produção de 1,4-BDO, descritos a seguir.

- ∞ SP 4: 1,4-BDO produzido a partir da hidrogenação do AS, obtido pela hidrogenação do anidrido maleico petroquímico. O vapor é produzido a partir do gás natural.
- ∞ SP 5: 1,4-BDO produzido a partir da hidrogenação do AS, obtido por glicose de cana-de-açúcar, via fermentação neutra e cristalização. O vapor é produzido a partir do bagaço de cana-de-açúcar.

- ∞ SP 6: 1,4-BDO produzido a partir da fermentação de glicose de cana-de-açúcar. O vapor é produzido a partir do bagaço de cana-de-açúcar.

Antes de seguir para o próximo sistema da sequência, uma avaliação comparativa desses processos é realizada. Para a ACV do PBS, são mantidos o caso de 1,4-BDO fóssil e o caso de 1,4-BDO renovável com melhor desempenho ambiental.

3.2.4 Rotas de produção de PBS

Como mencionado na Seção 2.5, existem duas rotas distintas para produção de PBS: o processo em massa e o processo em suspensão. A rigor, os processos produzem polímeros de diferentes massas molares e com diferentes tamanhos de partículas, sendo utilizados para diferentes aplicações. No entanto, ambos são estudados no presente trabalho e comparados entre si.

3.2.4.1 PBS em suspensão

Para a rota de PBS em suspensão utilizou-se como referência o trabalho de (DUTRA *et al.*, 2019). O processo é descrito a seguir e ilustrado na Figura 3-6.

A primeira etapa do processo consiste na dissolução de ácido succínico em 1,4-butanodiol em um tanque agitado, aquecido a 130 °C por 30 minutos. Em seguida, o meio de reação é aquecido a 170 °C, temperatura da reação de polimerização. Então a mistura aquecida de monômeros segue para o reator, no qual é adicionada lentamente a corrente de óleo de soja. A proporção de óleo de soja no reator é de 70% m/m. A polimerização em suspensão ocorre em um reator agitado, na presença de vácuo de 0.6 atm com remoção de condensado. Essa etapa tem duração de 120 minutos.

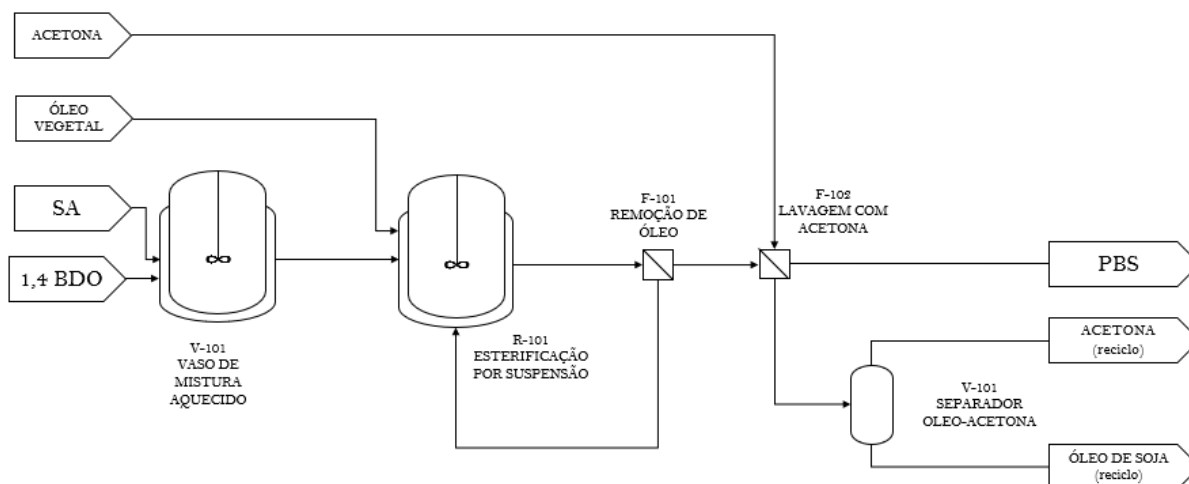


Figura 3-6: Diagrama simplificado do processo de polimerização de AS e 1,4-BDO em suspensão.

Em uma segunda fase da polimerização, a intensidade do vácuo é aumentada para 0.15 atm. A agitação do processo é mantida e a água continua sendo removida, em conjunto com o excesso de álcool eventualmente presente. Essa fase tem a duração de 150 minutos e foram considerados os rendimentos apresentados por TOMAZ *et al.* (2021). A água é removida em seguida com auxílio de um separador.

A última fase do processo consiste em resfriar o meio de reação para a solidificação do PBS, que se encontra fundido na temperatura de reação. O meio reacional é então resfriado a 30 °C. A viscosidade do meio não varia significativamente com a temperatura por conta da fase oleosa dispersante (DUTRA *et al.*, 2019). Em seguida, o polímero e o óleo são separados por filtragem. Nessa etapa, 80% do óleo é recuperado e é reciclado para polimerização. A mistura de PBS e óleo é lavada com acetona. O PBS limpo segue para secagem e o armazenamento. A acetona contaminada segue para um tambor de flash a 90 °C, para separação em uma corrente de acetona limpa, que, uma vez condensada a 30 °C, é reciclada para o processo.

3.2.4.2 PBS em massa

Para a rota de PBS em massa, utilizou-se como referência o trabalho de JACQUEL *et al.* (2011) e DUTRA *et al.* (2019). O processo é descrito a seguir e ilustrado na Figura 3-7.

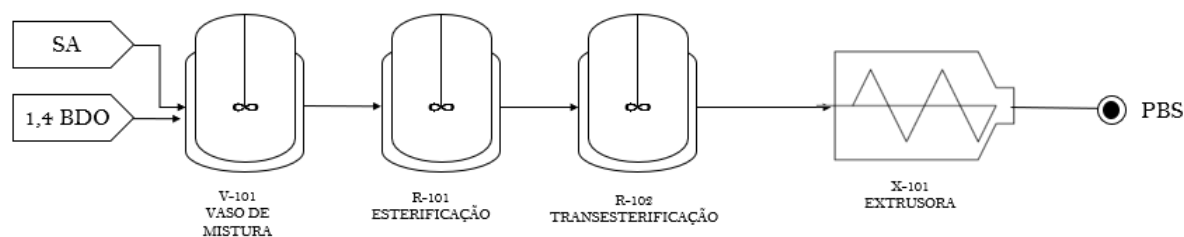


Figura 3-7: Diagrama simplificado da polimerização de AS e 1,4-BDO em massa.

A primeira etapa do processo consiste na dissolução de ácido succínico em 1,4-butanodiol em um tanque agitado, aquecido a 130 °C por 30 minutos. Nessa etapa, haverá excesso de 4 partes de 1,4-BDO para 3 partes de AS, a fim de facilitar o processo de homogeneização, por diminuir a viscosidade da mistura nos reatores, e aumentar a massa molar média dos produtos, resultante de eventual desbalanceamento estequiométrico (DUTRA *et al.*, 2019)

A segunda etapa consiste na reação de esterificação, que ocorre a 170 °C e 2 bar. Essa é a mesma reação de polimerização que acontece no reator em suspensão, de forma que água também é formada como subproduto. Considerou-se o tempo de residência de 120 minutos e conversão completa dos monômeros (JACQUEL *et al.*, 2011). No entanto, por conta do excesso de álcool, formam-se oligômeros.

A terceira etapa consiste na reação de transesterificação, que precisa ocorrer a pressões mais baixas para remoção de água e excesso de 1,4-BDO do processo, para garantir o aumento das massas molares médias. Essa etapa ocorre a alto vácuo, 230 °C e duração de 260 minutos (JACQUEL *et al.*, 2011). Ao contrário do processo em suspensão, no processo em massa é necessária uma etapa final de extrusão para peletização.

Os dois processos de polimerização foram simulados em Aspen Plus V12.1 (ASPENTECH, 2021) para formalização dos balanços de massa e energia, não se tratando de uma simulação rigorosa, visto as limitações do *software* para descrever sistemas de polimerização. O polímero foi inserido no simulador utilizando o módulo de unidade de repetição, utilizando os dados de massa molar apresentados por (DUTRA *et al.*, 2019). O consumo de energia elétrica demandado pela extrusora foi estimado com dados de desempenho do equipamento fornecidos por fabricantes (PLASTICSTODAY, 2021). Dessa forma, foi

possível descrever as entradas materiais e energéticas do processo, suficientes para elaboração do ICV para o PBS.

3.2.4.3 Sistema de produtos para PBS

O presente trabalho engloba, portanto, quatro sistemas de produção de PBS, descritos a seguir.

- ∞ SP 7: PBS de origem renovável produzido por polimerização em suspensão.
- ∞ SP 8: PBS de origem renovável produzido por polimerização em massa.
- ∞ SP 9: PBS de origem fóssil produzido por polimerização em suspensão.
- ∞ SP 10: PBS de origem fóssil produzido por polimerização em massa.

3.3 Avaliação de impactos de ciclo de vida (AICV)

Uma vez levantado o IPP dos sistemas selecionados, é feita a avaliação detalhada dos impactos, permite a identificação dos pontos essenciais para a implementação de melhorias nos processos. A AICV realizada com auxílio do software SimaPro® v9.0 (GOEDKOOOP *et al.*, 2016). O software foi selecionado baseado na usabilidade e conexão com bases de dados selecionadas e os métodos de cálculo para AICV.

O método ReCiPe (HUIJBREGTS *et al.*, 2017). Trata-se de um método global de avaliação de impactos, que proporciona uma caracterização harmonizada entre fatores ao nível do ponto médio (PM), o ponto no qual se consideram os fluxos ambientais, e do ponto final (PF), que relacionam esses impactos às áreas de proteção: saúde humana, qualidade do ecossistema e escassez de recursos. Tratam-se de duas abordagens complementares, visto que a abordagem de ponto médio tem maior relação com os fluxos ambientais e maior precisão, enquanto a abordagem de ponto final provê mais informações para a priorização de decisões, porém apresenta menor precisão (HUIJBREGTS *et al.*, 2017).

O método também inclui três perspectivas temporais (HUIJBREGTS *et al.*, 2017). A perspectiva individualista (I) baseia-se no curto prazo, nos tipos de impacto que são indiscutíveis e é otimista em relação à adaptação humana. A perspectiva hierarquista (H) é

baseada no consenso científico, dizendo respeito ao prazo e à plausibilidade dos mecanismos de impacto. A perspectiva igualitária (E) é a mais precavida, levando em conta o período de tempo mais longo e todos os percursos de impacto para os quais existem dados disponíveis.

O método escolhido calcula o impacto ambiental baseado em unidade de estressor equivalente. No total são avaliadas 18 categorias de impactos, apresentadas na Tabela 3-1.

As categorias de impactos a serem avaliados são o aquecimento global, a eutrofização da água doce, a ecotoxicidade terrestre, o uso de terra, a depleção de recursos fósseis e o consumo de água. A avaliação de impactos foi realizada a nível do PM, por conta da maior precisão dos resultados e maior relação com os fluxos ambientais. A seguir, é descrito como metodologia ReCiPe (HUIJBREGTS *et al.*, 2017) associa a relação de causa e efeito entre os fatores do ponto médio e os fatores de ponto final para cada categoria de impacto utilizadas no trabalho. Essas premissas foram utilizadas para a interpretação dos resultados. Vale ressaltar, que as categorias de PF não foram calculadas.

Tabela 3-1: Resumo das categorias de impacto avaliadas pelo ReCiPe e seus respectivos indicadores (adaptado de HUIJBREGTS *et al.*, 2017).

Categoria de Impacto	Indicador	Unidade equivalente
Mudanças climáticas	Aumento da força da radiação infravermelha	kg CO ₂ equivalente
Eutrofização da água doce	Aumento da quantidade de fósforo (P) na água fresca	kg de P para água doce
Ecotoxicidade terrestre	Aumento de substâncias perigosas nos solos naturais	kg de 1,4-DCB para solo industrial
Uso de terra	Transformação devido à ocupação e tempo	m ² .ano de terra agricultada
Uso de água	Aumento no consumo de água	m ³ de água consumido
Escassez de recursos fósseis	Quantidade de calor	kg óleo

Para a categoria de impacto aquecimento global, o potencial de dano é modelado conforme descrito na Figura 3-8. A emissão de uma massa (kg) de GEE leva a um aumento na concentração atmosférica desses gases, aumentando o potencial de absorção de radiação infravermelha, levando a um aumento na temperatura global. Esse aumento impacta a saúde humana e a qualidade de ecossistemas.

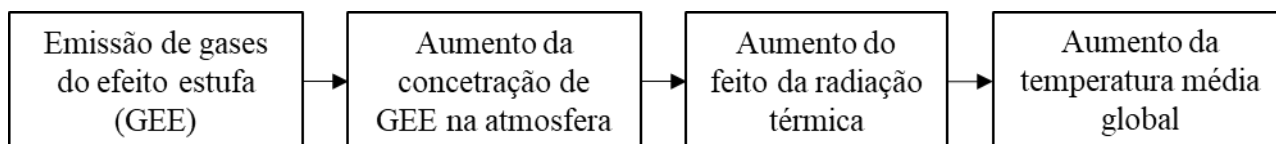


Figura 3-8: Relação de causa e efeito de emissões de GEE para aumento da temperatura média global (adaptado de HUIJBREGTS *et al.*, 2017))

A eutrofização de água doce ocorre quando a emissão de nutrientes para o solo ou corpos hídricos é seguida de um aumento no nível de nutrientes, como fosfatos e nitratos, como ilustrado na Figura 3-9. Os impactos ambientais relacionados ao fenômeno englobam a diminuição da concentração de oxigênio em ecossistemas aquáticos, afetando a qualidade de vida das espécies do ambiente.

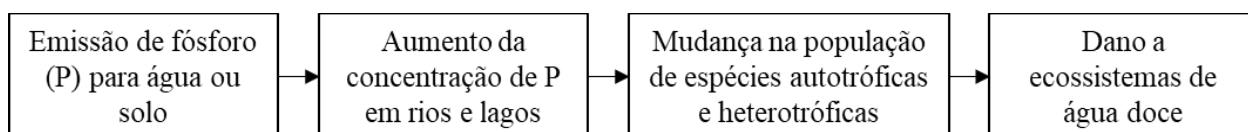


Figura 3-9: Relação de causa e efeito de emissões de fósforos em corpos de água doce e a perda de biodiversidade de espécies desse sistema (adaptado de HUIJBREGTS *et al.*, 2017)

A categoria de impacto de toxicidade, expressa em kg de 1,4-diclorobenzeno equivalentes (1,4-DCB eq), é utilizada como fator de caracterização no PM para toxicidade humana, da água fresca, marinha e terrestre e representa a duração do tempo de vida de um composto químico perigoso, seu potencial de acumulação na cadeia alimentar e o efeito disso sobre a saúde humana e ambiental, como ilustrado na Figura 3-10.

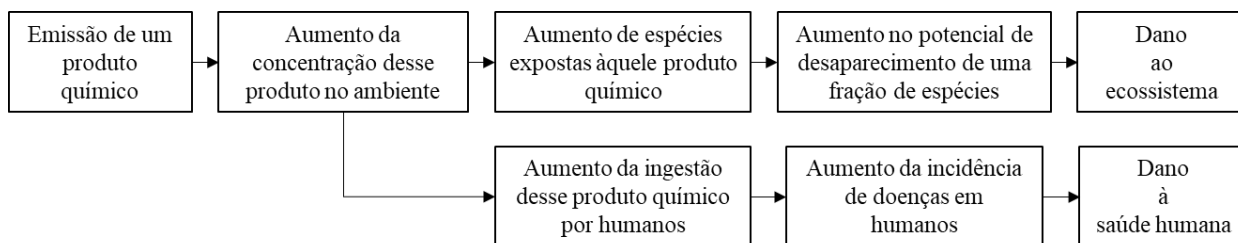


Figura 3-10: Relação de causa e efeito da emissão de produtos químicos a danos ao ecossistema e à saúde humana (adaptado de HUIJBREGTS *et al.*, 2017)

A categoria de impacto de uso da terra avalia o impacto do uso da terra para espécies terrestres, seja por conta da mudança na cobertura da terra ou por conta do uso de novas terras, como ilustrado na Figura 3-11. Tal impacto afeta o habitat natural das espécies e a composição da população que ocupa esse espaço, já que o uso para o propósito pode desqualificar aquele ambiente como habitat para diversas espécies.

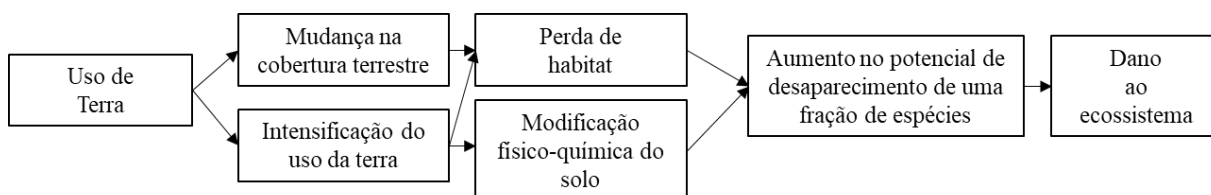


Figura 3-11: Relação de causa e efeito do uso de terra a danos ao ecossistema (adaptado de HUIJBREGTS *et al.*, 2017)

O método de cálculo associa o fator de impacto de escassez de recursos fósseis ao custo associado à produção de óleo, como ilustrado na Figura 3-12. As projeções no ponto final estimam que, conforme a extração dos recursos mais baratos de produção avança, caminha-se para o esgotamento mais rápido, tornando esses insumos mais caros. Simultaneamente, a extração de recursos mais caros gera custos adicionais.

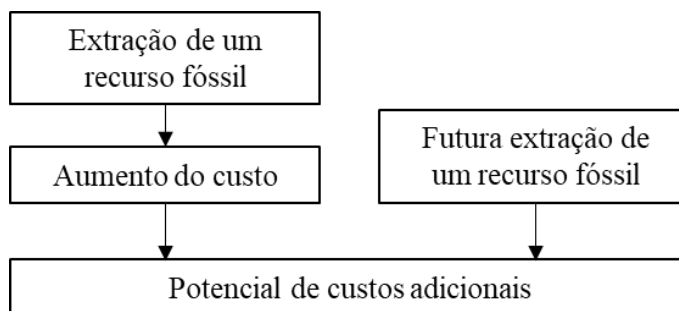


Figura 3-12: Relação de causa e efeito da extração de recursos fósseis e o aumento do custo do recurso (adaptado de HUIJBREGTS *et al.*, 2017)

A categoria de impacto de consumo de água considera o uso de água de várias maneiras, de tal forma que a água é evaporada, incorporada em produtos, transferida para outras bacias hidrográficas ou eliminados no mar (HUIJBREGTS *et al.*, 2017). A água consumida pelo processo já não está disponível na bacia hidrográfica original, nem para humanos nem para os ecossistemas tendo suas possíveis consequências ilustradas na Figura 3-13.

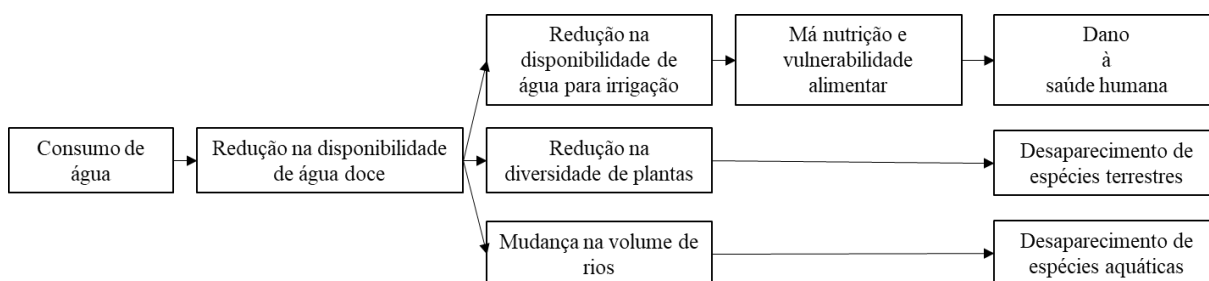


Figura 3-13: Relação de causa e efeito do consumo de água com dano à saúde humana e manutenção de espécies terrestres e aquáticas (adaptado de HUIJBREGTS *et al.*, 2017)

3.4 Comentários Finais

No Capítulo 3, foram apresentados o objetivo, o escopo e o método de avaliação de impactos a serem considerados no presente estudo. Também é justificada a escolha do método, as decisões consideradas no arranjo dos sistemas de produto e da seleção dos dados de fundo.

O trabalho também deixa claro que os produtos finais dos processos de polimerização não são exatamente iguais: a polimerização em massa resulta em *pellets* de polímero e o

polimerização em suspensão resulta em micropartículas de PBS, sendo tais usados para aplicações potencialmente distintas. No entanto, pela natureza acadêmica e pelo valor gerado para maior compreensão sobre os processos de polimerização em suspensão o presente estudo considerará os dois materiais passíveis de comparação.

