

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA (DEQ)

ANA RACHEL BERNARDI FERRACINI

AVALIAÇÃO DA PRODUÇÃO DE BIODIESEL
SEGUNDO OS PRINCÍPIOS DA ENGENHARIA DA
SUSTENTABILIDADE

SÃO CARLOS - SP
2021

ANA RACHEL BERNARDI FERRACINI

AVALIAÇÃO DA PRODUÇÃO DE BIODIESEL SEGUNDO OS PRÍNCÍPIOS DA
ENGENHARIA DA SUSTENTABILIDADE

Trabalho de graduação apresentado ao Departamento de Engenharia Química, da Universidade Federal de São Carlos, como requisito parcial para obtenção do título de bacharel em Engenharia Química.

Prof. Dra. Alice Medeiros de Lima
Orientadora

São Carlos - SP
2021

AVALIAÇÃO DA PRODUÇÃO DE BIODIESEL SEGUNDO OS PRINCÍPIOS DA ENGENHARIA
DA SUSTENTABILIDADE

ANA RACHEL BERNARDI FERRACINI

Trabalho de graduação apresentado como requisito parcial para a obtenção do título de bacharel em Engenharia Química pela Universidade Federal de São Carlos.

Aprovado em: 28/06/2021.

BANCA EXAMINADORA

Orientadora

Prof. Dra. Alice Medeiros de Lima

DEQ - UFSCar

Membro da banca (1)

Prof. Dra. Monica Lopes Aguilar

DEQ - UFSCar

Membro da banca (2)

Dra. Simone de Carvalho Miyoshi

DEQ - UFSCar

AGRADECIMENTO

Agradeço primeiramente à Deus, pela minha vida, pelas oportunidades diárias e por estar sempre ao meu lado, me dando saúde, força e determinação durante todos os meus anos de estudo. Agradeço aos meus pais, Lucia Helena e Silvio, por todo o apoio, suporte e educação e se tornarem os meus exemplos de vida. À minha irmã Carolina, por toda paciência e incentivo. Aos meus amigos, de infância e da graduação, por serem minha companhia de estudos e lazer, fazendo a minha jornada muito mais leve e feliz. Aos meus colegas de curso, com quem convivi intensamente durante os últimos anos, pelo companheirismo e pela troca de experiências que me permitiram crescer não só como pessoa, mas também como profissional. A todos da Operação Natal por terem me mostrado as mudanças que podemos fazer no mundo com pessoas que tem o mesmo objetivo e vontade, a lembrança dos momentos vividos e das amizades formadas me moldou para essa nova fase da minha vida. À minha professora orientadora Alice, por todo o suporte e oportunidade de trabalharmos em tema tão importante para o nosso mundo. A todos os professores que conheci e guiaram meu aprendizado até hoje. À cidade de São Carlos, por ter me acolhido tão bem nesses anos de graduação. E, por fim, agradeço à UFSCar e seu corpo docente, que demonstrou estar comprometido com a qualidade e excelência do Ensino, proporcionando meu desenvolvimento profissional e pessoal.

“Melhor que plantar árvores, despoluir rios e proteger animais, é semear a consciência de que a garantia da vida é respeitar as fronteiras da natureza.”

Nildo Lage

RESUMO

Duas das principais atividades causadoras dos impactos ambientais globalmente são a produção de energia e indústrias químicas, em grande parte devido à queima de combustíveis e manipulação de resíduos químicos poluentes ou danosos à saúde. Dentro desse cenário, em 1991, foi introduzido o conceito de química verde, ciência essa que estuda diminuir ou eliminar o uso e geração de substâncias perigosas no desenvolvimento de produtos químicos e processos. Uma de suas vertentes em foco é aumentar o rendimento dos processos, para tentar produzir menos impurezas, e minimizar o consumo de energia. Atrelado a esse panorama, o crescimento do desenvolvimento sustentável em fóruns globais, reitera a importância de ações voltadas aos pilares econômico, social e ambiental para atender as necessidades da sociedade sem prejudicar o futuro do planeta. A engenharia sustentável utiliza dos princípios da sustentabilidade para implementar rotas e soluções com uma visão a longo prazo através de todo ciclo de vida. O trabalho tem como objetivo principal avaliar o processo de produção de biodiesel com os princípios da engenharia sustentável abordando conceitos e analisando dados obtidos através de ferramentas de engenharia de sistemas em processos. No estudo de caso do referente trabalho, foi simulado o processo de produção de biodiesel produzido pelo óleo de palma, através do software de simulação de processos *ASPEN Plus V11*[®]. Uma outra ferramenta *Waste Reduction algorithm (WAR algorithm)* empregada com o intuito de fornecer dados relevantes para a análise e aplicação no desenvolvimento do processo em questão. Os resultados encontrados mostraram que pequenas variações realizadas em um processo para atingir maior eficiência energética ou rendimento, podem resultar diretamente em impactos ambientais e, portanto, afetar a análise do ciclo de vida do produto. Também foi visto que, para a temática ser totalmente implementada e ter um maior papel na sociedade, ela precisa ser introduzida já na formação dos novos profissionais, para trazer mudanças e soluções sustentáveis ao longo de seu caminho pessoal e profissional.

Palavras-chave: Desenvolvimento de processo. WAR algorithm. Engenharia sustentável.

ABSTRACT

Two of the main activities responsible for the environmental impacts globally are energy production and chemical industries, largely due to the burning of fuels and the handling of polluting or health-damaging chemical residues. Within this scenario, in 1991, the concept of green chemistry was introduced, a science that studies to reduce or eliminate the use and generation of hazardous substances in the development of chemical products and processes. One of its aspects in focus is to increase the efficiency of the processes, to try to produce less impurities, and to minimize energy consumption. Linked to this panorama, the growth of sustainable development in global forums reiterates the importance of actions aimed at the economic, social and environmental pillars to meet the needs of society without harming the future of the planet. Sustainable engineering uses the principles of sustainability to implement routes and solutions with a long-term vision throughout the entire lifecycle. This work has as main objective to evaluate the biodiesel production process with the principles of sustainable engineering, approaching concepts and analyzing data obtained through systems engineering tools in processes. In the case study of the related work, the biodiesel production process produced by palm oil was simulated using the ASPEN Plus V11® process simulation software. Another tool, WASTE Reduction algorithm (WAR algorithm) was used in order to provide relevant data for analysis and application in the development of the process in question. The results found showed that small variations carried out in a process to achieve greater energy efficiency or yield, can directly result in environmental impacts and, therefore, affect the analysis of the product's life cycle. It was also seen that, for the theme to be fully implemented and have a greater role in society, it needs to be introduced already in the training of new professionals, to bring changes and sustainable solutions along their personal and professional path.

Keyword: Process development. WAR algorithm. Sustainable Engineering.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Definição de sustentabilidade	18
Figura 2 – Participação de fontes energéticas na matriz brasileira.....	29
Figura 3 – Fluxograma simplificado da produção de biodiesel por óleos vegetais ou gorduras	32
Figura 4 – Reação de transesterificação de triglicerídeos com metanol.....	34
Figura 5 - Processo de produção de biodiesel no Aspen Plus V11 [®]	35
Figura 6 - Processo de produção de biodiesel simulado no Aspen Plus V11 [®]	38
Figura 7 - Análise energética comparativa do processo objetivo e atual	39
Figura 8 - Processo de produção de biodiesel após a adição de um novo trocador de calor	42
Figura 9 - Análise energética comparativa do processo objetivo e do atual no processo simulado de produção do biodiesel com um trocador extra	42

LISTA DE TABELAS

QUADRO 1 – COMPOSIÇÃO MOLAR DO ÓLEO DE PALMA.....	35
QUADRO 2 – PARÂMETROS DOS EQUIPAMENTOS UTILIZADOS NO PROCESSO .	36
QUADRO 3 – UTILIDADES ALOCADAS NO PROCESSO	36
QUADRO 4 – RESULTADOS DA ECONOMIA DE ENERGIA POR UTILIDADE	39
QUADRO 5 – ANÁLISE DO WAR ALGORITHM.....	40
QUADRO 6 – SOLUÇÕES PARA ALTERAÇÃO DO DESIGN DO PROCESSO DE PRODUÇÃO	41
QUADRO 7 – RESULTADOS DA ECONOMIA DE ENERGIA POR UTILIDADES COM TROCADOR EXTRA.....	43
QUADRO 8 – ANÁLISES DO WAR ALGORITHM NO PROCESSO COM UM TROCADOR EXTRA.....	43

NOMENCLATURA

CNPE – Conselho Nacional de Política Energética
DNC – Diretrizes Curriculares Nacionais
EPA – Environmental Protection Agency
IUPAC – International Union of Pure and Applied Chemistry
IPCC – Intergovernmental Panel on Climate Change
IRENA – Agência Internacional de Energia Renovável
ISA – análise de sensibilidade do indicador
LCA – Life Cycle Analysis
ODS – Objetivos de Desenvolvimento Sustentável
ONU – Organização das Nações Unidas
PEI – Potential Environmental Impacts
PPC – Projetos Pedagógicos do Curso
WAR – Waste Reduction

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	12
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	14
2.1. QUÍMICA VERDE	14
2.1.1. Panorama	14
2.1.2. Definição e seus 12 princípios	15
2.2. DESENVOLVIMENTO SUSTENTÁVEL	16
2.2.1. Precedentes históricos e contexto atual	16
2.2.2. Definição	18
2.2.3. Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS)	19
2.2.4. Engenharia Sustentável	21
2.2.5. Princípios de Hannover	22
2.3. FERRAMENTAS DE AVALIAÇÃO DE IMPACTOS AMBIENTAIS	24
2.3.1. Análise de Ciclo de Vida	24
2.3.2. Produção de produtos químicos e gerenciamento dos materiais	25
2.4. PRODUÇÃO DE BIODIESEL POR ÓLEOS VEGETAIS	28
2.4.1. Biocombustíveis	28
2.4.2. O biodiesel como um dos principais biocombustíveis	30
2.4.3. Processo de produção do biodiesel	31
3. METODOLOGIA	33
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO	38
4.1. ESTUDO DE CASO: SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE PRODUÇÃO DE BIODIESEL	38
4.2. A ABORDAGEM DA ENGENHARIA DA SUSTENTABILIDADE NO ENSINO DA ENGENHARIA QUÍMICA	44
5. CONSIDERAÇÕES FINAIS	47
REFERÊNCIAS	49
APÊNDICE A – Reações estequiométricas e parâmetros cinéticos utilizados no reator CSTR	54

1. INTRODUÇÃO

A necessidade de preservar o planeta em que vivemos é uma questão de sobrevivência, a evolução da sociedade com emprego extensivo dos recursos e tecnologias não pode continuar como se as ações humanas não tivessem consequências para o ambiente.

Os impactos ambientais são definidos como todas as alterações físicas, químicas ou biológicas do meio ambiente, causadas pelo desenvolvimento de atividades humanas (CONAMA, 1986) e tiveram um grande aumento após a Revolução Industrial. O aquecimento global, considerado como o aumento combinado da temperatura da superfície do ar e do mar, atingiu em 2017 a marca de aproximadamente 1°C acima do limite pré-industrial, com um acréscimo de 0,2°C por década, causando impactos alarmantes para a sociedade e para o planeta caso atinja o valor de 1,5°C (IPCC, 2018). Desde os anos 2000, o aumento da concentração global de CO₂ é dez vezes mais rápido que qualquer aumento nos últimos 800.000 anos, atingindo cerca de 20 ppm por década (BEREITER et al., 2015).

Segundo a Agência Internacional de Energia Renovável (IRENA), a adoção de soluções com energia renovável combinadas com estratégias de eficiência energética, são capazes de atingir mais de 90% das reduções das emissões de CO₂ para cumprir as metas climáticas acordadas relacionadas à energia (IRENA, 2019). Para esses números serem alcançados, é necessária uma abordagem global, com a união de todos os níveis da sociedade.

O desenvolvimento sustentável é uma solução encontrada para conter esses avanços e prezar tanto pelo ambiente, quanto pelo desenvolvimento socioeconômico, com fóruns globais em destaque nos últimos anos, como o Acordo de Paris e os Objetivos de Desenvolvimento Sustentáveis (ODS), evidenciando indicadores e levantando planos de ação pertinentes à sociedade e seu futuro.

Aliado a esse contexto, mudanças importantes também estão acontecendo na matriz energética dos países, ganhando destaque as fontes de energia renováveis. Por muito tempo, o foco das matrizes energéticas eram combustíveis de origem fósseis, porém, além de trazer impactos ambientais significativos para o planeta, por aumentarem a emissão de CO₂ com sua queima, também são provenientes de matérias-primas com estoques limitados. O biodiesel é um caso de interesse no assunto, por ser uma fonte de energia renovável, responsável pela substituição parcial desses combustíveis, principalmente no setor de transportes. Em 2019, o Brasil teve um crescimento de 11% no consumo de bicompostíveis líquidos no setor de transportes (etanol e biodiesel), chegando a uma participação de 25,1% na energia total do setor

(MME, 2020).

Como duas das principais atividades causadoras de impactos ambientais, a indústria química e a geração de energia estão intimamente ligadas ao escopo de atuação dos engenheiros químicos, tendo estes um grande papel na contenção desses impactos. Esses conceitos devem ser estudados e ensinados já durante a formação desses profissionais, expondo as consequências que os elementos químicos ou os processos podem causar ao ambiente. Então, como avaliar um processo químico, utilizando a simulação de processos, considerando os aspectos ambientais e de sustentabilidade?

Nesse contexto, este trabalho tem o objetivo de avaliar o processo de produção de biodiesel com os princípios da engenharia sustentável, utilizando duas ferramentas distintas que forneçam informações importantes sobre o impacto ambiental de um processo. A partir deste estudo direcionado para um caso específico, espera-se entender a viabilidade de aplicação da metodologia e outras ferramentas de impacto ambiental para qualquer outro cenário. Também pretende-se avaliar a importância da introdução dos conceitos da sustentabilidade e práticas da engenharia sustentável na formação de novos profissionais.

Assim, o capítulo dois será dividido em quatro temas: química verde, desenvolvimento sustentável, ferramentas de impactos ambientais e biodiesel, abordando o contexto, a definição e a relevância de cada um dos tópicos para os engenheiros através da literatura. No capítulo seguinte apresenta-se a metodologia utilizada, assim como todo o detalhamento do estudo de caso abordado da produção de biodiesel através de óleos vegetais.

O capítulo quatro contém os resultados encontrados dos impactos ambientais no estudo de caso, obtidos através da utilização de dois softwares, o *Aspen Plus V11*[®] e o *Waste Reduction algorithm (WAR algorithm)*, e a discussão e comparação dos resultados, obtidos através do estudo de caso com as informações reportadas na literatura. Neste mesmo capítulo, também se encontra a discussão sobre a relevância da engenharia da sustentabilidade no ensino da Engenharia Química. O capítulo cinco encerra o trabalho com as considerações finais e com outras sugestões para futuros trabalhos com esse tema.

Espera-se que o presente trabalho seja de grande contribuição para o meio acadêmico e social, incentivando mudanças, fornecendo sugestões e transformações para a sociedade, especialmente de professores, pesquisadores e estudantes da área de Engenharia Química e afins.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Nesse capítulo serão abordados conceitos e definições dos temas da pesquisa, sendo eles a química verde, o desenvolvimento sustentável e o biodiesel, obtidos através da literatura.

2.1. QUÍMICA VERDE

2.1.1. Panorama

Diversos fatores econômicos, científicos, regulatórios e sociais foram responsáveis pela introdução do conceito de Química Verde em 1991, no programa de Prevenção à Poluição e Toxicidade da agência ambiental norte-americana (*Environmental Protection Agency*, EPA). Essa década se tornou o foco da agência ambiental em química sustentável, envolvendo uma grande quantidade de atividades em pesquisa, simpósios e educação (TUNDO, ARICO, 2007). Ainda Segundo Tundo e Arico (2007), na mesma medida que estatutos e regulamentos ambientais iam surgindo e sendo aplicados, trazendo mudanças para as indústrias e meios científicos, a demanda pública por informações a respeito das substâncias químicas próximas a eles também aumentava.

Um grande exemplo que podemos pontuar como representativo desse panorama e da importância dos regulamentos e enfoque ambiental é o caso do Teflon[®]. O Teflon[®] é um material produzido pela empresa *DuPont* e que utiliza *Perfluorooctanoico* (PFOA), também conhecido como C8, em sua produção. A empresa foi processada em 2000, por despejar água contaminada com C8 no ambiente. O PFOA é um produto químico sintético isolante utilizado em revestimentos antiaderentes e que, segundo a EPA, em baixos níveis pode potencialmente causar riscos à saúde humana. Esse processo foi usado como base e representado no filme “O Preço da Verdade – *Dark Waters*”, lançado em 2019 e dirigido por Todd Haynes, após a decisão final ser proferida a empresa ré. Através de estudos e documentos expostos no processo, a EPA colocou o PFOA na lista de potenciais contaminantes (*Contaminant Candidate List*, CCL) e em 2020, determinou regulamentar a quantidade de PFOA na água potável.

O avanço constante das tecnologias e desenvolvimento de pesquisas das substâncias químicas, reitera o alto potencial do campo da Química Verde e a sua evolução necessária

para as atuais tendências mundiais.

2.1.2. Definição e seus 12 princípios

A Química verde é definida pela *International Union of Pure and Applied Chemistry* (IUPAC) como “A invenção, desenvolvimento e aplicação de produtos e processos químicos para reduzir ou eliminar o uso e a geração de substâncias perigosas”. É uma ciência voltada para redução de riscos e prevenção da poluição, abordando os perigos intrínsecos das substâncias (TUNDO et al, 2000).

A aplicação dessa ciência é cada vez mais seguida e colocada em pauta nos dias de hoje, principalmente devido sua importância na redução dos impactos ambientais. Paul Anastas e John Warner definiram 12 princípios para guiar na aplicação da química verde nas mais diversas áreas, que, segundo Tundo et al (2000), tem o objetivo de conquistar o desenvolvimento sustentável.

Seus princípios são (ANASTAS, WARNER, 1998 apud TUNDO et al, 2000; UNESCO):

1. É melhor prevenir o desperdício do que tratar ou limpar o lixo depois de formado.
2. Métodos sintéticos devem ser projetados para maximizar a incorporação de todos os materiais utilizados no processo no produto final.
3. Sempre que possível, as metodologias sintéticas devem ser concebidas para utilizar e gerar substâncias que possuem pouca ou nenhuma toxicidade para a saúde humana e para o ambiente.
4. Os produtos químicos devem ser concebidos para preservar a eficácia da função, reduzindo simultaneamente a toxicidade.
5. A utilização de substâncias auxiliares (como solventes, agentes de separação, etc.) devem se tornar desnecessária sempre que possível e inócua quando utilizada.
6. Os requisitos energéticos devem ser reconhecidos por seus impactos ambientais e econômicos e devem ser minimizados. Os métodos sintéticos devem ser

conduzidos à temperatura e pressão ambiente.