Os sistemas de produtos considerados foram obtidos ou da literatura ou a partir de simulações de processos descritos. Tais processos se encontram em diferentes níveis de maturidade e nem todos os IPPs considerados foram completamente esclarecidos pelos autores dos estudos dos quais foram extraídos.

Nem todos os dados de fundo foram encontrados para região geográfica do estudo, o que é esperado visto que base de dados para o Brasil ainda se encontra em desenvolvimento. Sendo assim, se utilizou dados de origem global ou resto do mundo. Quando não se encontrou dados na base de dados *Ecoinvent*, utilizou-se uma base de dados complementar.

A avaliação de impactos foi realizada no SimaPro (PRÉ CONSULTANTS, 2016) e a interpretação de resultados é apresentada no capítulo seguinte. Devido ao tempo disponível para elaboração do presente trabalho, não foi elaborada uma análise de incertezas.

Capítulo 4

Resultados e Discussão

Neste capítulo, os resultados obtidos são apresentados em quatro seções. De início, são apresentados os resultados das simulações que culminam com o inventário de ciclo de vida (ICV). Na segunda seção são discutidos os resultados obtidos na avaliação de impactos das rotas de ácido succínico. Na terceira seção são discutidos os resultados da avaliação de impactos das rotas de produção do 1,4-butanodiol. Por fim, na quarta seção são discutidos os resultados da avaliação de impactos do PBS.

4.1 Inventários de ciclo de vida

4.1.1 Inventário de processo de produto para AS

O ICV do AS foi obtido como descrito na Seção 3.2.2. Os resultados são apresentados de forma sumarizada na Tabela 4-1.

O ICV declara que os SPs que representam uma rota fermentativa resultam em um consumo maior de água, o que pode ser atribuído à quantidade de água necessária para diluição do meio de cultivo no fermentador. O SP 1, por representar um processo de produção diferente dos demais, apresenta hidrogênio e nitrogênio como insumos, enquanto os outros SPs, variantes de uma rota de origem renovável, apresentam amônia e metanol, necessários para assegurar a eficiência da fermentação da glicose a AS e da etapa de cristalização reativa, respectivamente.

Quanto ao consumo energético, como esperado, os SPs 2 e 3 resultam em um consumo mais elevado de energia térmica, seja vapor de co-geração ou gás natural, visto que refletem uma situação de menor desempenho energético. A simulação em Aspen Plus V12.1 (ASPENTECH, 2021) do processo descrito na Seção 3.2.2.2 não apontou um consumo significativo de eletricidade por unidade funcional do estudo. Os equipamentos considerados foram bombas, para garantia de escoamento entre operações unitárias, filtro, misturador e

soprador de CO₂ dos reatores e secador, dos quais nenhum demanda alta potência. Vale ressaltar que o processo também não conta com grandes variações de pressão. Portanto, é coerente afirmar que os termos oriundos desse consumo de energia elétrica são pouco relevantes, seguindo-se com essa premissa no estudo.

O SP 1 apresenta um consumo de eletricidade significativo e um consumo de energia térmica muito inferior ao dos demais SPs. O processo descrito por PINAZO *et al.* (2015) se baseia em uma planta petroquímica localizada na Europa. Sendo assim, o baixo consumo de vapor pode ser justificado pelo fato desse processo se encontrar inserido em uma refinaria de petróleo, e possivelmente integrado energeticamente com outros processos que ali ocorrem, diminuindo então a carga térmica. Outra hipótese que justifica essa observação é que o estudo pode considerar uma etapa de aquecimento que utiliza uma resistência elétrica ao invés de vapor. O estudo não declara essas condições.

Tabela 4-1: Inventário de ciclo de vida para os SPs de produção de ácido succínico.

	SP 1	SP 2	SP 3	Unidade
Saídas				
Ácido Succínico	1000	1000	1000	kg
Sulfato de amônio	0	1164.8	1164.8	kg
Entradas				
Glicose de cana de açúcar	0	1978	1978	kg
Anidrido maleico	890	0	0	kg
Hidrogênio	250	0	0	kg
Nitrogênio	70	0	0	kg
Água	0,3	5.9	5.9	m ³
Gás Carbônico	0	208.8	208.8	kg
Amônia	0	302.2	302.2	kg
Metanol	0	473.1	473.1	kg
Gás Natural	1,4	23.5	0	Gcal
Vapor de co-geração	0	0	23.5	Gcal
Eletricidade	350	0	0	kWh

4.1.2 Inventário de processo de produto para de 1,4-BDO

O ICV do 1,4-butanodiol foi obtido como descrito na Seção 3.2.3. Os resultados são apresentados de forma sumarizada na Tabela 4-2.

O resultado indica que o SP 6 resulta em um consumo maior de água, o que pode ser atribuído à quantidade de água necessária para diluição do meio de cultivo no fermentador. O SP 6 representa um processo de produção diferente dos SPs 7 e 8 e nenhum solvente ou outro produto químico foi apresentado no estudo de SATAM *et al* (2019). Já os SPs 4 e 5 demandam hidrogênio para o reator de hidrogenação e metanol para a etapa de esterificação.

Quanto ao consumo de energia, os SPs 4 e 5 apresentam um maior consumo de energia térmica, visto que a rota representada necessita de altas temperaturas para os reatores e utiliza destilações para a separação dos produtos, sendo então, mais intensiva em energia térmica que o processo representado no SP 6. Esse, por sua vez, apresenta um consumo de eletricidade maior que os dos demais SPs, o que pode ser justificado pelo complexo sistema de membranas utilizado para a separação dos produtos finais.

Tabela 4-2: Resultado do inventário de ciclo de vida das rotas de produção de 1,4 BDO

	SP 4	SP 5	SP 6	Unidade
Saídas				
1,4 BDO	1000	1000	1000	kg
THF	27	27	-	kg
Entradas				
Ácido Succínico	1408	1408	0	kg
Glicose (cana-de-açúcar)	0	0	2000	kg
Hidrogênio	97	97	0	kg
Metanol	54	54	0	kg
Água	32,6	32,6	45,5	m ³
Vapor de co-geração	0	31	25,08	Gcal
Gás Natural	31	0	0	Gcal
Eletricidade	164	164	559	kWh

4.1.3 Inventário de processo de produto para PBS

O ICV das rotas de produção do PBS foi obtido como descrito na Seção 3.2.4. Os resultados são apresentados de forma sumarizada na Tabela 4-3. No seguinte texto, ao comparar o tipo de processo de polimerização, o termo “polimerização em suspensão” será utilizado para se referir aos SPs 10 e 12 e o termo “polimerização em massa” para os SPs 11 e 13. Vale ressaltar que os SPs agrupados em cada termo possuem ICV’s praticamente iguais, apenas diferindo a natureza do combustível utilizada para obtenção de energia térmica e a massa de 1,4-BDO.

O consumo de eletricidade é maior para a polimerização em massa, visto que essa faz uso da etapa de extrusão para a peletização do polímero, enquanto o processo em suspensão tem como principal consumidor de eletricidade os misturadores dos reatores de polimerização, também presentes e operando em condições semelhantes no processo em massa. Além disso, dada a necessidade de um rápido resfriamento do meio reacional para a etapa de extrusão, a polimerização em massa resulta em um maior consumo de água.

O consumo de energia térmica é superior para o processo em suspensão, ainda que a temperatura dos reatores de polimerização e tempo de residência em cada etapa seja inferior ao do processo em massa. Acontece que os reatores de polimerização contêm óleo de soja como meio de suspensão, além dos monômeros. Isso resulta no aumento considerável da massa que deve passar pelas etapas de aquecimento, demandando conseqüentemente maior quantidade de energia térmica.

A polimerização em suspensão demanda também um maior consumo de insumos do que a polimerização em massa, tendo em vista a presença do óleo de soja no meio reacional e de acetona na etapa de lavagem do polímero.

Tabela 4-3: Inventário do ciclo de vida das rotas de produção do PBS

	SP 7	SP 8	SP 9	SP 10	Unidade
Saídas					
PBS	1000	1000	1000	1000	kg
Entradas					
1,4-butanodiol	550	550	550	550	kg
Ácido Succínico	720	730	720	730	kg
Nitrogênio	0	1220	0	1220	kg
Óleo de soja	200	0	200	0	kg
Acetona	500	0	500	0	kg
Água	0,68	0,97	0,68	0,97	m ³
Vapor de co-geração	475	99	0	0	Gcal
Gás Natural	0	0	475	99	Gcal
Eletricidade	26	180	26	180	kWh

4.2 Avaliação de impactos da produção de ácido succínico

A avaliação de impactos do ácido succínico foi realizada como descrito na Seção 3.3. São apresentados a seguir os fatores de impacto ambiental calculados para os processos e a contribuição de cada entrada de processo. A interpretação desses resultados é realizada em sequência.

4.2.1 Aquecimento Global

A Figura 4-1 resume os resultados da categoria de impacto aquecimento global calculados para os diferentes SPs de produção do AS. O SP 1 possui o maior impacto na categoria aquecimento global dentre todos os processos, com 3,92 kg de CO₂eq/kg AS. O SP 2 apresenta contribuições intermediárias de 2,31 kg de CO₂eq/kg AS. O SP 3 apresenta menor impacto na categoria sendo essa de 1,03 kg de CO₂eq/kg AS.

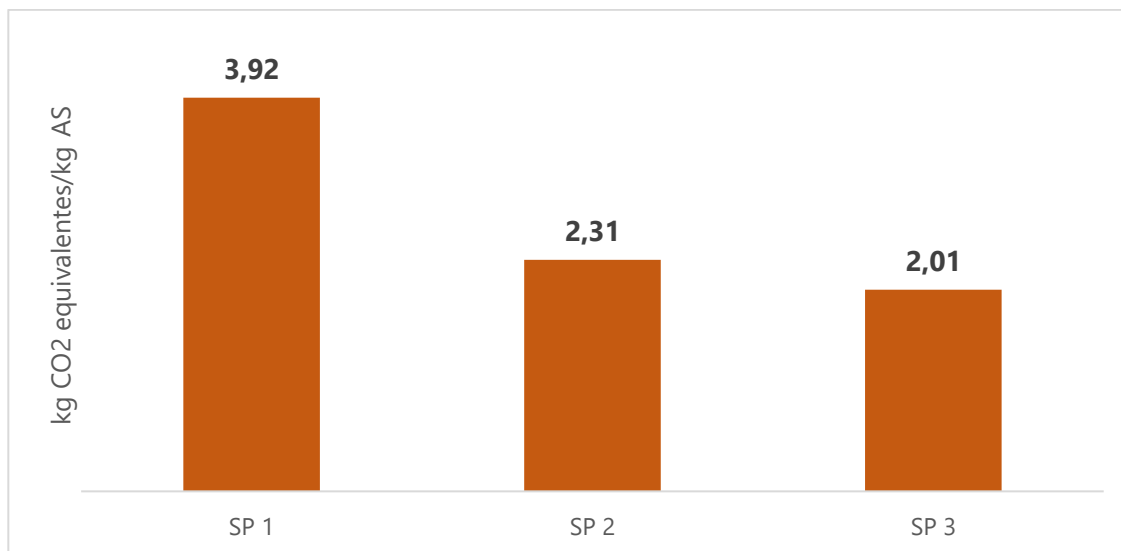


Figura 4-1: Resultado para a categoria aquecimento global dos processos de produção de AS.

Por meio da avaliação da Figura 4-1 e das contribuições por entrada apresentada na Figura 4-2, percebe-se que o impacto do SP 1 é impulsionado principalmente pela produção petroquímica do anidrido maleico. Já nos processos de origem renovável (SPs 2 e 3) o resultado da categoria de aquecimento global está relacionado à produção de glicose, pelo consumo energético pelo maquinário no processamento de cana-de-açúcar e à produção dos insumos amônia e ácido sulfúrico, de origem petroquímica.

O emprego do bagaço de cana como combustível resulta em menores emissões de GEE que nos SPs de emprego de gás natural; no entanto, essa mudança não é muito expressiva, quando comparada aos valores absolutos dos impactos, como mostrado na Figura 4-2. Isso indica que as emissões de GEE do processo estariam mais concentradas no emprego da amônia e ao processamento e plantio da cana-de-açúcar do que ao consumo térmico do processo.

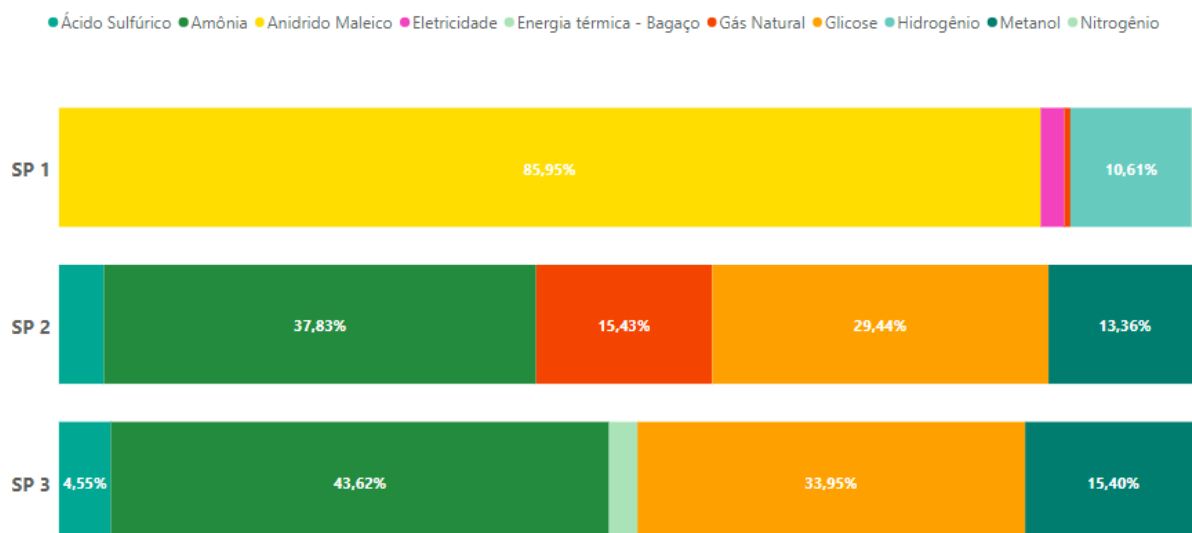


Figura 4-2: Contribuição das entradas para cada SP de produção do AS para a categoria de impacto aquecimento global

4.2.2 Eutrofização da água doce

A Figura 4-3 resume os resultados da categoria de impacto eutrofização da água doce calculados para os diferentes SPs de produção do AS. O SP 1 apresenta a maior impacto para a categoria, sendo essa de 0,00075 kg de fósforo para água doce/kg AS. Os SPs 2 e 3 apresentam os menores impactos, sendo essas iguais a 0,00046 e 0,00044 kg de fósforo para água doce/kg AS, respectivamente.

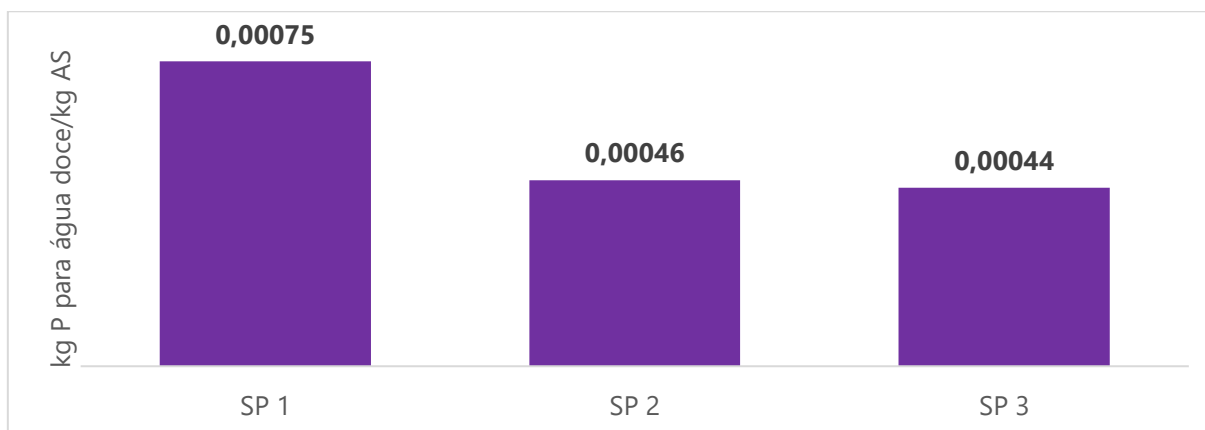


Figura 4-3: Resultado para a categoria de impacto eutrofização de água doce dos processos de produção de AS.

A contribuição das entradas para cada SP de produção do AS para eutrofização de água doce é apresentada na Figura 4-17. O SP 1 revela o maior impacto para eutrofização da água doce dentre todos os processos, sendo a produção de anidrido maleico a maior influência, como mostrado na Figura 4-4. Já nos SPs 2 e 3 as contribuições são semelhantes e estão relacionadas à produção de glicose e ao emprego dos insumos amônia e ácido sulfúrico, de origem petroquímica.

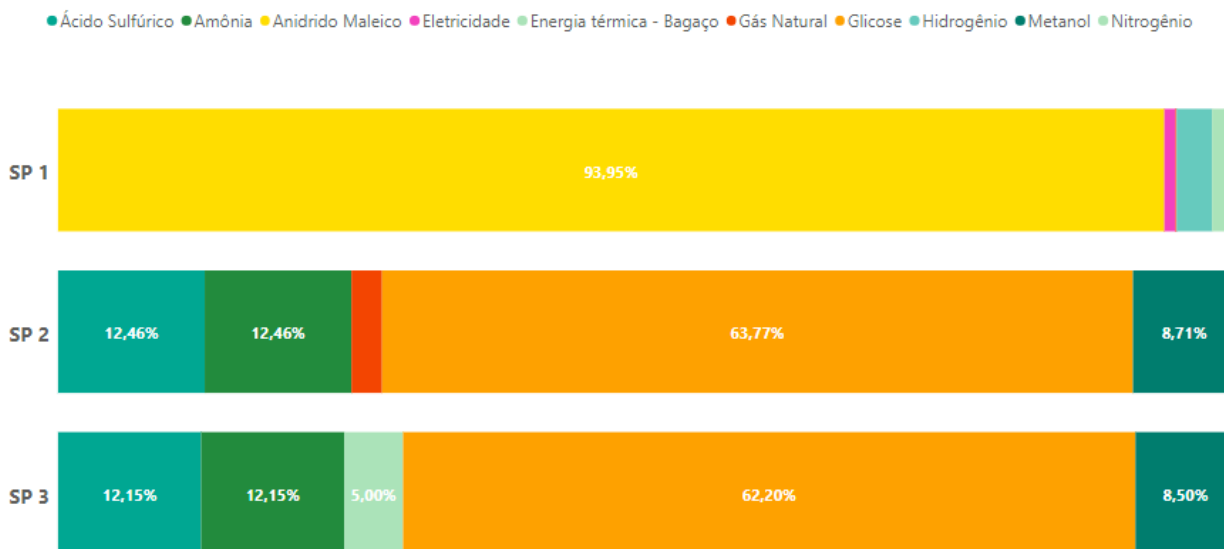


Figura 4-4: Contribuição das entradas para cada SP de produção do AS para a categoria de impacto eutrofização de água doce.

4.2.3 Ecotoxicidade Terrestre

A Figura 4-5 resume os resultados da categoria de impacto ecotoxicidade terrestre calculados para os diferentes SPs de produção do AS. O SP 3 apresenta o maior impacto para a categoria, sendo essa de 18,29 kg de 1,4-DCB eq. O SP 2 apresenta contribuição intermediária de 14,84 kg de 1,4-DCB eq. O SP 1 apresentou o menor impacto, sendo essa de 4,49 kg de 1,4-DCB eq.

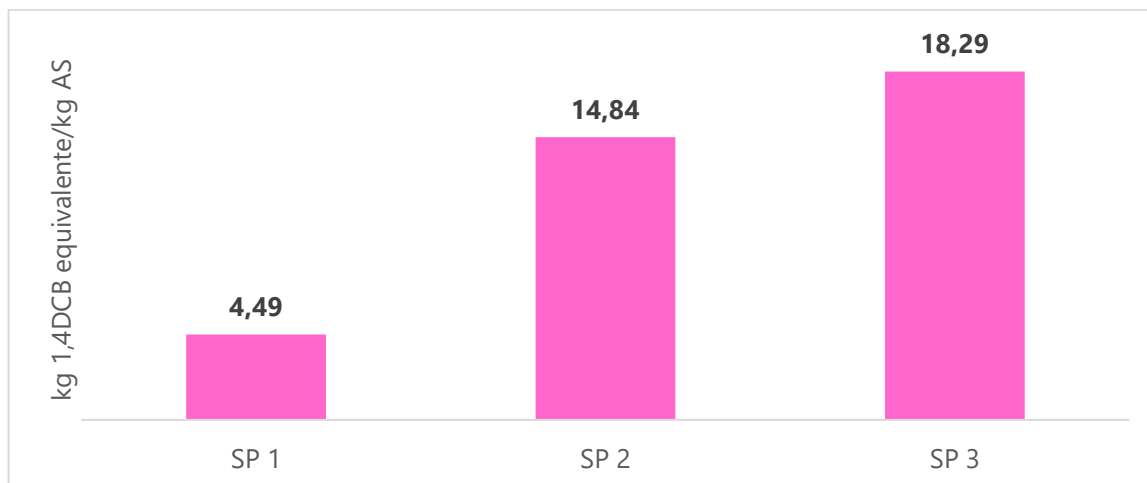


Figura 4-5: Resultado da categoria de impacto ecotoxicidade terrestre dos processos de produção de AS

Por meio da avaliação da Figura 4-27 e da avaliação da contribuição de cada entrada à categoria de impacto apresentada na Figura 4-28, percebe-se que nos SPs representantes de processos de origem renovável apresentam grande influência das entradas relacionadas ao consumo de amônia e à produção de glicose. Essa engloba a plantação de cana-de-açúcar, que requer o uso de fertilizantes e pesticidas, que estão ligados ao acúmulo de produtos químicos no solo (RENOUF *et al.*, 2010).

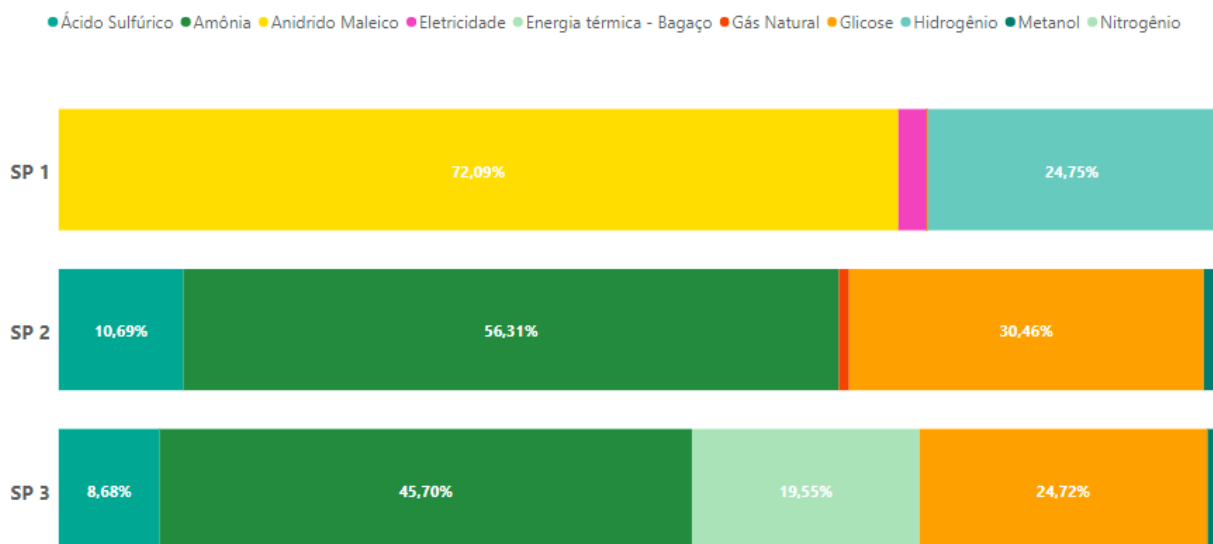


Figura 4-6: Contribuição das entradas por SP para a categoria de impacto ecotoxicidade terrestre para AS

4.2.4 Uso da Terra

A Figura 4-7 resume os resultados para a categoria de impacto uso de terra calculados para os diferentes sistemas de produtos de produção do AS. Os Sistemas de produtos 2 e 3 apresentam a maior impacto para a categoria, sendo essa de cerca de 27 m² terra/ano.kg de PBS. O SP 1 apresentou a menor impacto de 0,46 m² terra/ano.kg de PBS.

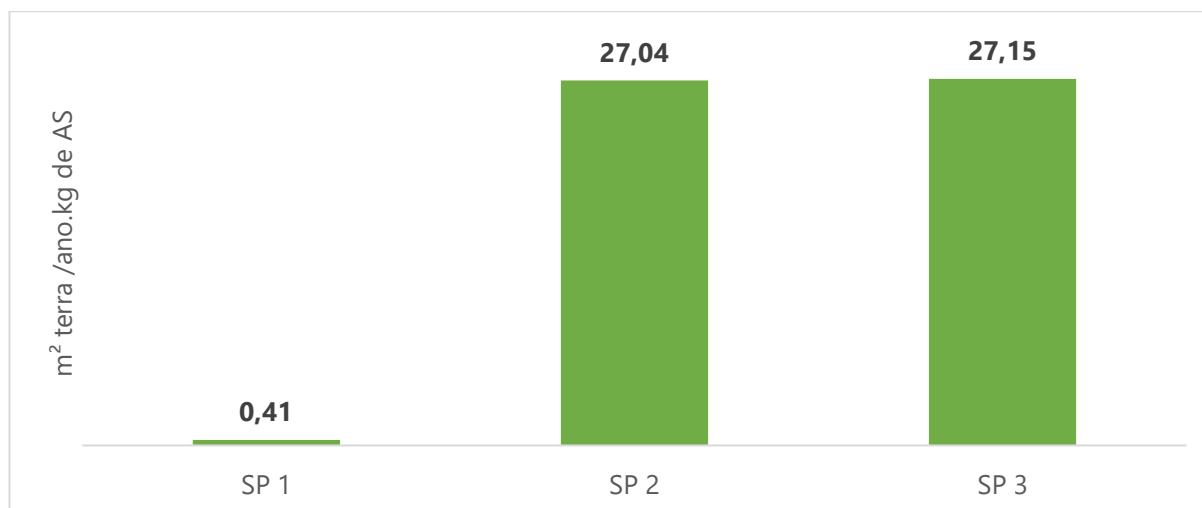


Figura 4-7: Resultado para a categoria de impacto uso da terra dos processos de AS

Por meio da avaliação da Figura 4-7 e contribuição de cada entrada para a categoria apresentada na Figura 4-8, fica claro que a discrepância entre os resultados para cada tipo de SP é impulsionada pela produção de glicose, que demanda uma área muito maior para o cultivo de cana-de-açúcar, quando comparada a um processo petroquímico, cujos recursos tem origem subterrânea.

Para atender a demanda mundial estimada de 100 mil toneladas anuais de ácido succínico (FMI, 2022) para indústria química e para a produção de todos os derivados de sua plataforma (e não apenas o PBS), seriam necessários 270 mil hectares de plantação de cana-de-açúcar por ano exclusivamente dedicadas à produção de ácido succínico, considerando o dado de uso de terra obtido. Considerando que no Brasil estejam disponíveis 62,5 milhões de hectares de terra para a agricultura (EMBRAPA, 2022), sendo 8,5 milhões dedicados à plantação de cana de açúcar, o esforço necessário seria equivalente a dedicar 0,4% das terras dedicadas para

agricultura no Brasil ou 13% das terras dedicadas ao plantio de cana-de-açúcar para a produção somente de AS.

Vale ressaltar que esse estudo não considerou o fato de o PBS ser um polímero passível de reciclagem química e enzimática, o que diminuiria a pressão sobre o uso de terra para a produção de 1,4-BDO e ácido succínico para sua produção. Também não foi avaliado se esses valores de uso de terra previstos são sustentáveis ou não, propondo-se apenas avaliar nesse momento qual seria o esforço adicional no plantio de cana-de-açúcar para a produção de ácido succínico em relação ao esforço para o plantio de cana dos dias atuais.

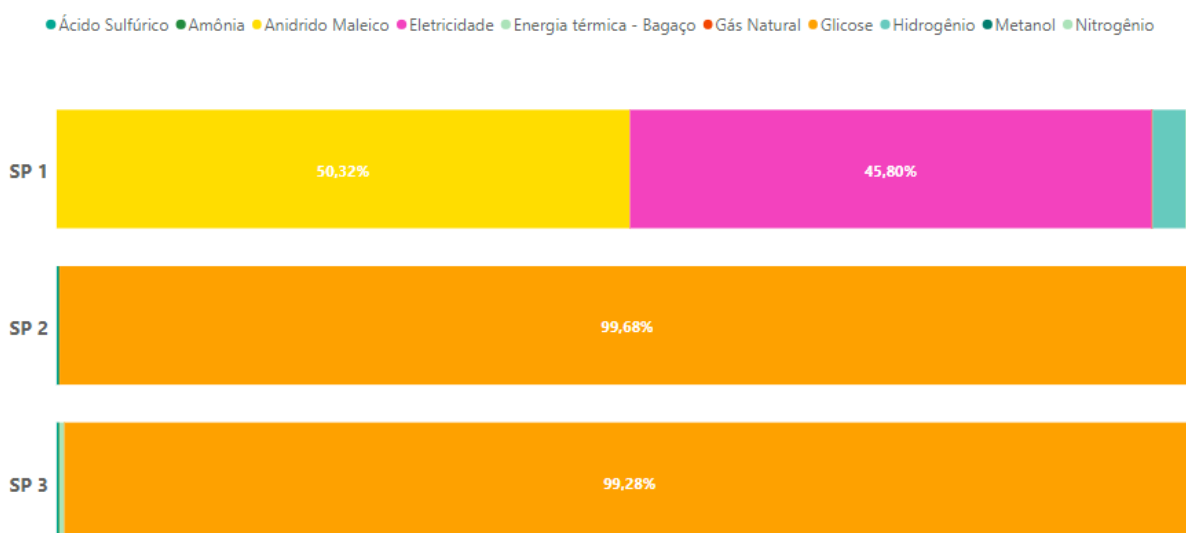


Figura 4-8: Contribuição das entradas por SP para a categoria de impacto uso de terra para AS

4.2.5 Escassez de recursos fósseis

A Figura 4-9 resume os resultados da categoria de impacto escassez de recursos fósseis calculados para os diferentes SPs de produção do AS. O SP 1 apresenta maior impacto, sendo esse de 2,22 kg de petróleo equivalente/kg de PBS. O SP 2 apresenta contribuição intermediária de 2,04 kg de petróleo equivalente/kg de PBS. O SP 3 apresentou o menor impacto de 0,88 kg de petróleo equivalente/kg de PBS.

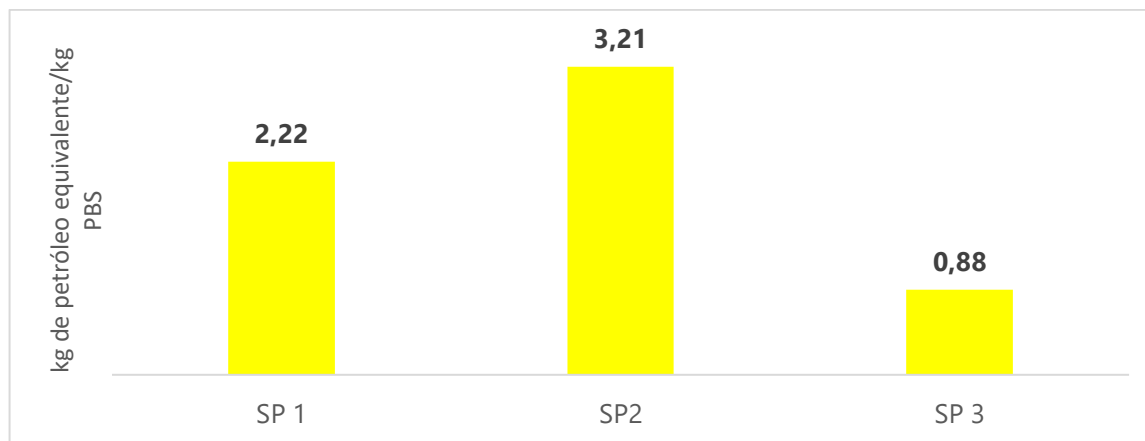


Figura 4-9: Resultados para a categoria de impacto escassez de recursos fósseis dos processos de produção de AS

Como é a apresentado na Tabela 4-1, os sistemas de produtos 2 e 3 são mais intensivos em energia do que SP 1. É esperado que um processo de conversão de biomassa seja mais custoso energeticamente do que um processo petroquímico, visto que se trata de um processo mais novo, geralmente menos sujeito a otimizações e integração energética (MORALES et al., 2016). Pela avaliação da contribuição de cada entrada para a categoria apresentada na Figura 4-10: Contribuição das entradas por SP para a categoria de impacto escassez de recursos fósseis para AS, percebe-se que SP 2 tem como principal estressor para a categoria o consumo de gás natural, que é utilizado como combustível para geração de calor.

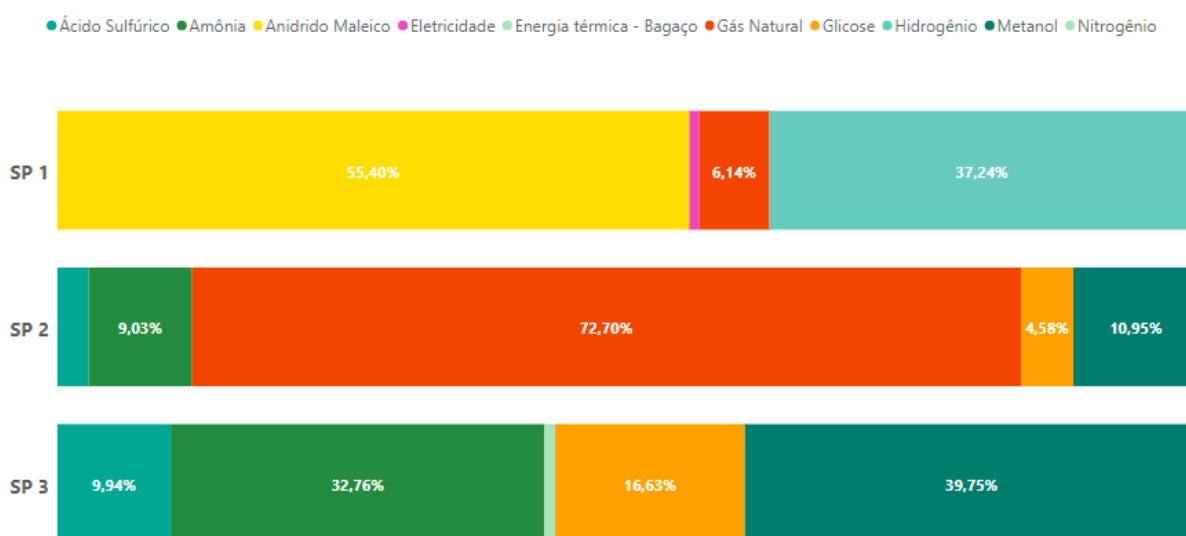


Figura 4-10: Contribuição das entradas por SP para a categoria de impacto escassez de recursos fósseis para AS

4.2.6 Consumo de água

A Figura 4-11 resume os resultados para a categoria de impacto consumo de água calculados para os diferentes sistemas de produtos de produção do AS. Os SPs 2 e 3 apresentam as maiores contribuições para as categorias sendo todos esses cerca de 0,2 m³ de água/kg de AS. O SP 1 apresenta o menor impacto sendo esse de 0,04 m³ de água/kg de AS.

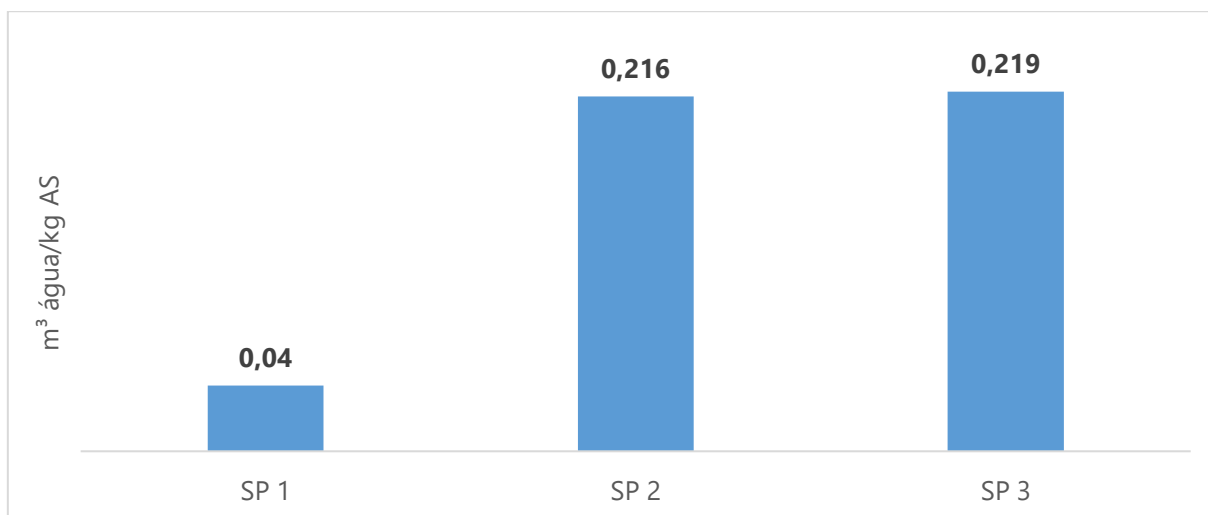


Figura 4-11: Resultado para a categoria de impacto consumo de água dos processos de produção de AS

Por meio da avaliação da Figura 4-11 e da contribuição de cada entrada para categoria consumo de água, apresentada na Figura 4-12, conclui-se que o impacto está associado a duas principais influências. A primeira é a própria rota de produção biológica de AS, uma vez que a fermentação é intensiva no consumo de água para processo e resfriamento, de acordo com o fato de que novos processos têm margem para otimização pela integração de processos. Um estudo de integração energética e mássica para estimar o consumo de utilidades após integração pode viabilizar o processo no que tange ao consumo de água e até mesmo nos impactos impulsionados pelo consumo de vapor. A segunda é o processo de obtenção de glicose, tanto considerando a água para processo quanto para irrigação da plantação.

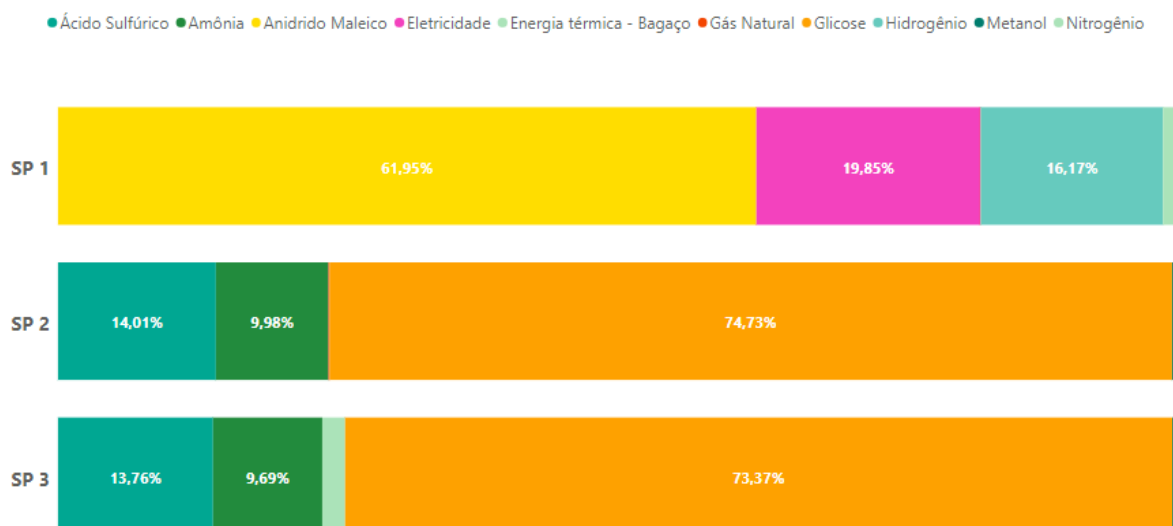


Figura 4-12: Contribuição das entradas por SP para a categoria de impacto consumo de água para AS

4.2.7 Interpretação dos resultados para o AS

Comparam-se na Tabela 4-4 e na Figura 4-13 os SPs de fontes petroquímicas e renováveis quanto ao desempenho ambiental. Também foi realizada uma avaliação comparativa entre as rotas de fonte renovável, a fim de selecionar o caso que exerce o menor impacto, para que possa ser usada como referência para os próximos sistemas.