7. A matéria-prima deve ser renovável e economicamente viável.
8. A redução de derivados deve ser evitada, sempre que possível.
9. Os reagentes catalíticos (tão seletivos quanto possível) são superiores aos reagentes estequiométricos.
10. Os produtos químicos devem ser concebidos de modo que, no final da sua função, não persistam no ambiente e se decompõem em produtos de degradação inócuos.
11. As metodologias analíticas precisam ser desenvolvidas para permitir a monitoração e controle em tempo real antes da formação de substâncias perigosas.
12. As substâncias e a forma como elas são utilizadas em um processo químico devem ser escolhidas de modo a minimizar o potencial de acidentes químicos, incluindo libertações, explosões e incêndios.

Por meio desses princípios, os estudos e pesquisas podem ser direcionados e, por fim, aplicados, usando como propósito geral a redução dos impactos ambientais ao seu máximo, seja através da prevenção de desperdícios, da eficiência de materiais e processos e/ou da utilização de produtos mais seguros. Segundo a EPA, a ciência traz benefícios tanto a saúde humana, quanto ao ambiente e até à economia. Menos exposição a substâncias tóxicas, ar e água mais limpos e maiores rendimentos na produção se enquadram em algumas dessas vantagens.

Através desse panorama, o campo da engenharia também começa a trazer conceitos e soluções em sua área, a fim de modernizar sua aplicação.

2.2. DESENVOLVIMENTO SUSTENTÁVEL

2.2.1. Precedentes históricos e contexto atual

Um dos marcos mais importantes na história do meio ambiente ocorreu em 1972, quando a Organização das Nações Unidas (ONU) convocou a Conferência das Nações

Unidas sobre o Ambiente Humano, realizada em Estocolmo, Suécia. O grande enfoque dessa conferência foi discutir sobre a atual preocupação universal no uso saudável e sustentável do planeta.

Diante desse debate, surgiu a “Declaração sobre o Meio Ambiente Humano” contendo 19 princípios que representaram um Manifesto Ambiental para os dias daquela época e que são válidos até hoje. A declaração evidencia que “defender e melhorar o meio ambiente para as atuais e futuras gerações se tornou uma meta fundamental para a humanidade” (ONU).

Foi com essa conferência que o desenvolvimento sustentável foi ganhando espaço e força nas discussões políticas e sociais, integrando a agenda política internacional.

Em continuação a essa temática, em 1992, a ONU organizou, no Rio de Janeiro, a Conferência das Nações Unidas sobre o Meio Ambiente e o Desenvolvimento, também conhecida como Rio-92, para debater sobre os atuais problemas ambientais mundiais com os chefes de estado dos países presentes. Foi o maior evento organizado pela ONU até então, contando com a presença de 172 países.

Nessa conferência, a comunidade política internacional admitiu que era preciso conciliar o desenvolvimento socioeconômico com a utilização dos recursos da natureza e, por isso, marcou a forma como a humanidade encara sua relação com o planeta (DISCUSSÃO, 2012). A Declaração do Rio-92 estabeleceu importantes princípios para promover a cooperação entre os países, induzindo melhor entendimento sobre o desenvolvimento sustentável. Um de seus princípios elenca que “os seres humanos estão no centro das preocupações para o desenvolvimento sustentável. Eles têm direito a uma vida saudável e produtiva, em harmonia com a natureza” (RIO+20, 2012b).

Enquanto a Conferência de Estocolmo teve uma abordagem mais voltada ao meio ambiente, a Conferência do Rio de Janeiro colocou os seres humanos no centro das preocupações do desenvolvimento sustentável (HANDL, 2012).

Em 2012, no Rio de Janeiro, ocorreu a Conferência das Nações Unidas sobre Desenvolvimento Sustentável, conhecida como Rio +20, por marcar os 20 anos de realização da Conferência das Nações Unidas sobre o Meio Ambiente e o Desenvolvimento (Rio-92). O objetivo da conferência foi renovar o compromisso político com o desenvolvimento sustentável, através da avaliação do progresso e das lacunas na implementação das decisões adotadas pelas principais cúpulas sobre o assunto e do

tratamento de temas novos e emergentes. Os principais temas discutidos na conferência, foram a economia verde no contexto do desenvolvimento sustentável e da erradicação da pobreza e a estrutura institucional para o desenvolvimento sustentável (RIO+20, 2012b).

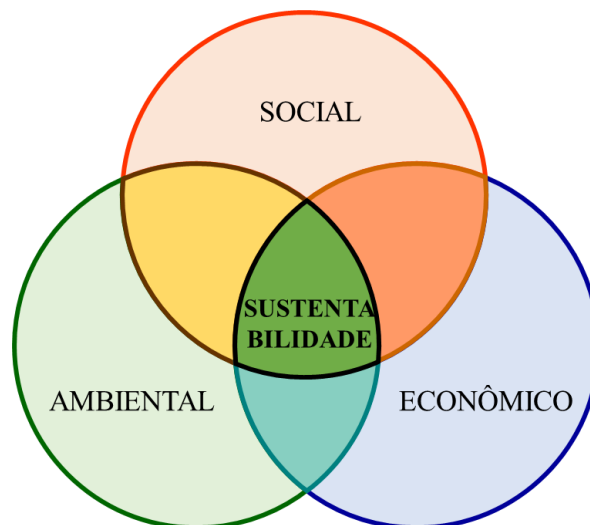
2.2.2. Definição

O termo “desenvolvimento sustentável” foi disseminado no Relatório Brundtland, intitulado por Relatório Nosso Futuro Comum, de 1987, criado pela Comissão Mundial sobre Meio Ambiente e Desenvolvimento. Como diretriz, caracterizava a ideia de um desenvolvimento que atenda às necessidades das gerações presentes sem comprometer a habilidade das gerações futuras de suprirem suas próprias necessidades.

O desenvolvimento sustentável é o processo de transformar as atividades humanas para um padrão que pode ser sustentado perpetuamente, tendo uma abordagem ambiental e de desenvolvimento que busca conciliar as necessidades humanas com a capacidade do planeta de lidar com as consequências das atividades humanas (ENGINEERING, 2005).

Este conceito nada mais é do que fazer todas as coisas de uma maneira sustentável, suprimindo nossas necessidades, mas também olhando para o ambiente em que vivemos. Sendo assim, a sustentabilidade é formada na interação de três pilares: social, econômico e ambiental, que pode ser representada na Figura 1.

Figura 1 - Definição de sustentabilidade



Fonte: Adaptado de Engineering (2005).

Esses pilares foram definidos em 2010, na Cúpula Mundial sobre o Desenvolvimento

Sustentável da ONU, realizada em Joanesburgo, África do Sul. Enquanto a sustentabilidade pode ser definida como a junção dos três pilares, o desenvolvimento sustentável é o processo de se mover para essa região (ENGINEERING, 2005). O desenvolvimento social, o desenvolvimento econômico e a proteção ambiental coexistindo e interagindo juntamente trazem o desenvolvimento sustentável em suas ações e negócios.

2.2.3. Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS)

Atualmente, as circunstâncias mundiais sobre a temática estão direcionadas para a Agenda de Desenvolvimento Sustentável, também chamada de Agenda 2030. Em 2015, durante a Cúpula de Desenvolvimento Sustentável, realizada em Nova York, todos os países da ONU firmaram um compromisso, desenvolvendo os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS). Esses objetivos representam um plano de ação global para acabar com a pobreza, proteger o meio ambiente e o clima e garantir que as pessoas, em todos os lugares, possam desfrutar de paz e de prosperidade (ONU). A Agenda 2030 tem prazo de resolução em todos os países para o ano de 2030.

Foram firmados 17 objetivos, totalizando 169 metas, que abordam os principais desafios de desenvolvimento encarados por pessoas em todo o mundo. Os 17 objetivos são:

1. Erradicação da pobreza: Acabar com a pobreza em todas as suas formas, em todos os lugares.
2. Fome zero e agricultura sustentável: Erradicar a fome, alcançar a segurança alimentar, melhorar a nutrição e promover a agricultura sustentável.
3. Saúde e bem-estar: Garantir o acesso à saúde de qualidade e promover o bem-estar para todos, em todas as idades.
4. Educação de qualidade: Garantir o acesso à educação inclusiva, de qualidade e equitativa, e promover oportunidades de aprendizagem ao longo da vida para todos.
5. Igualdade de gênero: Alcançar a igualdade de gênero e empoderar todas as mulheres e meninas.
6. Água potável e saneamento: Garantir a disponibilidade e a gestão sustentável da

água potável e do saneamento para todos.