Tabela 4-4: Análise comparativa dos resultados das categorias de impactos para os sistemas de produto do AS.

Categoria de Impacto	SP 1	SP 2	SP 3
Aquecimento Global	2	1	1
Eutrofização da água doce	2	1	1
Ecotoxicidade Terrestre	1	3	4
Uso de Terra	1	66	66
Depleção de recursos fósseis	3	2	1
Consumo de água	1	5	5

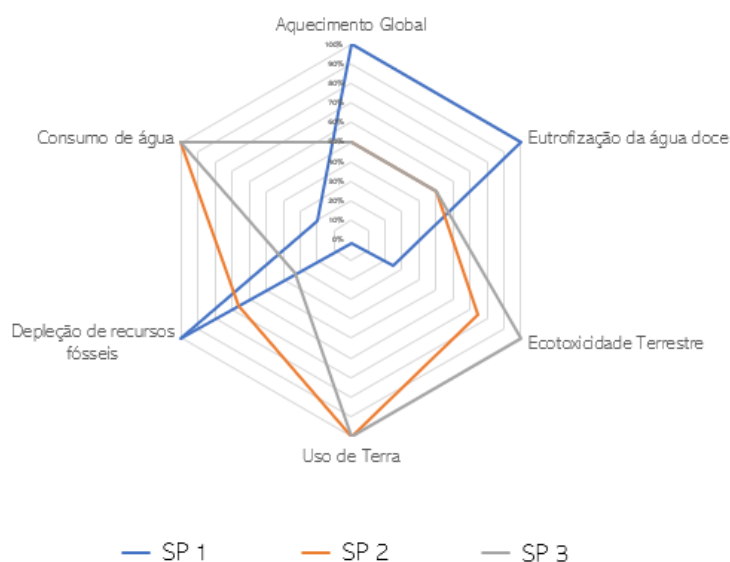


Figura 4-13: Análise comparativa dos resultados das categorias de impactos para os sistemas de produto do AS.

Percebe-se que o SP 1 tem desempenho ambiental superior em três categorias de impacto: ecotoxicidade terrestre, uso de terra e consumo de água. Tais categorias são mais impactadas pela plantação de cana-de-açúcar, por conta da área necessária para plantio e os insumos necessários, como fertilizantes e água. O SPs 2 teve melhor desempenho em três categorias de impacto: aquecimento global, depleção de recursos fósseis e eutrofização da água doce. O SP 3 resultou na minimização dos impactos relacionados ao consumo de petroquímicos pelo uso de bagaço como fonte de energia. Por conta desses resultados, optou-se por usar o SP 1 como referência para os estudos de caso petroquímicos e o SP 3 como referência para os estudos de caso que utilizam AS de fonte renovável.

4.3 Avaliação de Impactos da rota de produção 1,4-butanodiol

A avaliação de impactos para os sistemas de produto de produção de 1,4-BDO foi realizada como descrito na Seção 3.3. São apresentados a seguir os resultados das categorias de

impacto calculado para os sistemas de produto a contribuição de cada entrada de processo. A interpretação desses resultados é realizada em sequência.

4.3.1 Aquecimento Global

A Figura 4-14 resume os resultados da categoria de impacto aquecimento global calculados para os diferentes sistemas de produtos de produção de 1,4-BDO. O SP 4 apresenta o maior impacto, sendo esse de 6,32 kg CO₂ eq/kg 1,4-BDO. Os sistemas de produto 5 e 6 apresentam impactos significativamente menores, com 1,86 e 0,93 kg CO₂ eq/kg 1,4-BDO, respectivamente. Tais estudos consideram ambos o processo DAVY para produção de 1,4-BDO, diferindo apenas na origem do AS e no combustível utilizado para geração de energia térmica na planta.

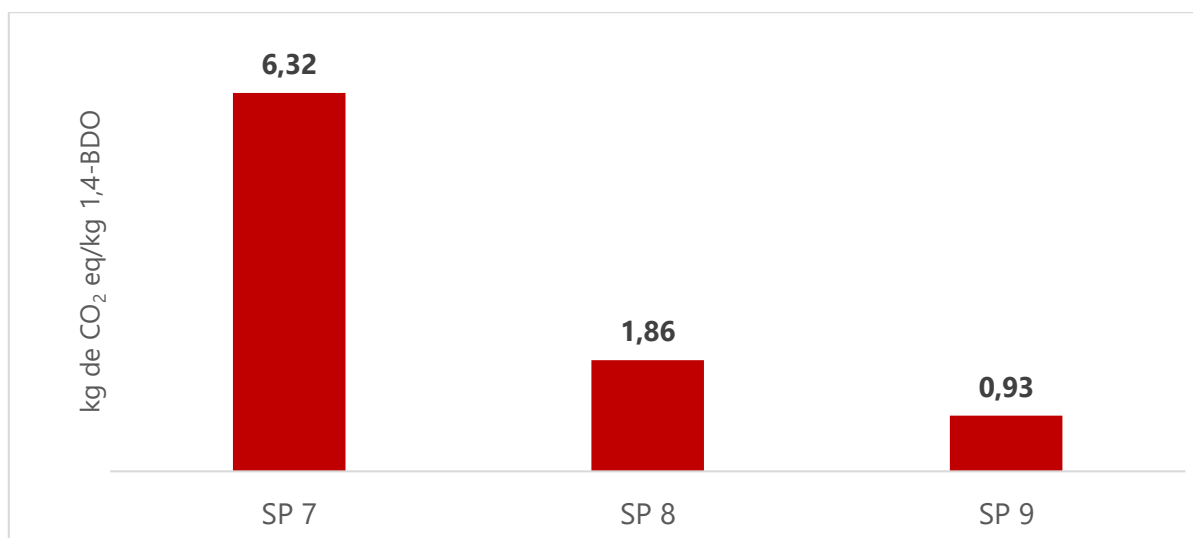


Figura 4-14: Resultados para a categoria de impacto aquecimento global dos sistemas de produto de 1,4-BDO

Por meio da avaliação da Figura 4-14 e da contribuição por entrada para a categoria apresentada na Figura 4-15, percebe-se que o principal estressor no SP 4 é o AS, de origem petroquímica. Enquanto isso, no SP 5, que compartilha o mesmo processo químico que o caso anterior, o impacto é diminuído ao se selecionar um AS renovável e os principais contribuintes para o impacto são as entradas de energia térmica e hidrogênio.

Comparando os sistemas de produto 5 e 6, rotas de matérias primas renováveis, constata-se que o SP 6 resulta em menor impacto. A fermentação direta da glicose a 1,4 BDO, considera um processo com menos etapas de processamento, ou seja, menos necessidade de matérias primas insumos e menos perdas materiais, possuindo uma menor demanda por energia térmica e um menor consumo de eletricidade quando comparado com SP 5. Isso tudo é refletido nos resultados por um menor impacto para a categoria.

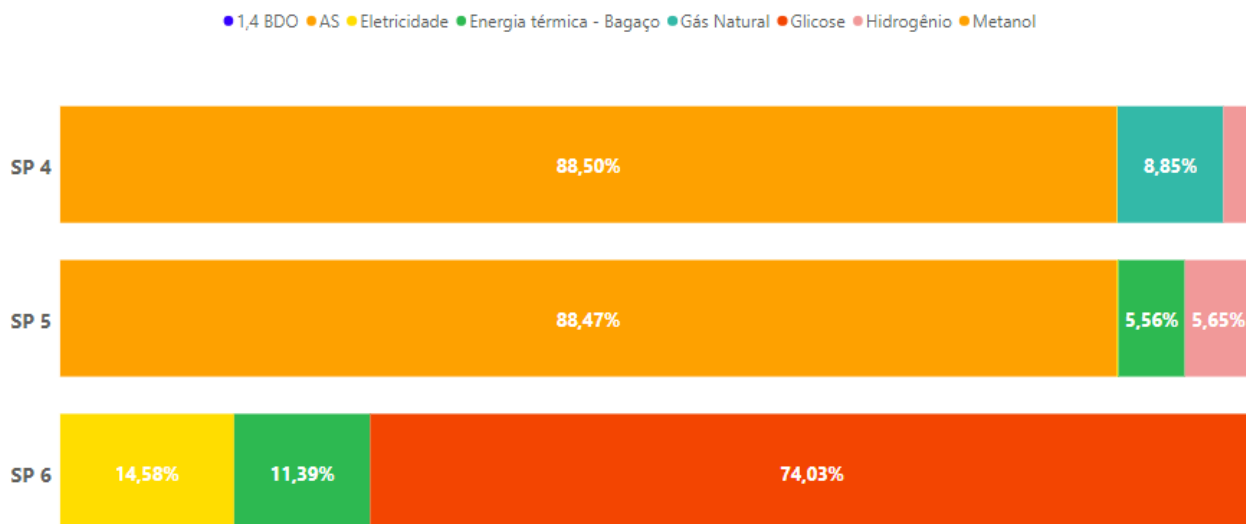


Figura 4-15: Contribuição das entradas por SP para a categoria de impacto aquecimento global para 1,4-BDO

4.3.2 Eutrofização da água doce

A Figura 4-16 resume os resultados para a categoria de impacto eutrofização da água doce calculados para os diferentes sistemas de produtos de produção do 1,4-BDO. O SP 4 apresenta o maior impacto, sendo essa de 0,0011 kg de fósforo para água doce/kg 1,4-BDO. Os sistemas de produto 5 e 6 apresentam os menores impactos, sendo esses 0,0006 e 0,0003 kg de fósforo para água doce/kg 1,4-BDO, respectivamente.

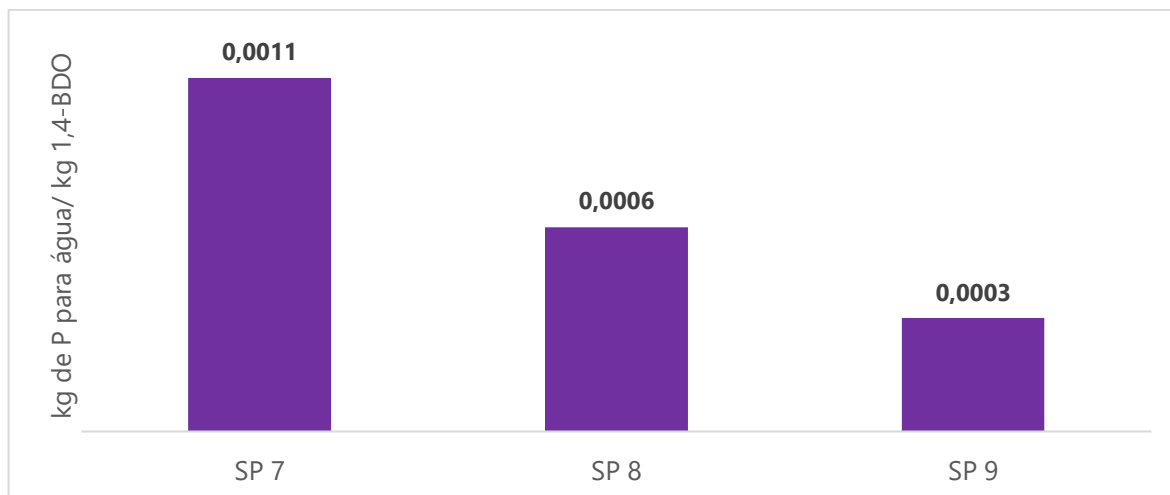


Figura 4-16: Resultados para a categoria de impacto eutrofização da água doce dos sistemas de produto de 1,4-BDO

A contribuição das entradas para cada SP de produção do AS para a categoria de impacto eutrofização de água doce é apresentada na Figura 4-17. O SP 4 revela o maior impacto para eutrofização da água doce dentre todos os processos, sendo a produção de AS petroquímico o maior estressor. Já nos SPs 5 e 6 os impactos são semelhantes e estão relacionadas à produção de glicose. A diferença de impacto para os SPs 5 e 6 pode ser justificada pelas diferentes massas de cana-de-açúcar necessárias para cada processo.

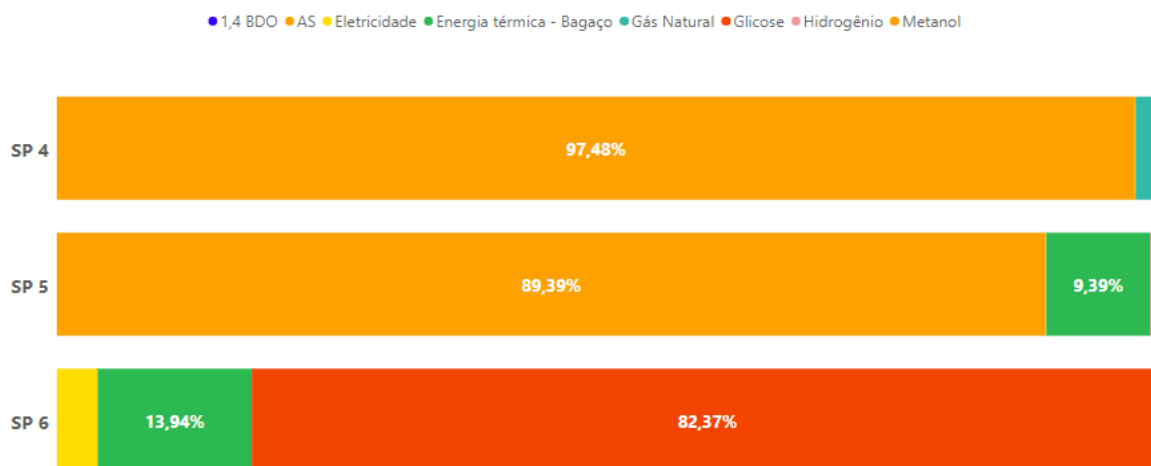


Figura 4-17: Contribuição das entradas por SP para o FI eutrofização da água doce para 1,4-BDO

4.3.3 Ecotoxicidade Terrestre

A Figura 4-18 resume os resultados da categoria de impacto de ecotoxicidade terrestre calculados para os diferentes sistemas de produtos de 1,4-BDO. O SP 5 apresenta o maior impacto, sendo esse de 28,46 kg 1,4-DCB eq/kg 1,4-BDO. Os SPs 6 e 4 apresentam impactos significativamente menores, de 12,43 e 7,50 kg 1,4-DCB eq/kg 1,4-BDO, respectivamente.

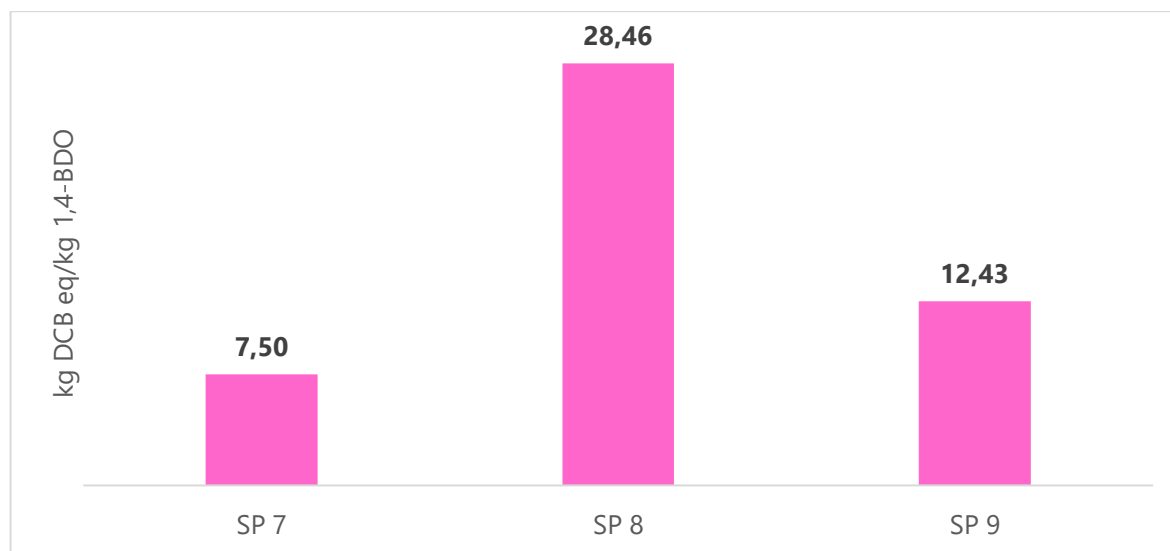


Figura 4-18: Resultados para a categoria de impacto ecotoxicidade terrestre dos processos de produção de 1,4-BDO

A contribuição por entrada para a categoria de impacto ecotoxicidade terrestre é apresentada Figura 4-19. Esse indicador é impactado principalmente pelos fertilizantes utilizados na plantação de cana-de-açúcar, o que justifica o maior impacto causado pelas rotas de origem renovável, assim como foi observado na Seção 4.2.4. A discrepância entre o processo DAVY e o fermentativo pode ser justificada pela maior quantidade de glicose e, portanto, cana-de-açúcar, necessária para produzir uma mesma quantidade de 1,4-BDO, como é apresentado na Seção 4.1.2.

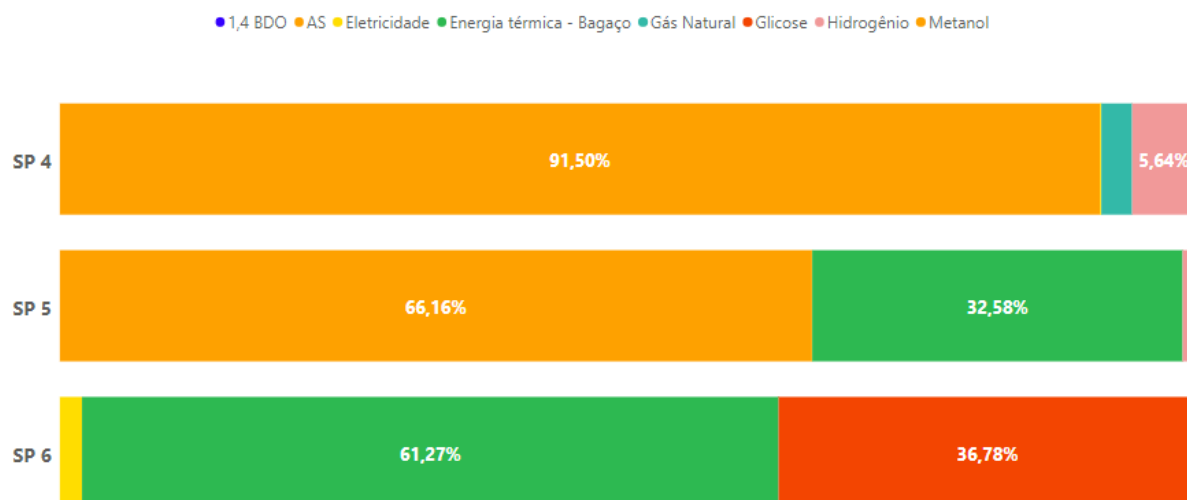


Figura 4-19: Contribuição das entradas por SP para categoria de impacto ecotoxicidade terrestre para 1,4-BDO

4.3.4 Uso de Terra

A Figura 4-20 resume os resultados da categoria de impacto uso da terra calculados para os diferentes sistemas de produto 1,4-BDO. O SP 5 apresenta a maior contribuição para o FI, sendo essa de 36,86 m²/ano.kg 1,4-BDO. O SP 6 apresenta FI intermediário de 27,81 m²/ano.kg 1,4-BDO e o SP 4, apresenta o menor FI, sendo esse 0,67 m²/ano.kg 1,4-BDO.

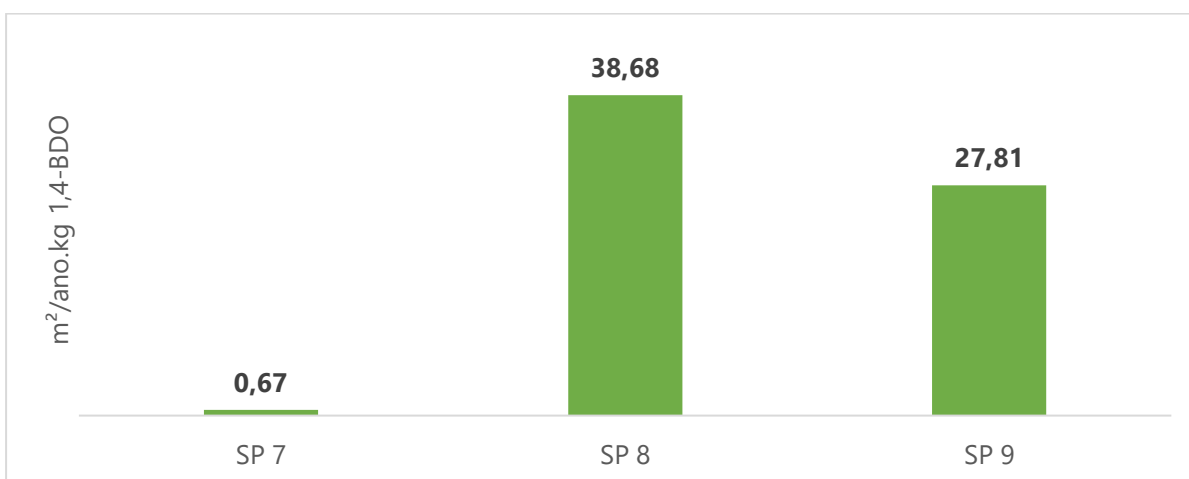


Figura 4-20: Fator de impacto uso de terra dos processos de produção de 1,4-BDO

Por meio da avaliação da Figura 4-20 e da contribuição por entrada para a categoria de impacto uso da terra apresentada na Figura 2-1 4-21, percebe-se que, assim como na avaliação de impactos para a categoria de impacto uso da terra para as rotas de AS discutida na Seção 4.2.4, o SP 4 resulta no menor impacto por conta do AS petroquímico demandar menos área produtiva que o AS de fonte renovável. Entre as opções de matéria prima renovável, o SP 5 resulta em maior impacto que o SP 6. Como discutido anteriormente, o SP 5 demanda uma maior quantidade de cana-de-açúcar para obter a mesma massa de 1,4-BDO que o SP 6 e, conseqüentemente, demanda uma maior área de plantio.