7. Energia limpa e acessível: Garantir o acesso a fontes de energia fiáveis, sustentáveis e modernas para todos.
8. Trabalho decente e crescimento econômico: Promover o crescimento econômico inclusivo e sustentável, o emprego pleno e produtivo e o trabalho digno para todos.
9. Indústria, inovação e infraestrutura: Construir infraestruturas resilientes, promover a industrialização inclusiva e sustentável e fomentar a inovação.
10. Redução das desigualdades: Reduzir as desigualdades no interior dos países e entre países.
11. Cidades e comunidades sustentáveis: Tornar as cidades e comunidades mais inclusivas, seguras, resilientes e sustentáveis.
12. Consumo e produção responsáveis: Garantir padrões de consumo e de produção sustentáveis.
13. Ação contra a mudança global do clima: Adotar medidas urgentes para combater as alterações climáticas e os seus impactos.
14. Vida na água: Conservar e usar de forma sustentável os oceanos, mares e os recursos marinhos para o desenvolvimento sustentável.
15. Vida Terrestre: Proteger, restaurar e promover o uso sustentável dos ecossistemas terrestres, gerir de forma sustentável as florestas, combater a desertificação, travar e reverter a degradação dos solos e travar a perda da biodiversidade.
16. Paz, Justiça e Instituições eficazes: Promover sociedades pacíficas e inclusivas para o desenvolvimento sustentável, proporcionar o acesso à justiça para todos e construir instituições eficazes, responsáveis e inclusivas a todos os níveis.
17. Parcerias e meios de implementação: Reforçar os meios de implementação e revitalizar a parceria global para o desenvolvimento sustentável.

É de fácil entendimento que são objetivos ousados e ambiciosos, mas também necessários para a construção de um futuro em um planeta único.

Esse processo, liderado pela ONU, conta com a determinação de 193 países trabalhando para o cumprimento de todos esses objetivos. Grandes empresas também estão se esforçando para ajudar na realização dos ODS. A *Samsung Eletronics*, empresa multinacional de tecnologia e eletrônicos, firmou uma parceria com o Programa das Nações Unidas para o Desenvolvimento, desenvolvendo um aplicativo que pode ser baixado no *Google Play Store* (loja oficial de aplicativos para o sistema operacional *Android*) em qualquer dispositivo. Cada anúncio visto dentro do aplicativo arrecada fundos que podem ser direcionados a qualquer objetivo que o usuário escolher.

As medidas tomadas na Agenda 2030 são ousadas e transformadoras, pois necessitam colocar o mundo em um caminho sustentável e resiliente, comprometendo-se a não deixar ninguém para trás. O objetivo é assegurar que todos os seres humanos consigam desfrutar de uma vida próspera e de realização, tendo o progresso econômico, social e tecnológico ocorrendo em harmonia com a natureza. (MUNDO, 2016).

2.2.4. Engenharia Sustentável

Como uma das mais antigas profissões do mundo, a engenharia é definida como:

Campo ou disciplina, prática, profissão e arte que se relaciona com o desenvolvimento, aquisição e aplicação de conhecimento técnico, científico e matemático sobre compreensão, design, desenvolvimento, invenção, inovação e uso de materiais, máquinas, estruturas, sistemas e processos para fins específicos (UNESCO Report, 2010, p. 24).

Desde muito tempo, tem um papel essencial no desenvolvimento da sociedade, principalmente nas áreas educacionais, científicas, culturais e de comunicação. Os efeitos positivos significativos da engenharia são visíveis nos termos de produção, produtividade e crescimento, bem como na capacidade inovadora das economias (MALONEY, CAICEDO, 2016).

No contexto atual visto nos capítulos anteriores, com a importância da sustentabilidade e seu desenvolvimento nos mais diversos setores, a engenharia é um dos campos que tem uma relevância significativa para o caminho que a civilização tende a seguir.

Através dos três pilares da sustentabilidade (social, econômico e ambiental), a engenharia também encontra seu escopo de desenvolvimento. No âmbito social, foca em atender as necessidades dos indivíduos e do crescimento das comunidades; no lado econômico, apoia as inovações, fornecendo qualidade e mais benefícios em comparação ao

custo total; enquanto na esfera ambiental, trabalha em não afetar a capacidade do ecossistema, preservando a biodiversidade (GAGNON, 2008).

É também por meio desses fundamentos que a engenharia se coloca atualmente como um campo crucial para o progresso dos 17 Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS). O relatório de engenharia da Unesco publicado em 2021 dá destaque para essa relação e também fornece exemplos reais de como os engenheiros podem fazer acontecer em cada um dos ODS.

Os engenheiros precisam desenvolver e implementar soluções necessárias para o avanço dos ODS e ajudar a criar um mundo mais inteligente e sustentável para todos (UNESCO, 2021). A formação da engenharia sustentável ganha força nesses últimos anos, dando relevância a seus valores e objetivos nos seus profissionais e em seu trabalho.

Atualmente, a demanda mundial por engenheiros é alta, principalmente nos setores de tecnologia, infraestrutura, energia e indústria. Porém, só algumas faculdades de engenharia têm atualizado seus cursos nas últimas décadas, muito por conta do alto tempo necessário para fazer essas mudanças, o desafio de inserir novos materiais na grade e uma visão de baixa prioridade sobre o assunto (DAVIDSON, 2010). A necessidade dessa mudança é urgente. É na formação de novos profissionais que os grandes desafios mundiais devem ser trabalhados e priorizados, como vemos com a engenharia sustentável. O planeta que vivemos não pode esperar.

Sendo a engenharia responsável pelo design, pela construção e pela manutenção de infraestruturas importantes para a civilização atual, como exemplo o saneamento, a telecomunicação e o transporte, ela pode (e deve) se direcionar a aplicação da sustentabilidade em todas as suas áreas. Através disso, tem-se que a engenharia sustentável é tentar ao máximo atingir quatro objetivos: redução de resíduos, gestão de materiais, prevenção de poluição e melhoria de produto (VALLERO, 2008).

2.2.5. Princípios de Hannover

Os princípios de Hannover foram preparados em 1992 por William McDonough e Michael Braungart como princípios de design e apresentados na Exposição Universal de 2000 (Expo 2000), que teve o tema "Humanidade, natureza e tecnologia - origem de um novo mundo". São eles:

- 1) Insista no direito da humanidade e da natureza de coexistirem em uma condição saudável, solidária, diversa e sustentável.
- 2) Reconheça a interdependência. Os elementos do design humano interagem e dependem do mundo natural, com implicações amplas e diversas em todas as escalas. Expanda as considerações de design para reconhecer até efeitos distantes.
- 3) Respeite as relações entre o espírito e a matéria. Considere todos os aspectos do assentamento humano, incluindo comunidade, habitação, indústria e comércio, em termos de conexões existentes e em evolução entre a consciência espiritual e material.
- 4) Aceite a responsabilidade pelas consequências das decisões de design sobre o bem-estar humano, a viabilidade dos sistemas naturais e seu direito de coexistir.
- 5) Crie objetos seguros de valor de longo prazo. Não sobrecarregue as gerações futuras com requisitos de manutenção ou administração vigilante de potenciais perigos devido à criação descuidada de produtos, processos ou padrões.
- 6) Elimine o conceito de desperdício. Avalie e otimize a vida inteira do ciclo dos produtos e processos para aproximar o estado natural de sistemas, nos quais não há desperdício.
- 7) Confie nos fluxos naturais de energia. Os projetos humanos devem, como o mundo vivo, derivar sua força criativa da renda solar perpétua. Incorpore essa energia de forma eficiente e segura para um uso responsável.
- 8) Compreenda as limitações do design. Nenhuma criação humana dura para sempre, e o design não resolve todos os problemas. Aqueles que criam e o plano deve praticar a humildade em face da natureza. Trate a natureza como modelo e mentor, não como um inconveniente a ser evitado ou controlado.
- 9) Buscar o aprimoramento constante por meio do compartilhamento de conhecimentos. Incentive a comunicação direta e aberta entre colegas, patronos, fabricantes e usuários para vincular a longo prazo considerações sustentáveis com responsabilidade ética e para restabelecer a relação integral entre os processos naturais e a atividade humana.

Apesar desse documento ter sido utilizado para o desenvolvimento da Expo 2000, esses princípios ainda podem ser considerados para o desenvolvimento do futuro do planeta. A ideia é que ele seja visto como um documento vivo, comprometido com a transformação e com o crescimento no entendimento da nossa independência com a natureza, para que se adaptem à medida que o nosso conhecimento do mundo evolui (MCDONOUGH, 1992). É um guia para inspirar profissionais a abordar os conceitos sustentáveis nos desafios do design, atendendo as necessidades do presente, sem comprometer o futuro.

O foco do presente trabalho é avaliar a engenharia sustentável no escopo da engenharia de design de processos produtivos, no setor industrial e químico, utilizando um processo químico como exemplo. Segundo Vallero (2008), um design sustentável requer uma avaliação completa em tempo e espaço, tendo como ponto principal, otimizar as variáveis que fornecem os melhores desempenhos em um sentido temporal, olhando o ciclo de vida do mesmo a um longo prazo.

2.3. FERRAMENTAS DE AVALIAÇÃO DE IMPACTOS AMBIENTAIS

Impactos ambientais podem ser originados nas mais diferentes vertentes da utilização de um material, desde o início de sua produção, com a obtenção das matérias-primas, até a completa finalidade de uso do produto e descarte de seus resíduos. Nesse quesito, é muito importante ter conhecimento de todas as consequências que podem surgir ao longo do caminho daquele determinado produto, para procurar formas de redução e mitigação. Algumas ferramentas foram desenvolvidas com esse propósito e auxiliam na coleta de dados dos impactos ambientais ao longo do ciclo de vida de um produto.

2.3.1. Análise de Ciclo de Vida

A análise do ciclo de vida (Life Cycle Analysis, LCA) é uma técnica de avaliação dos aspectos ambientais e possíveis impactos associados a um produto, passando por todas as fases de seu ciclo de vida. É delimitado do “berço ao túmulo”, analisando desde a extração da matéria-prima, passando pela sua produção e chegando até o uso e descarte (ISO, 2006). De acordo com a norma, traduzida para o Brasil como a NBR ISO 14040 (2009), o LCA é composto por quatro etapas: definição de objetivo e escopo, análise de inventário, avaliação de impacto e interpretação. A metodologia é em sua maior parte quantitativa, fornecendo indicadores de cada fase do ciclo de vida, permitindo encontrar os pontos mais críticos e também comparar diferentes fases de um mesmo ciclo.

Diversas ferramentas são encontradas para a LCA, desde softwares gratuitos a outros com licenças pagas, como o *SimaPro*[®], o *OpenLCA* e *GaBi software*. Apesar de todas seguirem os mesmos princípios e normas da LCA, é importante definir qual software é mais recomendado para a aplicação do estudo. Os softwares variam muito em termos de bancos

de dados, investimentos e modelagem dos dados (formatos e avaliação das incertezas e sensibilidades dos mesmos) e essas diferenças podem resultar em decisões e conclusões bem diferentes acerca da LCA aplicada (SILVA et al., 2017).

A LCA do processo de produção do biodiesel consiste nas etapas agrícolas (preparação da terra, semeadura, fertilização, proteção e colheita), de transporte, industriais (extração do óleo e transesterificação) e de utilização do produto. Estudos realizados (BRONDANI et al., 2012; SIREGAR et al., 2015) mostram que a etapa que tem maior impacto ambiental é a agrícola, principalmente devido ao uso de fertilizantes e herbicidas. Referente as etapas industriais, a transesterificação tem também um importante papel nos impactos ambientais pela liberação de poluentes e alto uso de consumo energético.

2.3.2. Produção de produtos químicos e gerenciamento dos materiais

Dentro dos diversos ciclos da LCA, encontra-se as etapas de processos de fabricação do produto e gerenciamento dos materiais utilizados, sendo responsáveis por uma parcela significativa dos impactos ambientais, dependendo do ciclo analisado, e, por isso, devem também ser avaliados mais profundamente.

O design de processos produtivos é composto por diferentes etapas, englobando a partir da ideia inicial do processo até alguns ajustes no desempenho de um processo já existente. Para a avaliação de designs de processos produtivos sob a perspectiva da engenharia e química verde, diferentes ferramentas podem ser utilizadas, possuindo focos e contribuições distintas, como a redução de desperdícios de um processo, a análise econômica e a minimização de águas residuais.

Algumas ferramentas conseguem auxiliar a avaliação de impactos ambientais em diferentes estágios do processo de design, com o *Waste Reduction algorithm* (WAR *algorithm*) para estágios iniciais do design de processos, o GREENSCOPE em etapas mais avançadas para mais detalhamento do design e o *SustainPro* para modificações e melhoria em processos já detalhados (RUIZ-MERCADO et al., 2016). A escolha e a utilização da ferramenta mais adequada dependem do propósito a ser trabalhado pelo designer.

- WAR Algorithm

Esse software algoritmo avalia os processos químicos em termos de potenciais impactos ambientais. Os Potenciais Impactos Ambientais, também chamados de PEI (“*Potencial Environment Impact*”), de um produto químico são definidos como o efeito

que um produto químico teria sobre o ambiente se fosse simplesmente emitido para o meio ambiente (EPA, 2011).

O potencial impacto ambiental de um produto Ψ_i pode ser determinado pela soma do impacto ambiental específico deste produto químico sob todas as categorias de impacto possíveis (MALLICK, 1996), conforme equação (1), em que i é um produto, k pode ser uma corrente ou operação unitária e α_x seria o peso do impacto x :

$$\Psi_{i,k} = \sum_x \alpha_x \Psi_{i,k,x}^S \quad (1)$$

O software WAR leva em consideração oito diferentes categorias de PEI químicos em um peso de 0 a 10, que são divididos em duas classes: toxicológica local e atmosférica global. A primeira delas contém a toxicidade aquática, terrestre e humana (por ingestão e por pele/inalação) e a segunda classe, compreende o aquecimento global, destruição do ozônio, oxidação fotoquímica e acidificação. Essas categorias são definidas pelo próprio usuário, dependendo do destaque e relevância de cada impacto para seu estudo. Como o objetivo principal do software WAR é determinar o índice relativo de impactos ambientais de um processo, que podem ser comparados com projetos alternativos, os valores reais dos pesos dos impactos não são tão importantes quanto seus valores relativos (YOUNG e CABEZAS, 1999).

O princípio do software pode ser determinado por uma equação de balanço de PEI de um processo químico, na qual o PEI de entrada, associado a uma massa ou energia, é igual ao PEI de saída menos o PEI gerado no processo, que pode ser transformado ou destruído, dependendo da transformação química do processo (RUIZ-MERCADO et al., 2016).

Por meio desses fundamentos, o software WAR fornece quatro principais índices PEI, da geração e saída do processo, relevantes para a interpretação da afinidade do processo com o meio ambiente, apresentados por unidades impacto/h e impacto/kg. A mais alta contribuição de um processo para o meio ambiente seria a geração de um PEI negativo, considerando que um aumento do PEI significa um crescimento dos impactos ambientais causados em um âmbito global e toxicológico.

Os resultados também podem ser encontrados considerando ou não a corrente de produto, na qual, segundo Young e Cabezas (1999), os cálculos com a corrente de produto ajudam a fornecer conclusões globais do processo e do material produzido, enquanto aqueles sem considerar a corrente de produto, permitem uma análise mais focada do processo.

- GREENSCOPE

O *Gauging Reaction Effectiveness for the Environmental Sustainability of Chemistries with a Multiobjective Process Evaluator* (GREENSCOPE) é uma ferramenta utilizada para avaliação e modelagem de um processo químico pela visão da sustentabilidade, e, segundo Ruiz-Mercado et al. (2013), tem um papel direto em melhorias do processo e produto, podendo modificar inteiramente a sustentabilidade de todo o ciclo de vida.

O *software* GREENSCOPE utiliza de informações sobre a performance do processo, as matérias-primas, as utilidades, os equipamentos e os dados de saída para fornecer 139 indicadores de performance divididos em quatro áreas principais: eficiência do material (26), energia (14), economia (33) e ambiente (66).

As informações de entrada necessárias para o funcionamento da ferramenta são essenciais para que a análise possa ser feita de maneira assertiva e, por isso, requerem dados como resultados experimentais, propriedades físico-químicas, termodinâmicas e de toxicidade das substâncias empregadas, fluxos de materiais e energia, condições operacionais, custos e especificações de equipamentos para que os indicadores possam ser calculados (RUIZ-MERCADO et al., 2012). Esses dados podem ser obtidos através da literatura, simuladores de processos e experimentais. Além dessas informações, também é necessário a identificação e escolha de dois estados de referência: o melhor e o pior caso de cada indicador, para conseguir normalizar os resultados e permitir uma escala real. Em Ruiz-Mercado et al. (2012) pode ser encontrado todas as entradas necessárias, as fórmulas utilizadas e o melhor e pior caso de cada indicador apresentado.

Com os resultados, é possível entender como um processo faz uso de entradas de massa e energia para produzir um produto de interesse, combinando os três pilares da sustentabilidade, ou seja, analisando as necessidades sociais e ambientais, buscando também maximizar seus benefícios econômicos. A ferramenta também possibilita uma análise sustentável, com a comparação de diferentes processos produtivos, por meio do uso de diferentes equipamentos, matérias-primas e reações.

- *SustainPro*

O *software SustainPro* orienta o usuário a analisar processos contínuos e em batelada, com o objetivo de identificar gargalos e propor alternativas de melhorias sustentável, usando como base um arquivo Excel (CARVALHO et al., 2013). A

metodologia da ferramenta segue seis etapas (RUIZ-MERCADO, 2016):

- 1) Coleta de dados: são necessários a inserção do balanço de massa e energia do processo a ser analisado, com os preços dos materiais.
- 2) Decomposição do fluxograma: o processo é decomposto em caminhos fechados, abertos e de acumulação, dividindo um sistema complexo para sistemas mais simples, facilitando a identificação de gargalos.
- 3) Cálculo de métricas sustentáveis através de massa e energia: indicadores são calculados nos caminhos estipulados na etapa anterior, avaliando o processo em termos sustentáveis (consumo de energia, desperdício de material, custo, capacidade, tempo e eficiência).
- 4) Algoritmo ISA (análise de sensibilidade do indicador): o algoritmo ISA analisa os gargalos encontrados pelos cálculos anteriores e fornece uma lista de sugestões prioritárias.
- 5) Análise de sensibilidade da operação: outra análise de sensibilidade é realizada determinando os parâmetros operacionais que mais influenciam nos indicadores prioritários, permitindo ter um foco dos equipamentos ou correntes que conseguem mais ter melhorias.
- 6) Proposta de novos designs: com uma análise heurística, novas alternativas de design são propostas para aprimorar os gargalos sustentáveis identificados.

Desse modo, o uso da ferramenta *SustainPro* é indicado em casos de ajustes e redesenhos de processos que já estão estabelecidos, procurando gargalos no processo e sugerindo mudanças que indiquem melhorias nos indicadores sustentáveis.

Um processo de produção de amônia foi simulado e utilizado como exemplo por Ruiz-Mercado et al. (2016), com o uso das três ferramentas. Por possuírem escopos e metodologias diferentes, podem ser trabalhadas em conjunto, se complementando, já que fornecem resultados distintos para análises importantes sobre os impactos ambientais em diferentes etapas do design de um processo (RUIZ-MERCADO et al., 2016).