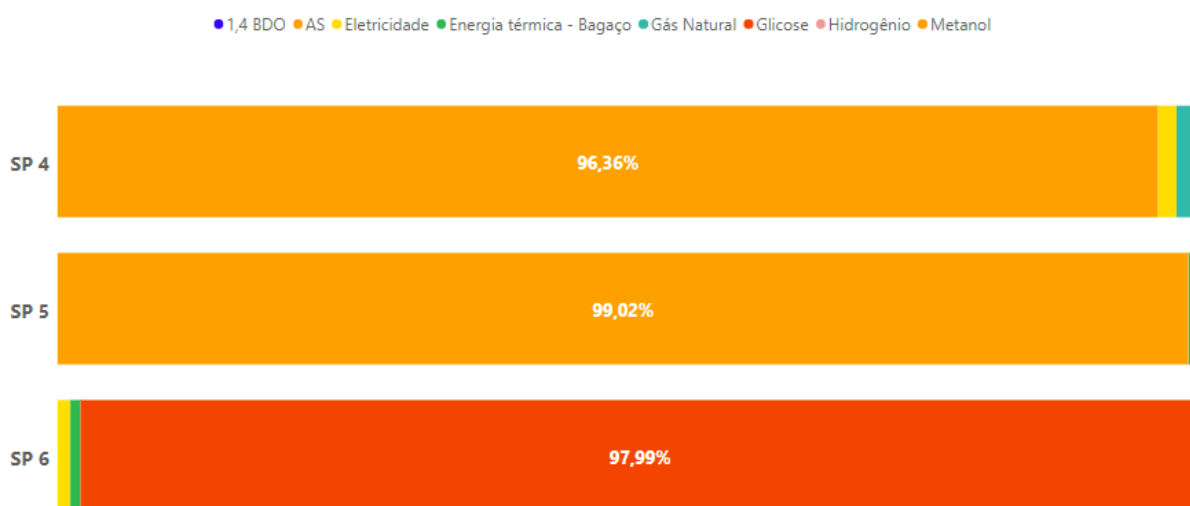


Figura 4-21: Contribuição por entrada para a categoria de impacto uso da terra para as rotas de produção do 1,4-BDO

4.3.5 Escassez de Recursos fósseis

A Figura 4-22 resume os resultados da categoria de impacto escassez de recursos fósseis calculados para os diferentes sistemas de produto de 1,4-BDO. O SP 4 apresenta o maior impacto, sendo esse de 7,12 kg óleo eq/kg 1,4-BDO. Os sistemas de produto 5 e 6 apresentam impactos significativamente menores, sendo esses de 1,07 e 0,20 kg óleo eq/kg 1,4-BDO.

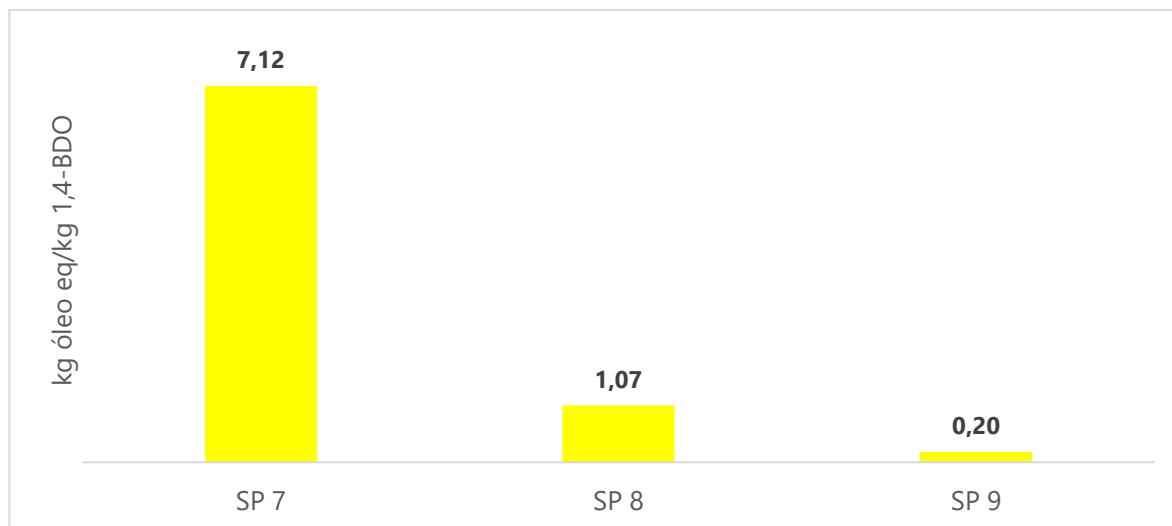


Figura 4-22: Resultados para a categoria de impacto escassez de recursos fósseis dos processos de produção de 1,4-BDO

Por meio da avaliação da Figura 4-22 e da contribuição por entrada para a categoria escassez de recursos fósseis apresentada na Figura 4-233, conclui-se que o SP 4 tem como principal estressor para escassez de recursos fósseis a origem petroquímica das matérias primas e insumos energéticos nesse caso. O SP 5 possui o FI intermediário, já que é impactado pela necessidade de uso de amônia e metanol, insumos não renováveis, para a produção de AS. No presente trabalho, considerou-se que o hidrogênio é proveniente apenas de fonte não renovável.

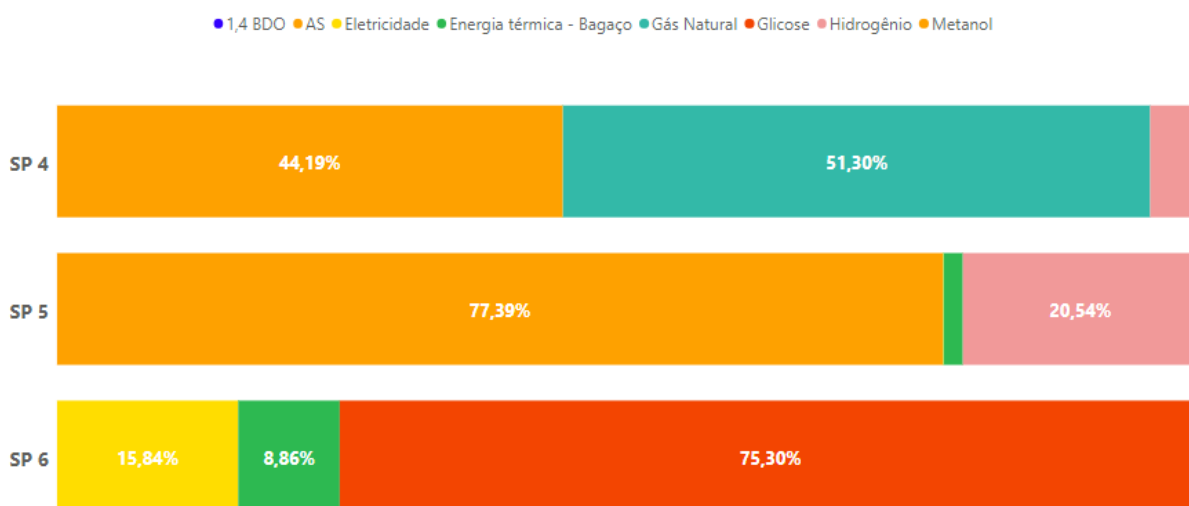


Figura 4-23: Contribuição por entrada para a categoria escassez de recursos fósseis para as rotas de produção de 1,4-BDO

4.3.6 Consumo de água

A Figura 4-24 resume os resultados da categoria de impacto consumo de água calculados para os diferentes sistemas de produto de 1,4-BDO. O SP 5 apresenta o maior impacto, sendo esse de 0,32 kg m³/kg 1,4-BDO. O SP 6 apresenta impacto intermediário de 0,19 m³/kg 1,4-BDO. O SP 4 apresenta o menor impacto de 0,06 kg m³/kg 1,4-BDO.

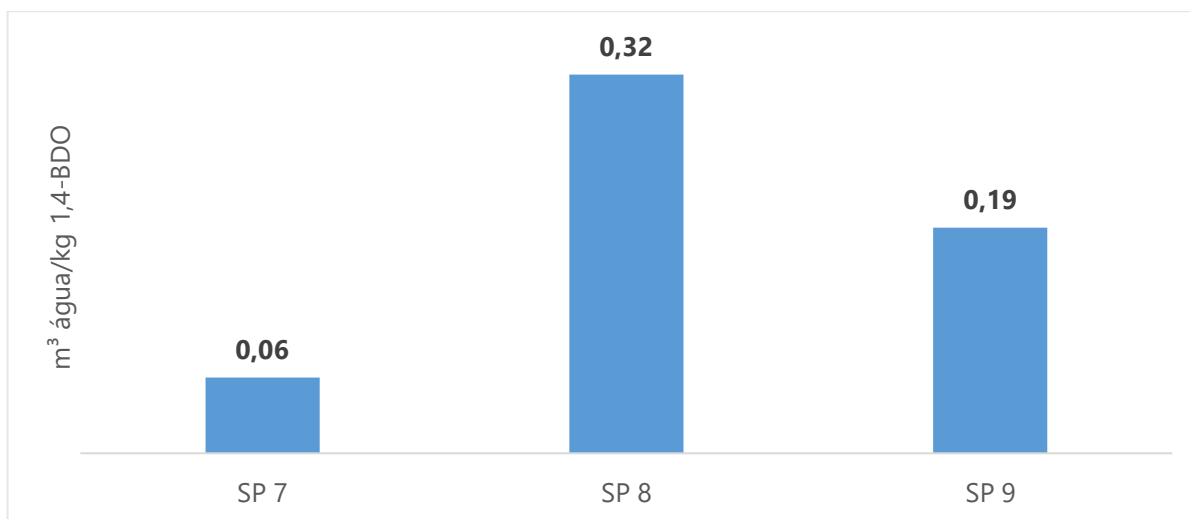


Figura 4-24: Resultados para a categoria de impacto consumo de água dos processos de produção de 1,4-BDO

Por meio da avaliação da Figura 4-244 e da contribuição por entrada para a categoria de impacto consumo de água, apresentada na Figura 4-255, percebe-se que o consumo de água do SP 5 é principalmente impulsionado pela produção de AS renovável, analisado na Seção 4.2.5. Como visto na Seção 4.2.6, o maior estressor para o consumo de água para tal AS (SP 3) é a rota de produção de glicose. Como discutido nas seções anteriores, a principal influência nessa discrepância é a maior necessidade de cana-de-açúcar para obtenção da mesma massa de 1,4-BDO em ambos os processos.

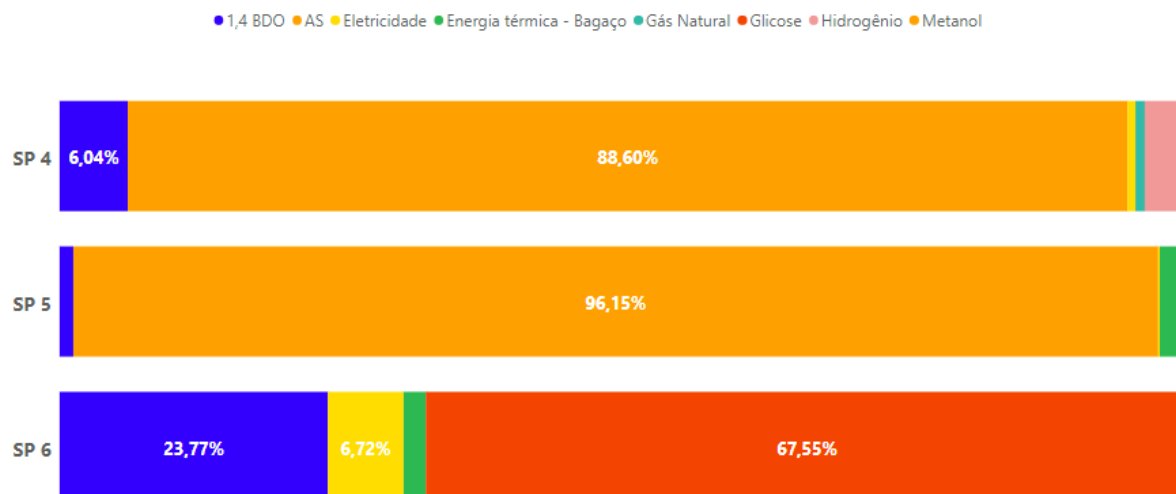


Figura 4-25: Contribuição das entradas por SP para a categoria de impacto consumo de água para 1,4-BDO

4.3.7 Interpretação de Resultados para 1,4-BDO

Por fim, na Figura 4-26 e Tabela 4-5 Análise comparativa dos resultados dos fatores de impacto para os SPs de produção do 1,4-BDO compararam-se os SPs 4, 5 e 6 quanto ao desempenho ambiental. Também foi realizada uma avaliação comparativa entre as rotas oriundas de fonte renovável, a fim de selecionar o caso com menor impacto para seguir como referência para as próximas avaliações.

Tabela 4-5 Análise comparativa dos resultados dos fatores de impacto para os SPs de produção do 1,4-BDO

	SP 4	SP 5	SP 6
Aquecimento Global	6.8	2.0	1.0
Eutrofização da água doce	3.1	1.8	1.0
Ecotoxicidade Terrestre	1.0	3.8	1.7
Uso de Terra	1.0	57.6	41.4
Depleção de recursos fósseis	36.0	5.4	1.0
Consumo de água	1.0	5.0	3.0

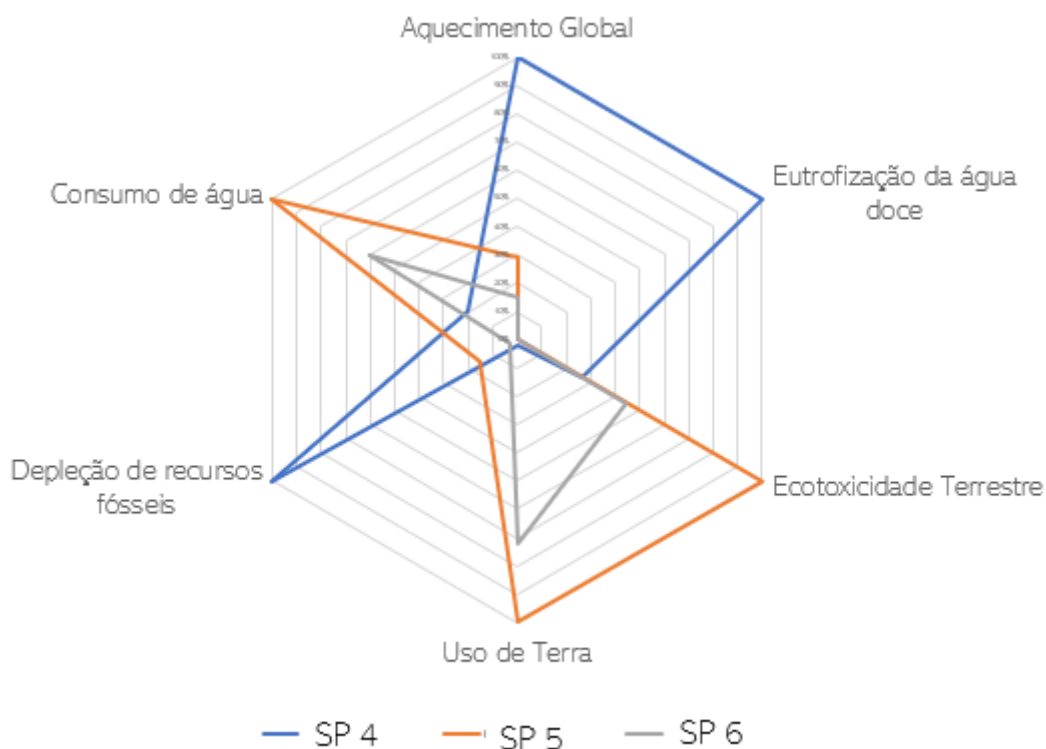


Figura 4-26: Análise comparativa dos resultados das categorias de impactos para os sistemas de produto do 1-BDO.

De forma análoga à observada na Seção 4.2.7, o SP 4, de origem petroquímica, possui menor impacto em três categorias de impacto ambiental: ecotoxicidade terrestre, uso de terra e consumo de água. Por sua vez, o SP 6 apresenta o menor impacto ambiental em termos de aquecimento global, eutrofização da água doce e depleção de recursos fósseis. Por isso, tais SPs serão levados para a avaliação de impactos dos SPs de produção de PBS.

O SP 5 não apresentou o menor impacto em quaisquer das categorias avaliadas e apresentou o pior desempenho ambiental em termos do uso de terra, ecotoxicidade terrestre e consumo de água, as categorias nas quais as rotas renováveis, até agora, apresentaram o pior desempenho. Isso acontece porque, ao aumentar o número de etapas do processo, aumentam-se simultaneamente as quantidades de matérias primas (principalmente a cana-de-açúcar), insumos petroquímicos e energia necessárias para a produção. Isso causa, conseqüentemente, o aumento dos fatores de impacto ambiental associados. Sendo assim, o SP 5 foi desconsiderado nas avaliações de impacto seguintes.

4.4 Avaliação de Impactos da rota de produção de PBS

A avaliação de impactos nos sistemas de produtos de produção de PBS foi realizada como descrito na Seção 3.3. São apresentados a seguir as categorias de impacto calculadas para os sistemas de produto considerados e a contribuição de cada entrada do processo para esses impactos. A interpretação desses resultados é realizada em sequência.

4.4.1 Aquecimento Global

A Figura 4-27 resume os resultados da categoria de impacto aquecimento global calculados para os diferentes sistemas de produto de produção do PBS. Os sistemas de produto 9 e 10 apresentam o maior impacto, sendo 8.58 kg de CO₂ equivalentes para polimerização em suspensão e 6.53 kg CO₂ eq/kg PBS para polimerização em massa. Os SPs 7 e 8 apresentam impactos para aquecimento global significativamente menores, com 4.02 kg de CO₂ equivalentes para a rota em suspensão e 1.95 kg de CO₂ equivalentes para rota em massa.

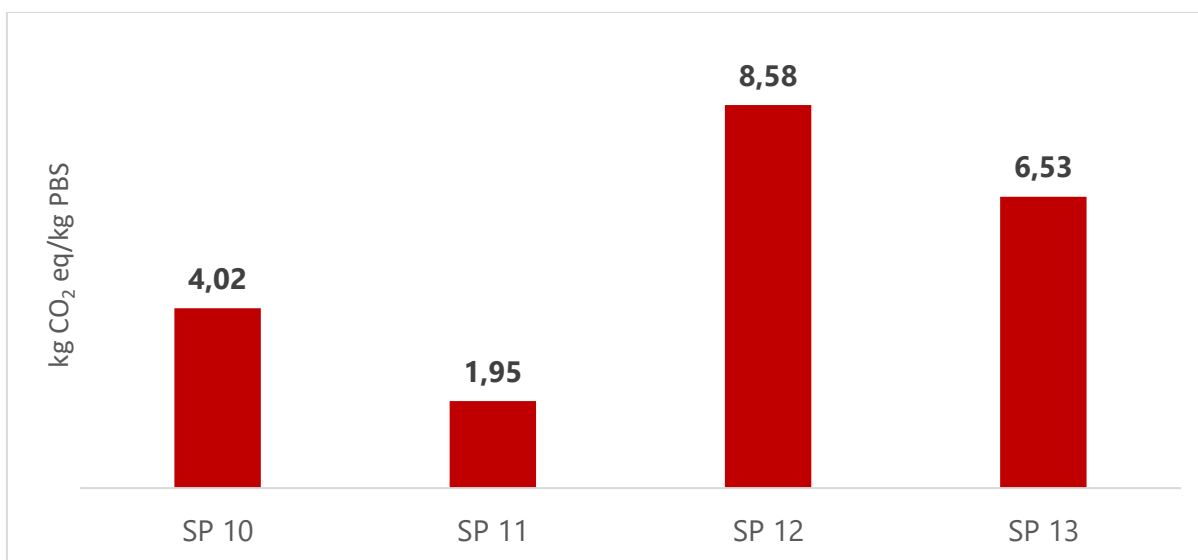


Figura 4-27: Resultado da categoria de impacto aquecimento global para as rotas de produção de PBS

Por meio da avaliação da Figura 4-27 e a avaliação da contribuição de cada entrada para aquecimento global, apresentada na Figura 4-28, percebe-se que no caso dos sistemas de produto 9 e 10 os principais estressores são os monômeros de origem petroquímica, que consistem em totalidade do impacto do SP 10. O SP 9 apresenta um impacto ligeiramente maior, por conta da adição de óleo de soja e acetona, necessários para a polimerização em suspensão.