2.4. PRODUÇÃO DE BIODIESEL POR ÓLEOS VEGETAIS

2.4.1. Biocombustíveis

Uma grande parte dos problemas ambientais provém da obtenção de energia, sendo a

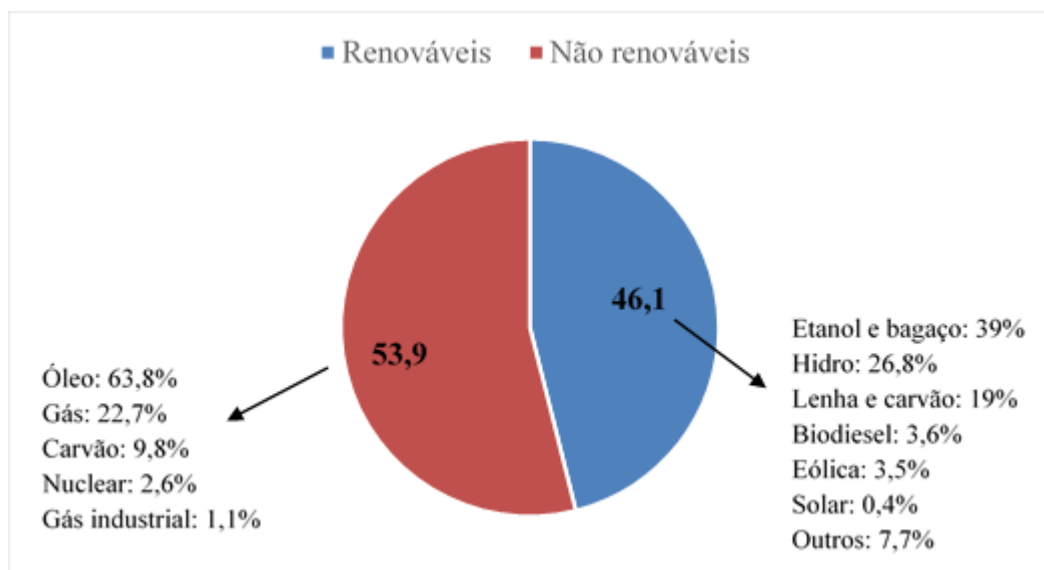
geração de eletricidade, o transporte, a indústria, a construção e o desmatamento os principais responsáveis pelas fontes de poluição (GOLDEMBERG, 2008).

Os combustíveis fósseis ainda representam a maioria das fontes de energia utilizadas, dando destaque para o carvão, petróleo e gás natural. O alto uso dessas fontes traz grandes problemas, pois além de serem fontes não-renováveis, ou seja, suas reservas podem se esgotar, já que demoram milhões de anos para serem formadas, elas são principalmente grandes produtoras de dióxido de carbono, um dos responsáveis pelo aquecimento global.

Segundo Goldemberg (2008), as melhores soluções para o problema enfrentado seria aprimorar as tecnologias no uso de combustíveis fósseis para aumentar a eficiência e reduzir os poluentes, substituir os combustíveis mais poluentes por outros menos poluentes e aumentar a participação de fontes renováveis de energia.

Em 2019, a matriz energética brasileira possuía 46,1% de fontes renováveis, enquanto em todo o mundo a média era de apenas 14,2% (MME, 2020). As distribuições das fontes de energia renováveis do Brasil estão elencadas na Figura 2.

Figura 2 – Participação de fontes energéticas na matriz brasileira



Fonte: Adaptado de MME (2020).

Apesar do Brasil ter uma posição significativa em comparação com o resto dos países, o aumento da utilização de combustíveis renováveis ainda encontra uma grande oportunidade. Uma alternativa aos combustíveis fósseis é o uso de biocombustíveis. São fontes de energia geradas através de combustíveis de origem não fóssil, a partir de biomassa orgânica. No Brasil, os principais tipos de biocombustíveis utilizados são o etanol, o biogás e o biodiesel.

2.4.2. O biodiesel como um dos principais biocombustíveis

O etanol e o biodiesel são os principais tipos de biocombustíveis produzidos e utilizados no setor de transportes brasileiro (SALLET, ALVIM, 2011). No Brasil, atualmente a maior participação energética de fontes renováveis é o etanol, visto a alta consolidação da produção de cana-de-açúcar.

O biodiesel é um substituto natural do diesel de petróleo, que pode ser produzido a partir de fontes renováveis (RAMOS et al., 2003). Ele pode ser produzido através de várias matérias-primas, como óleos vegetais, gorduras de origem animal e óleos de descarte, dependendo de fatores geográficos e econômicos para a melhor escolha (KNOTHE et al., 2006). Como exemplo, nos Estados Unidos, a matéria-prima mais utilizada é o óleo de soja, enquanto em muitos países tropicais, o óleo de palma que ganha destaque (SALLET, ALVIM, 2011).

Nos últimos anos, a produção de biodiesel por óleos vegetais ganha relevo como uma alternativa na geração de fontes renováveis, não só pela adequação das suas propriedades, mas também por representarem forte apoio à agricultura familiar, criando melhores condições de vida (infraestrutura) em regiões carentes, valorizando potencialidades regionais e oferecendo alternativas a problemas econômicos e socioambientais de difícil solução (RAMOS et al., 2003).

A troca de um combustível que era consolidado na matriz energética por um combustível verde é sempre de grande debate. Como muitas etapas são envolvidas e negociadas, como a movimentação do comércio de matérias-primas, o uso de novas tecnologias que auxiliem no custeio da produção e a criação de novas legislações garantindo a qualidade dos ingredientes comercializados, é preciso e necessário o apoio dos governos e federações para o sucesso nessa substituição.

Apesar de complexo, a mudança é benéfica: o biodiesel já se transformou em um dos mais importantes instrumentos do governo brasileiro para cumprir os acordos internacionais de descarbonização, previsto no Acordo de Paris, reduzindo em cerca de 80% das emissões de gases de efeito estufa em relação ao diesel fóssil, quando analisado em todo seu ciclo de vida (ABIOVE, 2021). A redução das emissões de gases poluentes, entre eles monóxido de carbono e material particulado, devido à diminuição da queima de combustíveis fósseis, tem um potencial impacto positivo na saúde pública e por isso diversos países estão trabalhando para atingir esse objetivo (ASSOCIADOS, 2021).

Porém, um ponto de atenção aos combustíveis de origem vegetais é que eles dependem

fortemente de fatores climáticos para a safra da matéria-prima utilizada, que pode afetar economicamente o uso do combustível verde. Uma alta no preço dos óleos vegetais entre os meses de maio e agosto, fez com que o Conselho Nacional de Política Energética (CNPE) estabelecesse, como de interesse da Política Energética Nacional, a redução do teor de 13% para 10% da mistura obrigatória do biodiesel no óleo diesel fóssil durante o 79º Leilão de Biodiesel (L79), segundo publicação da Resolução CNPE nº 4 de 09/04/2021 (BRASIL, 2021).

A decisão vai em sentido contrário ao cronograma definido pelo próprio CNPE de manter a mistura em 13% desde março deste ano, elevando para 14% em março de 2022 e para 15% em 2023, segundo Resolução CNPE nº 16 de 29/10/2018 (Brasil, 2018). Pelo biodiesel ser um produto com significativa margem na matriz energética no Brasil, essa diminuição da mistura obrigatória do diesel, além de afetar diretamente a economia do país, também compromete os compromissos e metas ambientais adotadas, contribuindo para o aumento da emissão de poluentes graves e de gases do efeito estufa, trazendo grandes consequências para o ambiente (ASSOCIADOS, 2021).

2.4.3. Processo de produção do biodiesel

O biodiesel é uma mistura de alquilésteres de cadeia linear, obtida da transesterificação dos triglicerídeos de óleos e gorduras com álcoois de cadeia curta, tendo como coproduto o glicerol (LOBO et al, 2009). A transesterificação é uma reação química entre ésteres e álcoois, produzindo outros ésteres e álcoois, na presença de um catalisador.

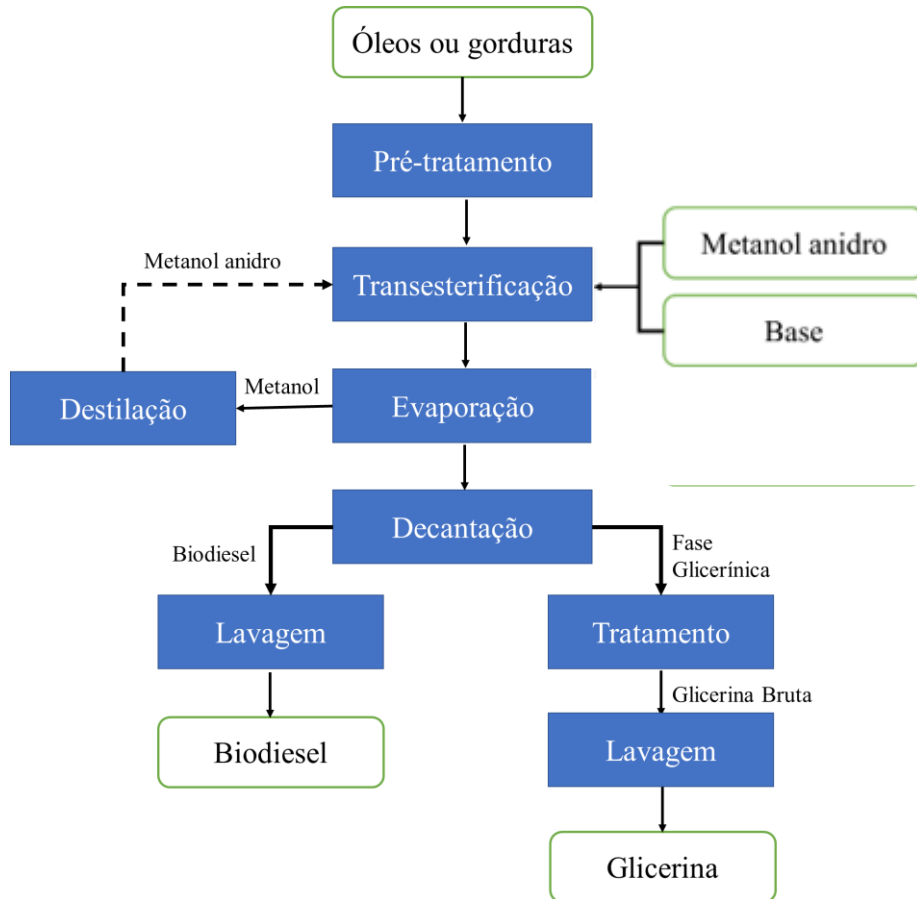
Segundo Lobo et al. (2009), os álcoois mais utilizados atualmente são o metanol e o etanol; o primeiro por ser mais reativo, pode ser utilizado em baixas temperaturas e ter um menor tempo de reação, enquanto o segundo, já tem uma produção consolidada no Brasil e é menos tóxico, apesar de dificultar a separação dos produtos.