A mesma discrepância também é percebida na comparação entre os impactos dos SPs 7 e 8, apresentados na Figura 4-27. Na avaliação dos mesmos na Figura 4-28 percebe-se uma distribuição semelhante das contribuições de impacto; porém, nestes SPs o uso dos monômeros de origem renovável resulta em uma contribuição menos significativa para aquecimento global quando comparados ao monômeros de origem petroquímica.

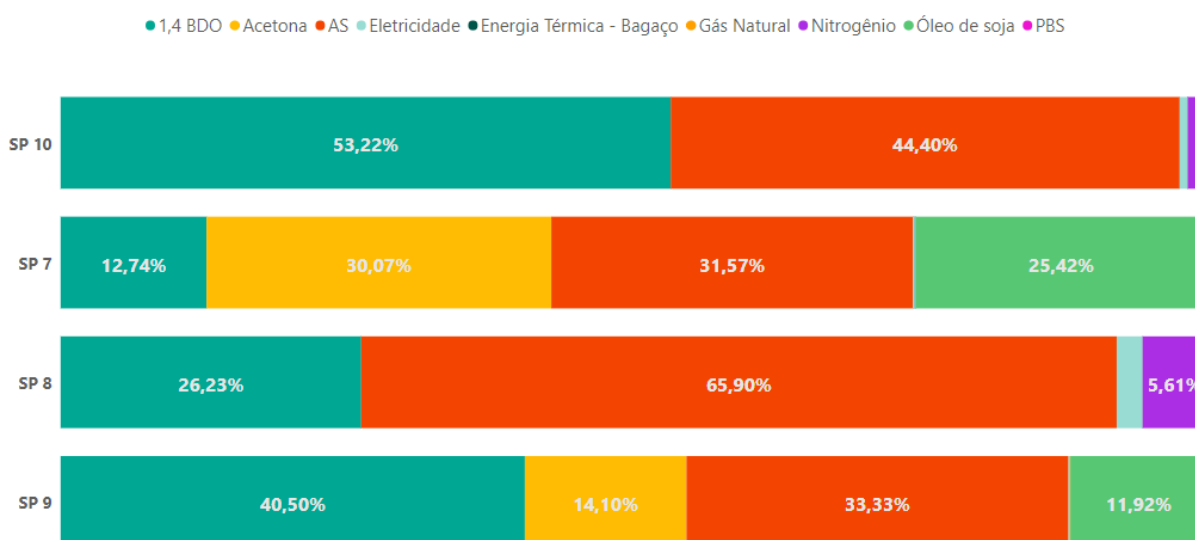


Figura 4-28: Contribuição por entrada para aquecimento global nas rotas produtivas de PBS

4.4.2 Eutrofização da água doce

A Figura 4-29 resume os resultados da categoria de impacto eutrofização de água doce calculados para os diferentes SPs de PBS. O SP 9 apresenta o maior impacto, sendo essa de 0,0119 kg de fósforo para água doce/kg 1,4-PBS. Os SPs 7 e 10 apresentam os menores impactos, sendo essas 0,00097 e 0,00157 kg de fósforo para água doce/kg PBS, respectivamente. O SP 8 apresenta o menor impacto de 0,00055 kg de fósforo para água doce/kg. PBS.

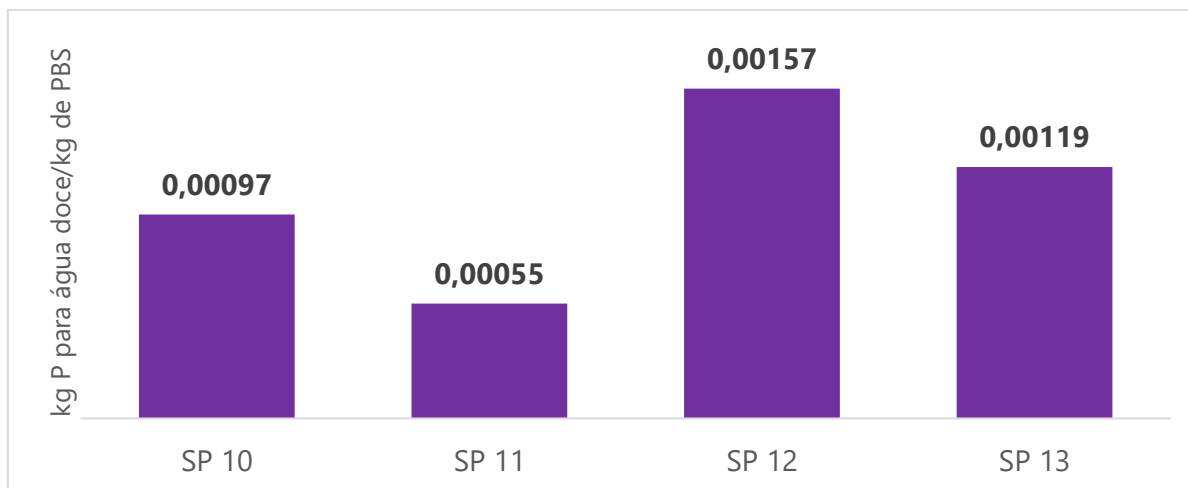


Figura 4-29: Resultado da categoria de impacto eutrofização da água doce para as rotas de produção de PBS

Por meio da avaliação da Figura 4-29 e da contribuição por entrada apresentada na Figura 4-30 a natureza do monômero se mostra imperativa em relação ao *design* do processo; visto que o resultado da categoria de impacto eutrofização da água fresca foi maior para o processo de PBS petroquímico (SPs 9 e 10), e menor para os SPs renováveis (SPs 7 e 8), análogo ao resultado para a mesma categoria de impacto no caso do AS e 1,4-BDO, relatados nas Seções 4.2.2 e 4.3.2.

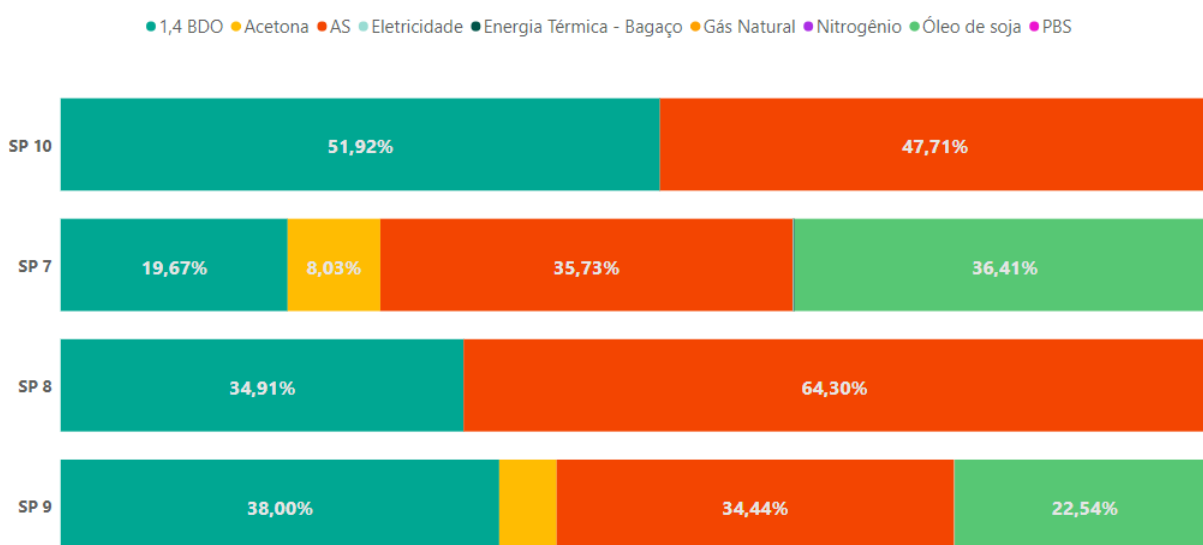


Figura 4-30: Contribuição por entrada para eutrofização da água doce para as rotas de polimerização de PBS

4.4.3 Ecotoxicidade Terrestre

A Figura 4-31 resume os resultados da categoria de impacto ecotoxicidade terrestre calculados para os diferentes SPs do PBS. Os SPs 7 e 8 apresentam os maiores impactos, sendo 19.88 kg de DCB equivalentes para polimerização em suspensão e 18.78 kg de DCB equivalentes para polimerização em massa. Os SPs 9 e 10 apresentam resultados para ecotoxicidade terrestre menos expressivos, com 8.90 kg de DCB equivalentes para a rota em suspensão e 8.34 kg de DCB equivalentes para rota em massa.

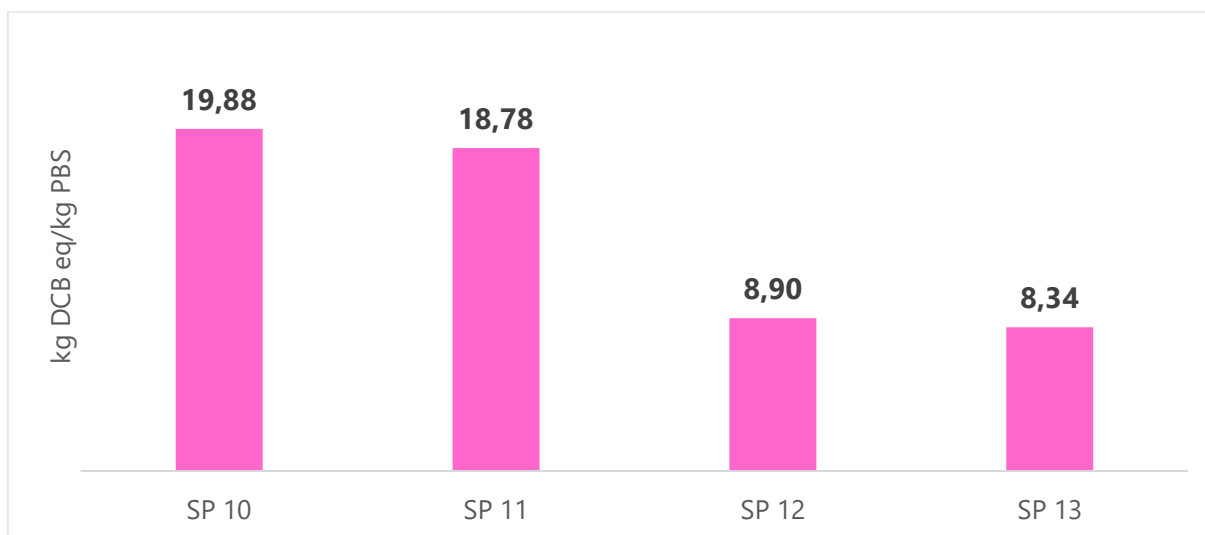


Figura 4-31: Resultado do FI ecotoxicidade terrestre para as rotas de polimerização de PBS

Por meio da avaliação da Figura 4-31 e contribuição por entrada apresentada na Figura 4-32, a natureza do monômero se mostra imperativa em relação ao *design* do processo na avaliação de impacto ambiental. Ao utilizar monômeros de origem agrícola, obtém-se maior impacto de ecotoxicidade em relação a monômeros de origem petroquímica. Esse resultado

já era esperado devido à avaliação de impactos de ecotoxicidade terrestre para AS e 1,4-BDO apresentada nas Seções 4.2.3 e 4.3.3.

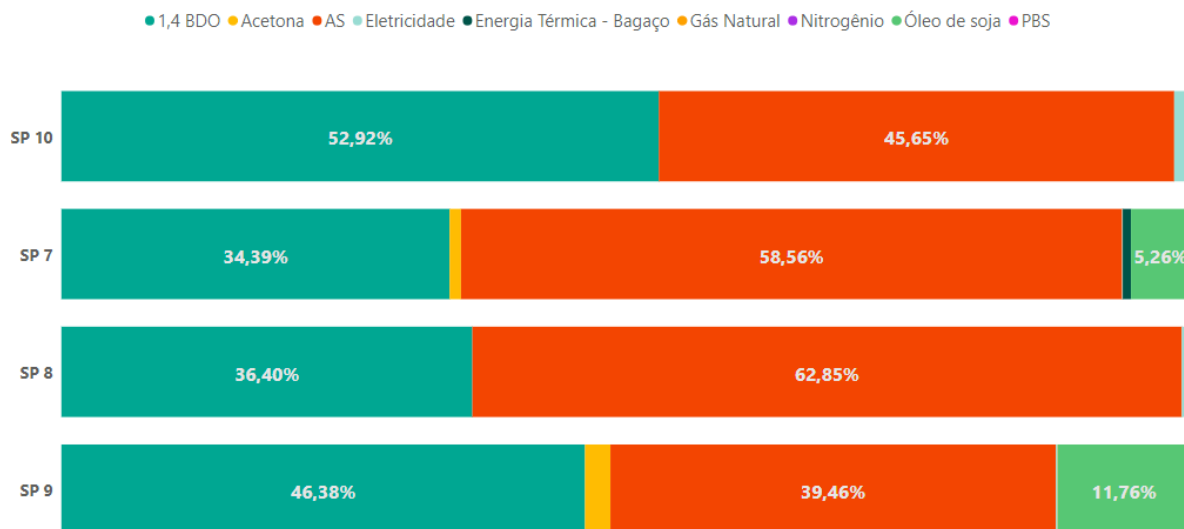


Figura 4-32: Contribuição por entrada para ecotoxicidade terrestre para as rotas de polimerização de PBS

4.4.4 Uso de Terra

A Figura 4-33 resume os resultados da categoria uso de terra calculados para os diferentes SPs de produção do PBS. Os SPs 7 e 8 apresentam os maiores impactos, sendo 44.91 m² de terra para polimerização em suspensão e 35.31 m² de terra para polimerização em massa. Os SPs 9 e 10 apresentam impactos para uso de terra menos expressivos, com 10,98 m² de terra para a rota em suspensão e 0.83 m² de terra para rota em massa.

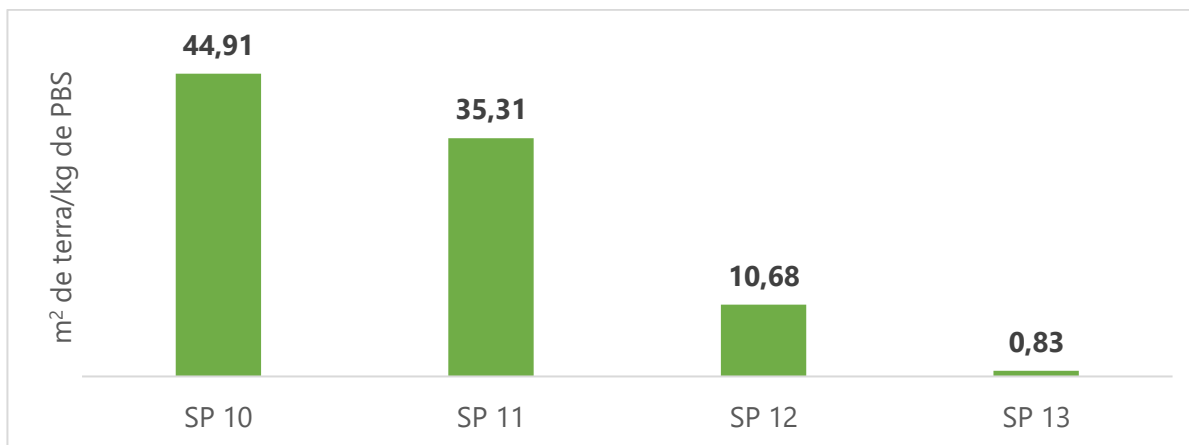


Figura 4-33: Resultado da categoria de impacto uso de terra para as rotas de polimerização do PBS

Por meio da avaliação da Figura 4-33 e da contribuição por entrada apresentada na Figura 4-34, tem-se um caso no qual a origem dos monômeros se mostra imperativa em relação ao *design* do processo na avaliação de impacto ambiental. Os SPs 7 e 8 resultam em maior impacto para uso de terra quando comparados aos SPs 9 e 10, de forma análoga às avaliações do impacto para os monômeros, apresentadas nas Seções 4.2.4 e 4.3.4

O processo em suspensão apresenta um maior impacto quando comparado ao processo em massa. A Figura 4-34 aponta que esse acréscimo ocorre por conta do emprego do óleo de soja, que também demanda terras agricultáveis para o cultivo da soja.

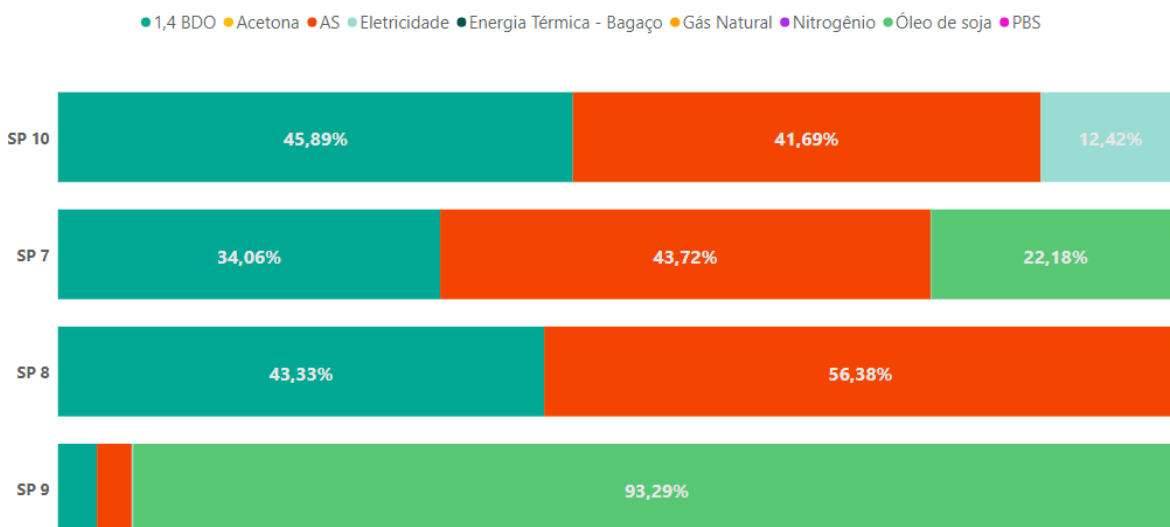


Figura 4-34: Contribuição por entrada para uso de terra para as rotas de polimerização de PBS

4.4.5 Escassez de recursos fósseis

A Figura 4-35 resume os resultados para a categoria de impacto de escassez de recursos fósseis calculados para os diferentes SPs de produção do PBS. Os SPs 9 e 10 apresentam maiores impactos, sendo 6.31 kg de óleo/kg de PBS para polimerização em suspensão e 5.40 kg de óleo/kg de PBS para polimerização em massa. Os SPs 7 e 8 apresentam menores impactos para escassez de recursos fósseis, com 1,46 kg de óleo/kg de PBS para a rota em suspensão e 0,75 kg de óleo/kg de PBS para rota em massa.