Nessa reação, diferentes tipos de catalisadores podem ser usados, como bases inorgânicas, ácidos minerais, resinas de troca iônica ou enzimas. Algumas rotas, especialmente as que utilizam catalisadores heterogêneos, apresentam vantagens interessantes como a obtenção de uma fração glicerínica mais pura, exigindo menos capital para atingir um bom padrão de mercado, mas as catálises homogêneas em meio alcalino são as que prevalecem por serem mais imediatas e economicamente viáveis na transesterificação de óleos vegetais (RAMOS, 2003).

Um fluxograma simplificado do processo de produção é representado na Figura 3.

Como etapas principais, os reagentes e catalisadores são inseridos em um reator, a mistura resultante é evaporada, separando o álcool em excesso da mistura de interesse, em que esta passa por uma decantação, separando a fase glicérica do biodiesel. Cada componente sofre outras etapas de tratamento para atingir o nível esperado de pureza.

Figura 3 – Fluxograma simplificado da produção de biodiesel por óleos vegetais ou gorduras



Fonte: Adaptado de Ramos et al. (2003).

3. METODOLOGIA

O presente trabalho possui uma natureza exploratória, utilizando ferramentas de simulação de processos e algoritmos para fornecer informações relevantes ao campo abordado da química verde e da engenharia da sustentabilidade. A pesquisa exploratória tem como objetivo proporcionar maior familiaridade à área de estudo, visando torná-la mais conhecida e/ou aprimorar hipóteses, através de processos que aprimorem a compreensão do tema abordado, como o levantamento bibliográfico e a análise de exemplos (GIL, 2002).

Esta vertente de pesquisa foi definida para o assunto, considerando trazer um estudo detalhado sobre a recente temática da química verde e seus impactos em processos químicos no mundo atual. Ainda segundo Gil (2002), a pesquisa exploratória é preferida em temas poucos explorados, trazendo um aprimoramento de ideias sobre a área estudada.

A principal abordagem utilizada na pesquisa foi a qualitativa, avaliando e interpretando os dados obtidos durante a metodologia com a visão do tema abordado, embora em alguns casos utilizou-se também o método quantitativo para comparação. A pesquisa quantitativa caracteriza-se pelo emprego da quantificação tanto nas modalidades de coleta de informações, quanto no tratamento delas por meio de técnicas estatísticas (RICHARDSON, 1989). Já o método qualitativo, difere-se do quantitativo, à medida que não emprega um instrumental estatístico como base do processo de análise de um problema, não pretendendo medir ou numerar (RICHARDSON, 1989). Muitos autores não conseguem distinguir com clareza esses dois métodos e enquanto Richardson (1989) diz que os métodos se diferenciam pelo enfoque adotado ao problema, Yin (1994) expressa que há uma grande e importante área comum entre os dois tipos de pesquisas. Com o intuito de explorar mais a temática do trabalho, por diferentes perspectivas, é desse modo que a abordagem terá um foco mais qualitativo, mas não deixando de lado a quantitativa.

Como metodologia aplicada na pesquisa, optou-se pela análise de um estudo de caso, com a observação profunda de dados e resultados sustentáveis acerca de um processo químico. O estudo de caso é uma das estratégias mais escolhidas quando o foco da pesquisa está em como colocar os fenômenos contemporâneos dentro do contexto da vida real (YIN, 2001).

Segundo Ventura (2007), uma pesquisa com aplicação de um estudo de caso visa à investigação de um caso específico, bem delimitado, contextualizando em tempo e lugar para que se possa realizar uma busca circunstanciada de informações. O estudo de caso abordado nesta pesquisa foi de atributo unitário, ou seja, um caso único e singular. Para Yin

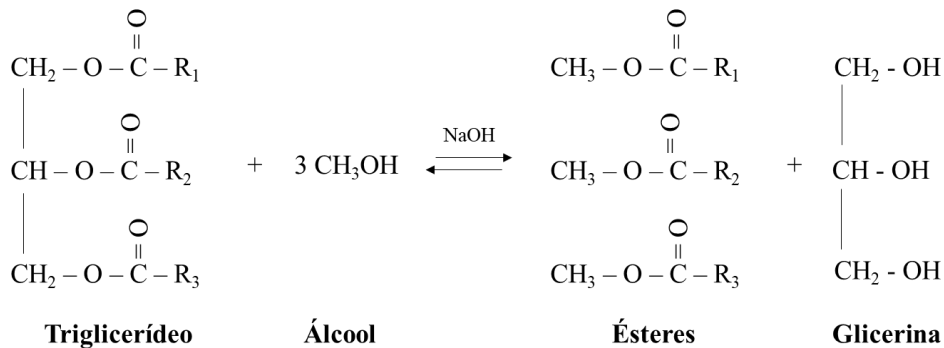
(2001), o caso único pode significar uma importante contribuição à base de conhecimento e à construção da teoria.

- ELABORAÇÃO DO ESTUDO DE CASO

No presente trabalho, o processo químico de produção de biodiesel a partir de óleos vegetais foi simulado através do software de simulação de processos ASPEN Plus V11[®]. Um simulador de processos é uma ferramenta utilizada para modelar quantitativamente uma planta de processamento químico (KAMAL, 2017). Ainda Segundo Kamal (2017), o *software ASPEN Plus V11[®]* aborda diferentes processos químicos e cálculos em operações unitárias na forma de modelagem, simulação, regressão de dados, economia de energia, análise econômica, dentre outras aplicações.

Foi utilizado o metanol e óleos vegetais como reagentes e uma mistura de hidróxido de sódio (NaOH) como catalisador homogêneo. Sua reação balanceada é apresentada na Figura 4.

Figura 4 – Reação de transesterificação de triglicerídeos com metanol



Fonte: acervo pessoal.

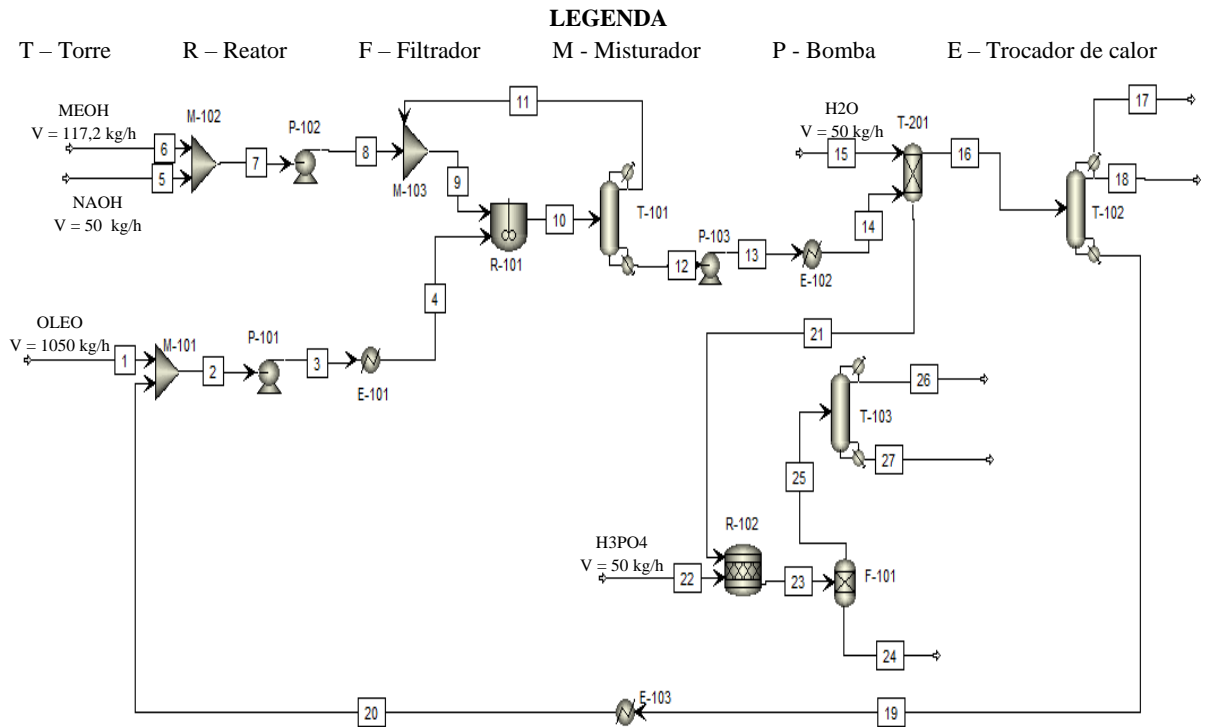
O processo utilizado foi obtido na biblioteca de processos do *software Aspen Plus V11[®]*, baseado em Zhang et al. (2003), e o fluxograma da produção de biodiesel é representado na Figura 5. É possível observar que a Figura 3 e a Figura 5 se complementam e ambas retratam o processo de produção de biodiesel e suas principais etapas.