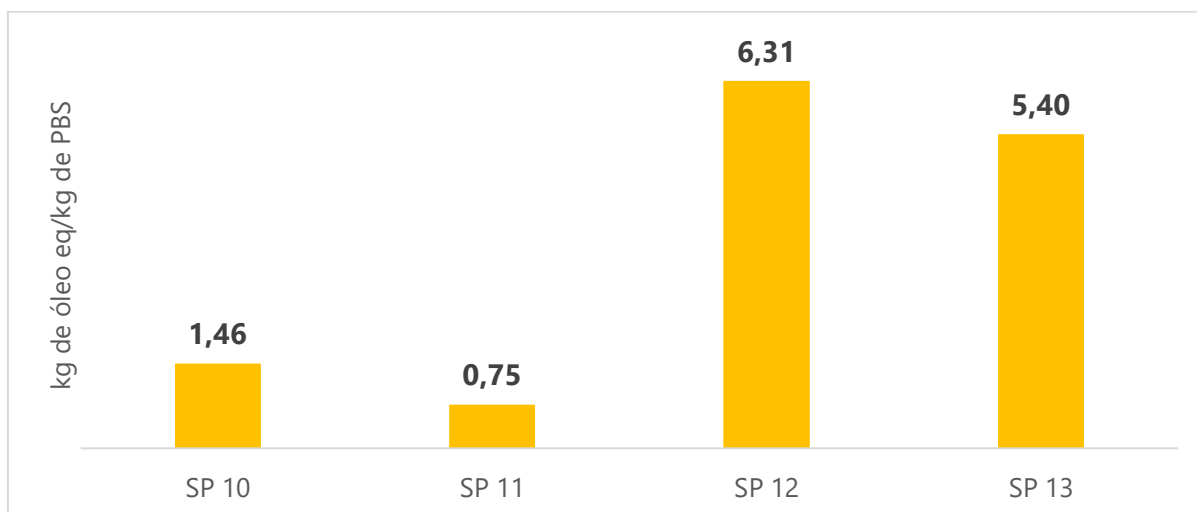


Figura 4-35: Resultado da categoria de impacto escassez de recursos fósseis para as rotas de produção de PBS

A partir da avaliação da Figura 4-35, percebe-se que o impacto calculado apresenta um padrão semelhante aos casos anteriores, em que a natureza dos monômeros parece exercer uma contribuição mais relevante do que o *design* do processo. Os SPs 9 e 10 apresentam maior impacto por conta da origem petroquímica dos monômeros empregados, maiores ofensores ao resultado, como apresentado na contribuição de cada entrada para a categoria de escassez de recursos fósseis, apresentado na Figura 4-36.

A Figura 4-36 também sugere que o emprego de acetona na polimerização em suspensão também é relevante na quantificação do impacto. Outro ponto interessante é que para os casos de polimerização em massa o consumo de gás natural não é uma entrada muito relevante para

o impacto, o que reforça que o fator que melhor o define são os monômeros empregados e não o processo em si.

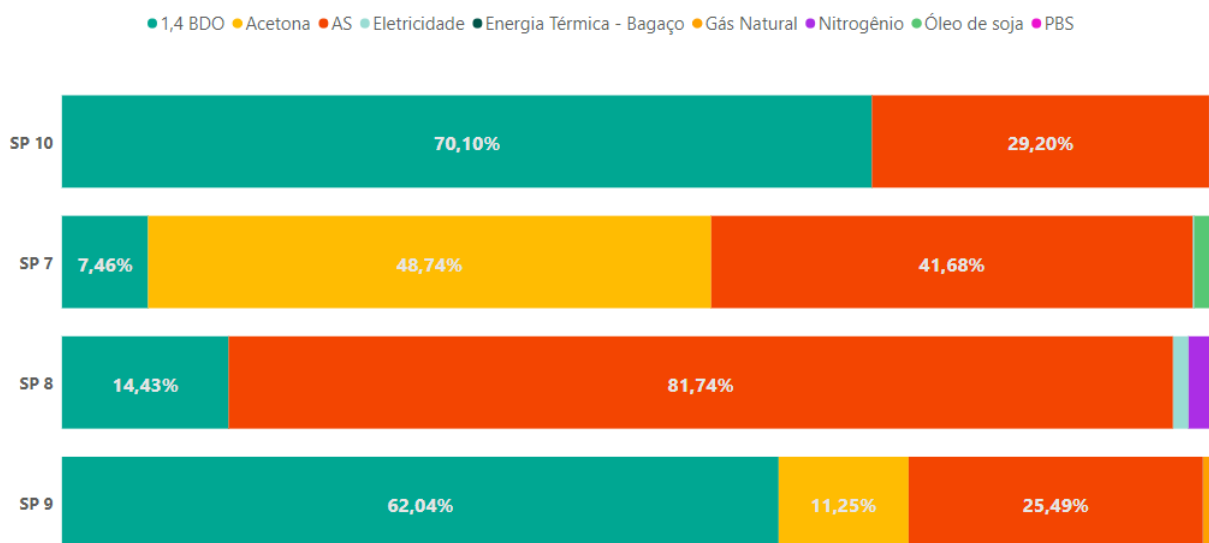


Figura 4-36 Contribuição por entrada para escassez de recursos fósseis para as rotas de produção do PBS

4.4.6 Consumo de água

A Figura 4-37 resume os resultados para a categoria de impacto consumo de água calculados para os diferentes SPs de produção do PBS. Os SPs 8 e 7 apresentam os maiores impactos, sendo 0.29 m³ de água/kg de PBS para polimerização em massa e 0.27 m³ de água/kg de PBS para polimerização em suspensão. Os SPs 9 e 10 apresentam impactos menores sendo 0.09 m³ de água/kg de PBS para polimerização em massa e 0.07 m³ de água/kg de PBS para polimerização em suspensão.

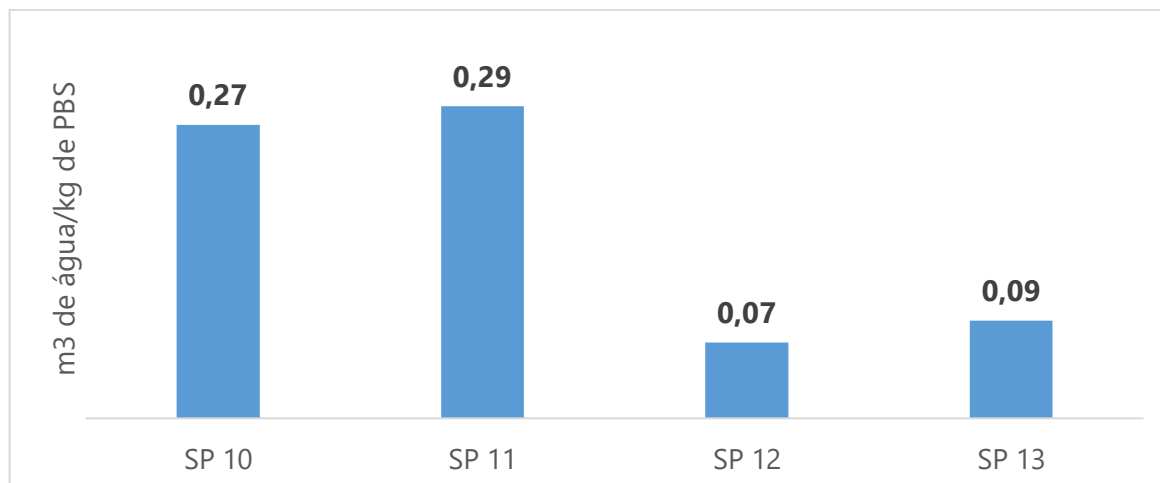


Figura 4-37: Resultado do FI consumo de água nos processos de polimerização do PBS

Analisando os resultados para consumo de água, como apresentando na Figura 4-37 e a contribuição de cada entrada para consumo de água para PBS, como apresentada na Figura 4-38, percebe-se uma vez mais que a natureza dos monômeros também parece exercer maior influência sobre o impacto ambiental do que o *design* do processo. Nesse caso, analogamente à avaliação dos monômeros, apresentada nas Seções 4.2.6 e 4.3.6, os processos com monômeros de fonte renovável apresentam maior consumo do que aqueles de origem petroquímica, justificado pela necessidade de irrigação para cultivo da cana-de-açúcar.

Ao comparar a polimerização em suspensão e a polimerização em massa, percebe-se que a segunda resulta em um consumo de água ligeiramente mais elevado. A partir da avaliação da 4-38 e do inventário do sistema apresentado na Seção 4.1.3, fica claro que os principais ofensores são os monômeros, especialmente o AS, mas que a maior exigência de consumo de água para resfriamento na polimerização em massa também exerce influência sobre o resultado.

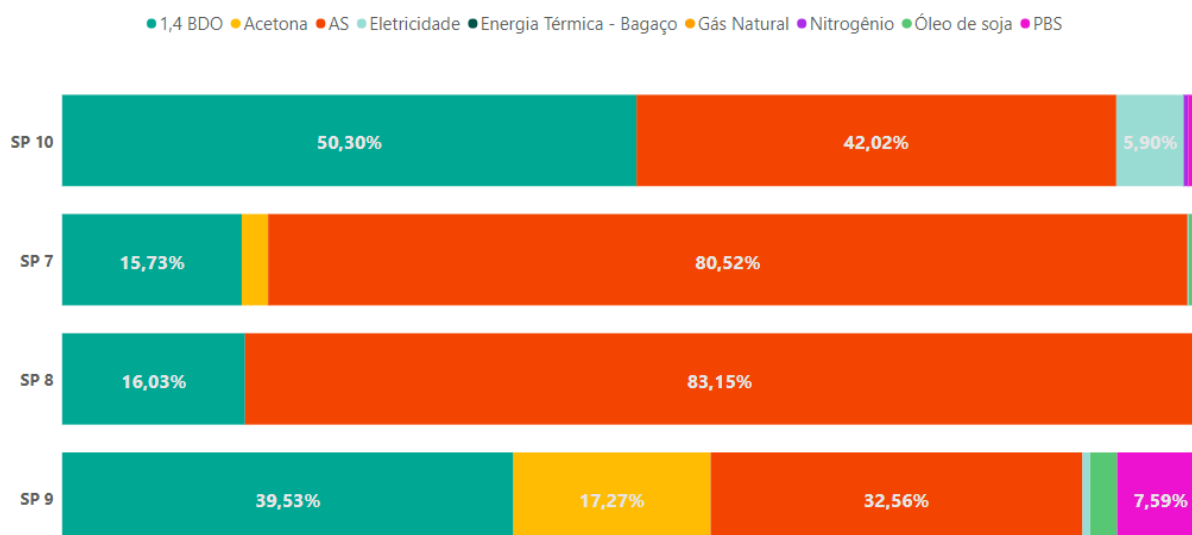


Figura 4-38: Contribuição por entrada para consumo de água para as rotas de produção do PBS

4.4.7 Interpretações dos resultados para o PBS

Por fim, comparam-se os SPs 7, 8, 9 e 10 quanto ao desempenho ambiental na Tabela 4-6 e Figura 4-39: Análise comparativa dos resultados dos fatores de impacto para os SPs avaliados de produção do PBS. A comparação é realizada com base na natureza dos monômeros e o *design* do processo selecionado, como mostrado na Tabela 4-6.

Tabela 4-6: Análise comparativa dos resultados dos fatores de impacto para os SPs avaliados de produção do PBS.

Categoria de Impacto	SP 7	SP 8	SP 9	SP 10
Aquecimento Global	2	1	4	3
Eutrofização da água doce	2	1	3	2
Ecotoxicidade Terrestre	2	2	1	1
Uso de Terra	54	43	13	1
Depleção de recursos fósseis	2	1	8	7
Consumo de água	4	4	1	1

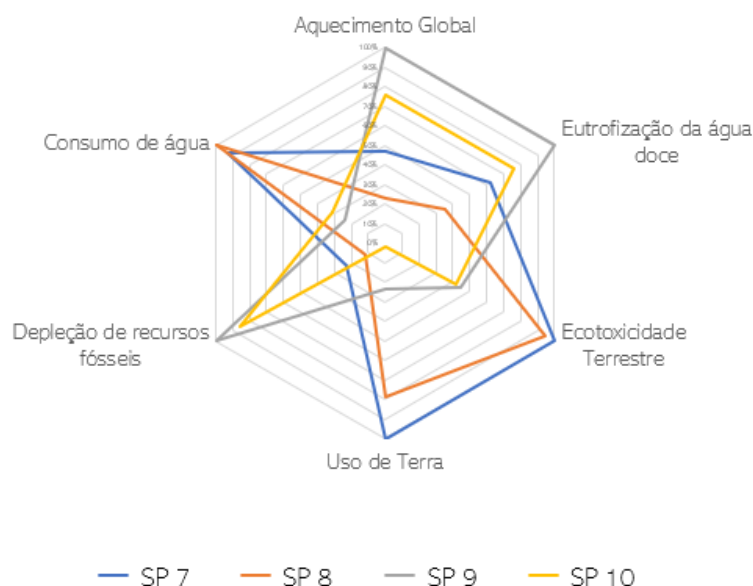


Figura 4-39: Análise comparativa dos resultados dos fatores de impacto para os SPs avaliados de produção do PBS

Assim como avaliado nas Seções 4.2.7 e 4.3.7, ao avaliar a origem dos monômeros, percebe-se que nos SPs em que se empregam monômeros de origem renovável obtêm-se desempenhos melhores nas categorias de impacto de aquecimento global, eutrofização da água doce e depleção de recursos fósseis. Em compensação, obtêm-se desempenhos piores nos quesitos de uso de terra, ecotoxicidade terrestre e consumo de água.

O estudo sugere que o uso de monômeros de origem renovável exerce impacto significativo nas emissões de GEE em um processo. Tal abordagem é extremamente interessante, tendo em vista o desafio que a humanidade enfrenta em relação ao combate ao aquecimento global. No entanto, o estudo também evidencia que a pressão que o emprego de monômeros de origem vegetal pode exercer sobre os ecossistemas terrestres, levando a impactos até 54 vezes maiores nesse caso que os observados com monômeros petroquímicos.

A migração para uma economia de recursos de origem renovável é inevitável. No entanto, vale lembrar que nesse SP a superfície terrestre não pode constituir a fonte de todos os recursos demandados pela humanidade. Portanto, a sustentabilidade dessa superfície deve ser também prioritária. Nesse contexto, pode-se especular que o espaço na superfície também será

muito mais escasso e valioso que hoje, ficando clara a necessidade de considerar outras estratégias para que a demanda por matérias primas virgens não seja tão alta.

Na comparação entre os diferentes processos usados para a produção do PBS, o processo em massa resulta em menores fatores de impacto em todas as categorias que o processo em suspensão. Isso pode ser explicado pelo fato de a rota utilizar menos insumos materiais, como o óleo de soja ou a acetona. Portanto, a pegada ambiental das matérias primas se sobrepõe ao fato de processo em suspensão dispensar a etapa de extrusão e ocorrer em tempos menores. Por isso, é necessário intensificar o processo de polimerização em suspensão, embora o produto obtido nesse caso encontre nichos de mercado distintos dos produzidos em massa. Vale ressaltar que o processo em suspensão é capaz de atingir um tamanho de partícula polimérica muito menor que o processo em massa (DUTRA *et al.*, 2019), o que o torna o produto obtido mais adequado para aplicações farmacêuticas e cosméticas.

Capítulo 5

Conclusões

5.1 Conclusões

O presente trabalho teve como objetivo comparar o desempenho ambiental da síntese de poli(succinato de butileno) (PBS) por diferentes rotas. Para isso, realizou-se uma avaliação de ciclo de vida (ACV) adotando como unidade funcional a produção de 1 kg de PBS na região sudeste do Brasil em 2022. O escopo da avaliação foi do berço ao portão da fábrica. O problema teve então que também considerar a obtenção de matérias primas, renováveis e petroquímicas, e as rotas produtivas dos respectivos monômeros, ácido succínico (AS) e 1,4-butanodiol (1,4-BDO).

A avaliação de impactos em todos os casos sugere que, ao empregar matérias primas de fonte renovável, diminuem-se os fatores de impacto relacionados a categoria aquecimento global. Simultaneamente, observa-se uma perda de desempenho nas categorias relacionadas a ecossistemas terrestres como observado em PATEL *et al.* (2018), FORTE *et al.* (2016), MOUSSA *et al.* (2016). Tal fato pode ser atrelado à produção de cana-de-açúcar, que demanda área agricultável e emprega fertilizantes e pesticidas químicos em seu cultivo. Logo, apesar de existir uma amenização de um impacto de grande relevância, há, em contrapartida, aumento expressivo da pressão sobre os ecossistemas terrestres.

A migração de sistemas de produção baseados em matérias primas de fonte petroquímica para sistemas baseados em fontes renováveis é inevitável. Consequentemente, haverá um aumento da exploração da superfície terrestre para obtenção de recursos e energia, visto que o petróleo é um recurso obtido do subsolo. Tendo em vistas que um dos princípios da economia circular é a promoção de meios de produção que sejam regenerativos por natureza, os tempos e processos de recuperação da superfície terrestre não podem ser negligenciados e, então, processos que elevem impactos ambientais relacionados à ecossistemas terrestres podem ser mais arriscados em um futuro próximo.

O presente estudo então reforça que se apenas o desacoplamento de matérias primas de origem fóssil for explorado na concepção de um processo ou produto inovador, ela pode ser insuficiente para a construção de um futuro mais sustentável. Outras alternativas de produção e consumo devem ser simultaneamente investigadas e implantadas para atingimento de tal objetivo. No sistema de produto pra PBS estudado, rotas de produção baseadas em polímeros pós consumo, biomassa de segunda geração e até mesmo resíduos devem ser exploradas para diminuir tais impactos associados ao material.

A origem das matérias primas não foi o único parâmetro variado na avaliação de impactos. A AICV para a produção de AS considerou alterações na rota renovável que envolviam natureza renovável ou fóssil dos combustíveis. No caso estudado, portanto, a seleção do combustível na planta possui baixa relevância em relação a esses impactos, que estão relacionados principalmente ao cultivo da cana-de-açúcar e ao uso dos insumos químicos empregados na rota.

A avaliação de impactos para a produção de 1,4-BDO sugere que a conversão de AS obtido de glicose resulta em menor desempenho ambiental que a rota direta de fermentação de glicose a 1,4-BDO. O segundo caso exige uma massa menor de cana-de-açúcar para uma mesma massa de 1,4-BDO produzida além de consistir um processo realizado em menos etapas, o que significa menos perdas por rendimento, resíduos e emissões. Esse ponto chama a atenção por o 1-4-BDO ser um derivado da plataforma de AS, apresentada na Figura 2-6, e a mesma possuir compostos que são obtidos após 3 ou mais conversões, o que pode acarretar em maior impacto ambientais para produções dos compostos e tornando tais rotas ambientalmente inviáveis.

A avaliação de impactos comparativa entre os processos de polimerização em suspensão e polimerização em massa sugere uma leve vantagem de desempenho ambiental para a rota de polimerização em massa, devido ao uso de menos insumos materiais, já que dispensa o uso de óleo de soja e acetona. A diferença nas categorias de impacto ambiental para ambos os processos não é tão discrepante. Sendo assim, a seleção do processo de polimerização deve se basear no desempenho exigido pelo polímero, já que a polimerização em suspensão permite alcançar tamanhos de partícula muito menores que o processo em massa, podendo servir para aplicações mais nobres e de maior valor agregado.

O presente trabalho menciona em diversas ocasiões a migração de um sistema de produção baseado em recursos fósseis para um com recursos renováveis. Essa afirmação pode passar a impressão errônea de apenas um tipo de sistema de obtenção de matérias primas ou produção será o adequado para um produto. No entanto, matérias primas e processos adequados dependerão também de fatores geográficos, econômicos e tecnológicos, aos quais a viabilidade ambiental está intrinsecamente conectada. Sendo assim, ao falarmos de uma migração para um novo modelo de produção estamos falando de uma ampliação de opções de fontes de matérias primas e processos, aos quais deverão atender limitações não apenas financeiras, mas sociais e ambientais, e fomentando assim, o desenvolvimento sustentável.

5.2 Sugestões para trabalhos futuros

Novos estudos devem ser realizados para avaliar mais precisamente o impacto ambiental associado à rota química de produção de PBS. Sendo assim as seguintes sugestões para futuros trabalhos podem ser pontuadas:

- ∞ Avaliar outras matérias primas para obtenção do AS, incluindo de segunda geração;
- ∞ Avaliar outros meios de suspensão para polimerização em suspensão ou aumentar o número de ciclos de óleo de soja;
- ∞ Avaliar a integração de processos para o sistema e seu impacto no consumo de água.
- ∞ Avaliar os impactos associados à recuperação dos monômeros do PBS via reciclagem;
- ∞ Realizar um estudo de incertezas acerca dos resultados obtidos;
- ∞ Avaliar os impactos relacionados ao fim de vida do material em suas diferentes rotas de reciclagem – química, mecânica, enzimática e compostagem;
- ∞ Avaliar a integração de processos para o sistema e seu impacto no consumo de água.
- ∞ Realizar um estudo de viabilidade econômica e social;

Capítulo 6

Referências Bibliográficas

AHN, J.H., JANG, Y.-S. AND YUP LEE, S., 2016, *Industrial Biotechnology*. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, pp. 505–544.

ASPENTECH, 2021, *Aspen Plus User Models*, V12.1.

BLONK. 2023. *Agri-footprint 6 Methodology Report* Disponível em: <<https://acv.ibict.br/acv/o-que-e-o-acv/>> Acesso em: 01 set. 2023

BIDDY, M. J., SCARLAT C., KINCHIN, C., 2016, *Chemicals from Biomass: A Market Assessment of Bioproducts with Near-Term Potential*. NREL. Relatório técnico.

BRASKEM, 2018, *Avaliação do Ciclo de Vida do PE Verde I'm green™*. Relatório técnico.

BRASKEM, 2022, *Estudo do ciclo de vida de kits cirúrgicos*. Disponível em: <https://www.braskem.com.br/Portal/Principal/arquivos/Estudos/Braskem_ACV_KitsCirurgicos_PT.pdf>. Acesso em: 10 jul 2022.

BULLE, C., MARGNI, M., PATOILLARD, L., BOULAY, A., BOURGAULT, G. DE BRUILLE, V. *et al.*, 2019, “IMPACT World+: a globally regionalized life cycle impact assessment method”, *The International Journal of Life Cycle Assessment*, 24(9), pp. 1653–1674.

BURGARD, A., BURK M., OSTERHOUT R., VAN DIEN S., YIM H., 2016, “Development of a commercial scale process for production of 1,4-butanediol from sugar”, *Current Opinion in Biotechnology*. Elsevier Ltd, pp. 118–125.

BRUNDTLAND, G.H. (1987) *Our Common Future: Report of the World Commission on Environment and Development*. Geneva.

CGEE, 2009, “*Bioetanol combustível: uma oportunidade para o Brasil*”. Campinas, Centro de Gestão e estudos estratégicos.

CGEE, 2010, “*Química Verde no Brasil: 2010-2030*”. Brasília, Centro de Gestão e estudos estratégicos.

CHATAMHOUSE, *Circular Economy*, 2022. Disponível em: <<https://circulareconomy.earth/>> Acesso em: 10 jul 2022.

CHEHEBE, J.R. (1998) *Análise de Ciclo de Vida de Produtos*. Rio de Janeiro: Qualitymark.

CHEROENNET, N., SHINATIPHKRON P., THANAWADEE L., SUWANMANEE U., 2017, “A trade-off between carbon and water impacts in bio-based box production chains in Thailand: A case study of PS, PLAS, PLAS/starch, and PBS”, *Journal of Cleaner Production*, 167, pp. 987–1001.

COELHO, A.M. (2008) *Proposta para um Indicador Global de Avaliação da Sustentabilidade Ambiental de Empreendimentos*. Lisboa. Universidade Lusófona de Humanidades e Tecnologias.

COK, B., TSIROPOULOS, I., ROES, A. L., PATEL, M. K., 2014, “Succinic acid production derived from carbohydrates: An energy and greenhouse gas assessment of a platform chemical toward a bio-based economy”, *Biofuels, Bioproducts and Biorefining*, pp. 16–29.

CONAB, 2021, “*Série Histórica das Safras*”. Brasília. Companhia nacional de abastecimento.

DA SILVA DUTRA, L., DE SOUZA BELAN COSTA, T., LOBO, V. T. V., PAIVA, T. F., DE SOUZA NELE, M., & PINTO, J. C. 2019. “Preparation of Polymer Microparticles Through Non-aqueous Suspension Polycondensations: Part III—Degradation of PBS Microparticles in Different Aqueous Environments”. *Journal of Polymers and the Environment*, 27(1), 176–188. -x

DICKSON, R., MANCINI, E., GARG, N., WOODLEY, J. M., GERNAEY, K. V., PINELO, M., LIU, J., MANSOURI, S. S., 2021, “Electronic Supplementary Information (ESI) Sustainable bio-succinic acid production: superstructure optimization, techno-economic and lifecycle assessment”, *Energy and Environmental Science*, 14, pp. 3542-3558.

DUALIBE, A., DELGADO, J.J.S. and PINTO, J.C. (2019) *Reciclagem Química de Resíduos Plásticos*. 1ed edn. Rio de Janeiro: Editora E-papers.

DUTRA, L., 2019, *Desenvolvimento de um processo de policondensação em suspensão para produção de micropartículas biodegradáveis*, Tese de D.Sc. EQ/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

DUTRA, L., PINTO, M. C. C., LIMA, R. C., FRANCO, M., VIANA, M., CIPOLATTI, E. P., MANOEL, E. A., FREIRE, D. M. G., & PINTO, J. C. (2022a). “Preparation of Polymer Microparticles Through Non-aqueous Suspension Polycondensations: Part VI—Analyses of Chemical and Enzymatic Degradation of Poly(Butylene Succinate) (PBS)”. *Journal of Polymers and the Environment*, 30(5), 1893–1907.

DUTRA, L., PINTO, M. C. C., LIMA, R. C., FRANCO, M., VIANA, M., CIPOLATTI, E. P., MANOEL, E. A., FREIRE, D. M. G., & PINTO, J. C. 2022b. “Preparation of Polymer Microparticles Through Non-aqueous Suspension Polycondensations: Part VI—Analyses of Chemical and Enzymatic Degradation of Poly(Butylene Succinate) (PBS)”. *Journal of Polymers and the Environment*, 30(5), 1893–1907.

DUTRA, L., SOUZA, M. N., & PINTO, J. C. 2018. “Preparation of Polymer Microparticles through Nonaqueous Suspension Polycondensations”. Part II—Effects of Operating Variables on Properties of Poly(butylene succinate). *Macromolecular Reaction Engineering*, 12(6), 1800039.

ECOINVENT, Disponível em <<https://ecoinvent.org/the-ecoinvent-database/>> Acesso em: 01 set. 2023.

ELIA, V., GNONI, M.G. AND TORNESE, F. 2017, “Measuring circular economy strategies through index methods: A critical analysis”, *Journal of Cleaner Production*, 142, pp. 2741–2751.

EMBRAPA, 2022, *Áreas cultivadas no Brasil e no mundo*. Disponível em: <<https://ainfo.cnptia.embrapa.br/digital/bitstream/item/174066/1/4942.pdf>>. Acesso em: 16 dez 2022.

FERONE, M., RAGANATI, F., OLIVIERI G. & MARZOCHELLA A., 2019, “Bioreactors for succinic acid production processes”, *Critical Reviews in Biotechnology*. Taylor and Francis Ltd, pp. 571–586.

FUTURE MARKET INSIGHTS (FMI), Poly(butylene) succinate market, 2023. Disponível em: <<https://www.futuremarketinsights.com/reports/polybutylene-succinate-market>> Acesso em: 20 abr. 2023.

FORTE, A., ZUCARO, A., BASOSI, R., FIERRO A., 2016, “LCA of 1,4-butanediol produced via direct fermentation of sugars from wheat straw feedstock within a territorial biorefinery”, *Materials*, 9(7), 563.

FRISCHKNECHT, R., STEINER, R. AND JUNGBLUTH, N., 2009, *The Ecological Scarcity Method - Eco-Factors 2006: a method for impact assessment in LCA*. Relatório técnico.

GEYER, R., JAMBECK, J.R. AND LAW, K.L., 2017, “Production, use, and fate of all plastics ever made”, *Science Advances*, 3(7).

GOEDKOOOP, M. *et al.*, 2016, *Introduction to LCA with SimaPro*. Manual.

GRAND VIEW SEARCH, 2022, *Global poly(butylene succinate) market*, Disponível em: <<https://www.grandviewresearch.com/press-release/global-polybutylene-succinate-market>>. Acesso em: 11/ago/2023.

GUINÉE, J.B., 2002, *Handbook on Life Cycle Assessment: operational guide to the ISO Standards*, Kluwer Academy Publishers.

HUIJBREGTS, M.A.J., STEIMANN, Z.J.N, ELSHOUT, P.M.F., STAM, G., VERONES, F., VIEIRA, M. D. M., HOLLANDER, A. ZIJP, M., VAN ZELM, R., 2017, A

harmonized life cycle impact assessment method at midpoint and endpoint level. RIVM. Relatório técnico.

IBICT. Disponível em: <<https://acv.ibict.br/acv/o-que-e-o-acv/>> Acesso em: 01 set. 2023

IEA, 2018, *The Future of Petrochemicals: Towards more sustainable plastics and fertilisers*. Disponível em: <<https://www.iea.org/reports/the-future-of-petrochemicals> >. Acesso em: 17 nov 2022.

ifBB, 2021, *Biopolymers - Facts and Statistics*. Relatório técnico.

INTERNATIONAL STANDARD ORGANIZATION, 2006, *Life cycle assessment - principals and framework*. 2a ISO 14040:2006.

IOANNIDOU, S.M., LADAKIS, D., MOUTOUSIDI, E., DHESKALI, E., KOOKOS, I. K., CÂMARA-SALIM, I., MOREIRA, M. T., KOUTINAS, A., 2020, “Tecno-economic risk assessment, life cycle analysis and life cycle costing for a poly(butylene succinate) and poly(lactic acid) production using renewable resources”, *Science of The Total Environment*. Elsevier Ltd., 806(4), 150594.

JACQUEL, N., FREYERMOUTH, F., FENOUILLOT, F., ROUSSEAU, A., PASCAULT, J. P., FUERTES, P., SAINT-LOUP, R., 2011, “Synthesis and properties of poly(butylene succinate): Efficiency of different transesterification catalysts”, *Journal of Polymer Science, Part A: Polymer Chemistry*, 49(24), pp. 5301–5312.

JANSEN, M.L.A. AND VAN GULIK, W.M., 2014, “Towards large scale fermentative production of succinic acid”, *Current Opinion in Biotechnology*. Elsevier Ltd, pp. 190–197.

JESWANI, H.K., AZAPAGIC, A., SCHEPELMANN, P., RITTHOFF, M., 2010, “Options for broadening and deepening the LCA approaches”, *Journal of Cleaner Production*, 18(2), pp. 120–127.

JM, 2021, Butanediol (BDO), THF, GBL process. Disponível em: <<https://matthey.com/en/products-and-services/chemical-processes/licensed-processes/butanediol-bdo-thf-gbl-process>>. Acessado em 18 jul 2021.

JOLLIET, O. ET AL., 2003, ‘IMPACT 2002+: A new life cycle impact assessment methodology’, *The International Journal of Life Cycle Assessment*, 8(6), p. 324.

KLEIN, B.C., SILVA, J. F. L., JUNQUEIRA, T. L., RABELO, S. C., ARRUDA, P. V., IENCZAK, J. L., MANTELATTO, P. E., PRADELLA, J. G. C., VAZ JUNIOR, S., BONOMI, A., 2017, “Process development and techno-economic analysis of bio-based succinic acid derived from pentoses integrated to a sugarcane biorefinery”, *Biofuels, Bioproducts and Biorefining*, 11(6), pp. 1051–1064.

LI, X., MUPONDWA, E., 2021, “Empirical analysis of large-scale bio-succinic acid commercialization from a technoeconomic and innovation value chain perspective: BioAmber biorefinery case study in Canada”, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 137.

MANCINI, E., MANSOURI, S. S., GERNAEY, K. V., JIANQUAN, L., PINELO, M., 2020, “From second generation feed-stocks to innovative fermentation and downstream techniques for succinic acid production”, *Critical Reviews in Environmental Science and Technology*, 50(18), pp. 1829–1873.

MANO, E., MENDES, L., 1999, *Introdução a Polímeros*. 2 ed. São Paulo, Edgard Blücher.

MARQUES, D., 2019, *Avaliação Técnico-Econômica da Produção de Eteno via Etanol Obtido em uma Usina Flex de Cana-de-Açúcar e Milho*, Projeto de Final de Curso. EQ/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

MENDES, N.C., BUENO, C. AND OMETTO, A.R., 2015, “Avaliação de Impacto do Ciclo de Vida: revisão dos principais métodos”, *Production*, 26(1), pp. 160–175.

MINISTRY OF HOUSING, S.P. AND THE E., 2000, *Eco-indicator 99 manual for designers: a damage oriented method for Life Cycle Impact Assessment*. Relatório técnico.

MONTEIRO, A., 2018, *Contribuição da reciclagem química de resíduos plásticos para o desenvolvimento sustentável*, Tese de D.Sc. COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

MONTEIRO, A. DA R. D., DE MIRANDA, D. M. V., DA SILVA PINTO, J. C. C., & SOTO, J. J. 2022. Life Cycle Assessment of the Catalytic Pyrolysis of High-Density Polyethylene (HDPE) and High-Impact Polystyrene (HIPS). *Macromolecular Reaction Engineering*, 16(6).

MORALES, M., ATAMAN, M., BADR, S., LINSTER, S., KOURLIMPINIS, I., PAPADOKONSTANTAKIS, S., HATZIMANIKATIS, V., HUNGERBÜHLER, K., 2016, “Sustainability assessment of succinic acid production technologies from biomass using metabolic engineering”, *Energy and Environmental Science*, 9(9), pp. 2794–2805.

MOUSSA, H.I., ELKAMEL, A. AND YOUNG, S.B., 2016, “Assessing energy performance of bio-based succinic acid production using LCA”, *Journal of Cleaner Production*, 139, pp. 761–769.

NGHIEM, N.P., KLEFF, S. AND SCHWEGMANN, S., 2017, “Succinic acid: Technology development and commercialization”, *Fermentation*. MDPI AG.

NIEDER-HEITMANN, M., HAIGH, K. AND GÖRGENS, J.F., 2019, “Process design and economic evaluation of integrated, multi-product biorefineries for the co-production of bio-energy, succinic acid, and polyhydroxybutyrate (PHB) from sugarcane bagasse and trash lignocelluloses”, *Biofuels, Bioproducts and Biorefining*, 13(3), pp. 599–617.

ONU, *Getting Started with the Sustainable Development Goals*, 2015. Disponível em: <<https://irp-cdn.multiscreensite.com/be6d1d56/files/uploaded/getting-started-guide-FINAL-PDF-.pdf>> Acesso em: 02 dez. 2022.

PATEL, M. K., BECHU, A., VILLEGAS, J. D., BERGEZ-LACOSTE, M., YEUNG, K., MURPHY, R., WOODS, J., MWABONJE, O. N., NI, Y., PATEL, A. D., GALLAGHER, J., BRYANT, D., 2018, “Second-generation bio-based plastics are becoming a reality – Non-renewable energy and greenhouse gas (GHG) balance of succinic acid-based plastic end products made from lignocellulosic biomass”, *Biofuels, Bioproducts and Biorefining*, 12(3), pp. 426–441.

PETROCHEMICAL PROCESS, 2005, *Hydrocarbon Processing Petrochemical's Process Handbook*. Relatório técnico.

PINAZO, J.M., DOMINE, M. E., PARVULESCU, V., PETRU, F., 2015, “Sustainability metrics for succinic acid production: A comparison between biomass-based and petrochemical routes”, *Catalysis Today*, 239, pp. 17–24.

PINTO, J. C., 2012. *Impactos ambientais causados pelos plásticos*. Serviços Editoriais Ltda. Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

PIRES COSTA, L., VAZ DE MIRANDA, D. M., & PINTO, J. C. 2022. “Critical Evaluation of Life Cycle Assessment Analyses of Plastic Waste Pyrolysis”. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 10(12), 3799–3807.

PLASTICSEUROPE, *Plastics - the Facts*, 2017. Disponível em: <https://www.plasticseurope.org/application/files/5715/1717/4180/Plastics_the_facts_2017_FINAL_for_website_one_page.pdf> Acesso em: 02 jul. 2022.

PLASTICSTODAY, *Words of Wisdom: Understanding twin-screw extruders: The high-speed energy input (HSEI) concept*, 2021, Disponível em: <<https://www.plasticstoday.com/extrusion-film-sheet/words-wisdom-understanding-twin-screw-extruders-high-speed-energy-input-hsei>> Acesso em: 12 dez. 2021.

PRÉ CONSULTANTS. 2016. PSimaPro Database Manual Methods Library, SimaPro Tutorial. PRé Consultants bv. 2016

REBITZER, G., et al. 2004. Life cycle assessment: Part 1: Framework, goal and scope definition, inventory analysis, and applications. *Environmental International*. 2004, Vol. 30, 5, pp. 701 - 720.

RENOUF, M.A., POGGIO, M., COLLIER, A., PRICE, N., SCHROEDER, B. L., ALLSOPP, P. G., 2018, “Customised life cycle assessment tool for sugarcane (CaneLCA)—a development in the evaluation of alternative agricultural practices”, *The International Journal of Life Cycle Assessment*, 23(11), pp. 2150–2164.

RIBEIRO, P. H. 2009. Contribuição ao banco de dados brasileiro para apoio a avaliação do ciclo de vida: fertilizantes nitrogenados. Escola Politécnica, USP. São Paulo : s.n., 2009. p. 375, Tese de Doutorado

SATAM, C.C., DAUB, M. AND REALFF, M.J., 2019, “Techno-economic analysis of 1,4-butanediol production by a single-step bioconversion process”, *Biofuels, Bioproducts and Biorefining*, 13(5), pp. 1261–1273.

SEABRA, J.E.A., MACEDO, I. C., CHUM, H. L., FARONI, C. E., SARTO, C. A., 2011, “Life cycle assessment of Brazilian sugarcane products: GHG emissions and energy use”, *Biofuels, Bioproducts and Biorefining*, 5(5), pp. 519–532.

SEO, E. S. M., KULAY, L. A. 2006. Life Cycle Assessment: Management tool for DecisionMaking. *InterfaceEHS*. 2006, Vol. 1, 1.

SHARIF, M., TURNER, K., 1986, “*Process for the production of butane-1,4-diol*”. UK.

SHIELDS, D. J., BLENGINI, G. A., SOLAR, S. V., 2011, ‘Integrating Life Cycle Assessment and Other Tools for Ex Ante Integrated Sustainability Assessment in the Minerals Industry’, *American Journal of Applied Sciences*, 8(11), pp. 1214–1227.

SILVA, R.G.C., FERREIRA, T.F. AND BORGES, É.R., 2020, “Identification of potential technologies for 1,4-Butanediol production using prospecting methodology”, *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, 95(12), pp. 3057–3070.

SIMAPRO. 2022. PRé Consultants, 2022.

STATISTA. *Annual production of plastics worldwide from 1950 to 2021*. Disponível em: <<https://www.statista.com/statistics/282732/global-production-of-plastics-since-1950/>> Acesso em: 09/ago?2023

STEEN, B., 1999, *A systematic approach to environmental priority strategies in product development (EPS) (Version 2000)*. Gothenburg: Chalmers University of Technology. (CPM report 1999:4).

TECCHIO, P., FRENI, P., DE BENEDETTI, B. FENOUILLOT, F., 2016, “Ex-ante Life Cycle Assessment approach developed for a case study on bio-based polybutylene succinate”, *Journal of Cleaner Production*, 112, pp. 316–325.

TOFFOLETTO, L., BULLE, C., GODIN, J., REID, C., DESCHÊNES, L., 2007, ‘LUCAS - A New LCIA Method Used for a Canadian-Specific Context’, *The International Journal of Life Cycle Assessment*, 12(2), pp. 93–102.

TOMAZ, J. P., 2020, *Avaliação econômica de uma planta de policondensação em suspensão*, Trabalho de conclusão de curso. EQ/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

UNEP, 2014, *Valuing Plastics: The Business Case for Measuring, Managing and Disclosing Plastic Use in the Consumer Goods Industry*. Relatório técnico.

VALT, R. B. G. 2004. Análise do Ciclo de Vida de Embalagens de Pet, de Alumínio e de Vidro para Refrigerantes no Brasil Variando a Taxa de Reciclagem dos Materiais. Área de Concentração em Engenharia de Processos Térmicos e Químicos, UFPR. Curitiba : Setor de Tecnologia, 2004. Dissertação de Mestrado

VASCONCELOS, Y., 2019, *Planeta Plástico*, FAPESP, 281, CAPA. Disponível em:<<https://revistapesquisa.fapesp.br/planeta-plastico/>>. Acesso em: 18 set 2022.

VASSILEV, S. V. AND VASSILEVA, C.G., 2016, “Composition, properties and challenges of algae biomass for biofuel application: An overview”, *Fuel*, 181, pp. 1–33.

VAZ JÚNIOR, S., 2013, *Biomassa para química verde*. Embrapa Agroenergia.

VEMURI, G.N., EITEMAN, M.A., ALTMAN, E., 2002, “Succinate production in dual-phase *Escherichia coli* fermentations depends on the time of transition from aerobic to anaerobic conditions”, *Journal of Industrial Microbiology & Biotechnology*, 28(6), pp. 325–332.

WENZEL, H., HAUSCHILD, M., ALTING, L., 1997, *Environmental Assessment of Products*. Springer. Boston, MA, EUA.

WERPY, T., PETERSEN, G., 2004, *Top Value Added Chemicals from Biomass. Volume 1, Results of Screening for Potential Candidates from Sugars and Synthesis Gas*. Washington, DC, EUA.

WEF, ELLEN MACARTHUR FOUNDATION, MCKINSEY&COMPANY, 2016. *The New Plastics Economy — Rethinking the future of plastics*. Relatório técnico.

YEDUR, S., BERGLUND, K.A., DUNUWILA, D.D., 2001, *Succinic acid production and purification*, EUA.