A reação de transesterificação ocorre na fase líquida, em um reator de tanque agitado contínuo (CSTR - *Continuous Stirred-Tank Reactor*), identificado por “R-101” na Figura 5, com a cinética da reação definida. As cinéticas e reações intermediárias podem ser encontradas na Tabela A do Apêndice.

O processo segue por uma coluna de destilação fracionada (T-101), separando o álcool

em excesso dos produtos e coprodutos, seguido por uma coluna de extração (T-201) que separa os ésteres (produto de interesse) da fase glicínica, essa passando por operações de tratamento (R-102) com ácido fosfórico (H_3PO_4) e separação (F-101 e T-103) até se obter um glicerol mais puro.

Figura 5 - Processo de produção de biodiesel no *Aspen Plus V11*[®]



Fonte: Acervo pessoal.

A matéria-prima utilizada foi o óleo de palma, com sua composição detalhada no Quadro 1 e os parâmetros adotados em cada operação unitária estão presentes no Quadro 2.

QUADRO 1 – COMPOSIÇÃO MOLAR DO ÓLEO DE PALMA

Componente	Fração molar
OOO – (Trioleína)	0,04085
MMM – (Trimiristina)	0,00477
PPP – (Tripalmitina)	0,05610
PPS – ($C_{53}H_{102}O_{6-13}$)	0,01043
PPO – ($C_{53}H_{100}O_{6-5}$)	0,29216
POS – ($C_{55}H_{104}O_{6-3}$)	0,04676
MMP – ($C_{47}H_{90}O_{6-10}$)	0,01860
PPLI – ($C_{53}H_{98}O_{6-5}$)	0,09126
POO – ($C_{55}H_{102}O_{6-6}$)	0,22248
PLIO – ($C_{55}H_{100}O_{6-7}$)	0,09280
OOS – ($C_{57}H_{106}O_{6-4}$)	0,02075
OOLI – ($C_{57}H_{102}O_{6-5}$)	0,00540
MPLI – ($C_{51}H_{94}O_{6-3}$)	0,02251

PP – (1,3-dipalmitina)	0,07513
------------------------	---------

Fonte: A autora (2021).

QUADRO 2 – PARÂMETROS DOS EQUIPAMENTOS UTILIZADOS NO PROCESSO

Equipamento	Parâmetros
Misturadores (M-101, M-102 e M-103)	0 bar, fases Vapor-Líquido-Líquido
Bombas (P-101 e P-102)	4 bar
Bomba (P-103)	1,1 bar
Reator CSTR (R-101)	4 bar, 60 °C, tempo residência 1h
Coluna destilação (T-101)	Condensador total, 7 estágios
Trocador de calor (E-101 e E-102)	0 bar, 60 °C
Trocador de calor (E-103)	0 bar, 25 °C
Coluna extração (T-201)	Adiabático, 6 estágios
Coluna destilação (T-102)	Condensador parcial vapor-líquido, 6 estágios, 0,1 bar
Reator estequiométrico (R-102)	1,1 bar, 50 °C
Coluna de destilação (T-103)	Condensador total, 6 estágios

Fonte: A autora (2021).

Para utilizar a ferramenta de análise do consumo de energia do *Aspen Plus* com a melhor exatidão, é necessário realizar também a alocação correta das utilidades, ou seja, dos equipamentos que alteram a temperatura ou estado físico das correntes, como aquecedores e resfriadores. Para o fluxograma proposto, foram adicionadas cinco utilidades, descritas no Quadro 3.

QUADRO 3 – UTILIDADES ALOCADAS NO PROCESSO

Nome	Tipo	Descrição	Operação unitária aplicada
U-1	Vapor	Vapor de baixa pressão, temperatura de entrada = 125°C, temperatura de saída = 124°C	Reboiler T-101, E-101 e R-101
U-2	Genérico	Aquecedor acionado, temperatura de entrada = 1000°C, temperatura de saída = 400°C	Reboiler T-102 e reboiler T-103
U-3	Refrigeração	Refrigerador 1, Temperatura de entrada = -25°C, Temp de saída = -24°C	E-103 e Condensador T-101
U-4	Vapor	Geração de vapor de baixa pressão, temperatura de entrada = 124°C, temperatura de saída = 125°C	Condensador T-102
U-5	Genérico	Ar, Temperatura de entrada = 30°C, Temp de saída = 35°C	Condensador T-103 e R-102

Fonte: A autora (2021).

A segunda ferramenta empregada foi o *WAR algorithm*, escolhida com o intuito de fornecer uma maior discussão sobre a temática da sustentabilidade. A utilização dessa ferramenta foi definida por ser um software de fácil manuseio e que consegue captar insumos dos processos químicos desenvolvidos e simulados no *ASPEN Plus V11*[®], fornecendo mais resultados sobre o processo. Além disso, o WAR possui um banco de dados dos principais componentes químicos, sendo possível a adição de outros, e é de uso livre.

Para o presente trabalho, das oito categorias de impactos ambientais, foi considerado o peso padrão dos impactos, por uma unidade, sem definir precisamente, por entender que é uma prática comum nas ciências que normalmente lidam com problemas muito complexos e menos precisamente definidos, como é o caso do impacto ambiental (RUIZ-MERCADO et al., 2016).

Essa pesquisa foi definida através dos estudos do conceito de Química Verde e da Engenharia Sustentável, seus impactos e da relevância da avaliação das questões de sustentabilidade para os engenheiros no mundo atual.

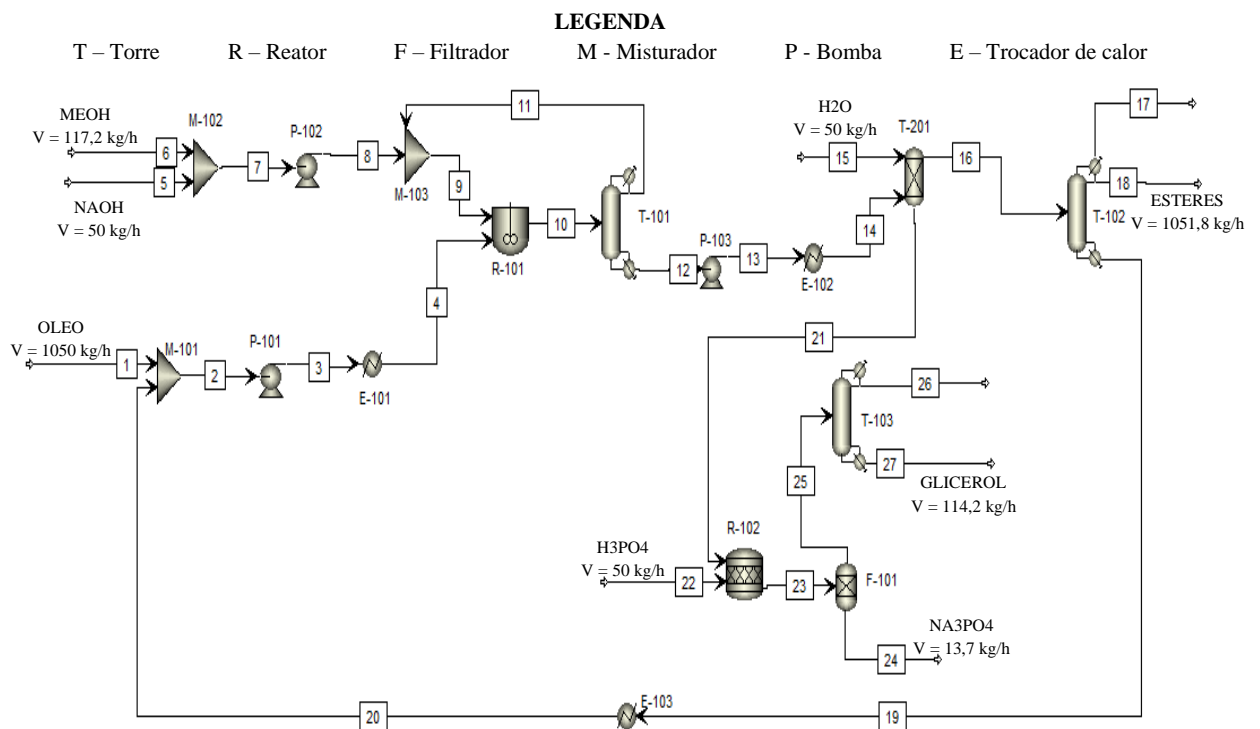
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo serão apresentados os resultados encontrados e a interpretação de seus resultados.

4.1. ESTUDO DE CASO: SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE PRODUÇÃO DE BIODIESEL

Com todas as correntes de entrada, operações unitárias e utilidades definidas, o processo foi simulado no *Aspen Plus V11*[®] e pode ser visualizado na Figura 6, com as principais vazões das correntes dos produtos encontradas.

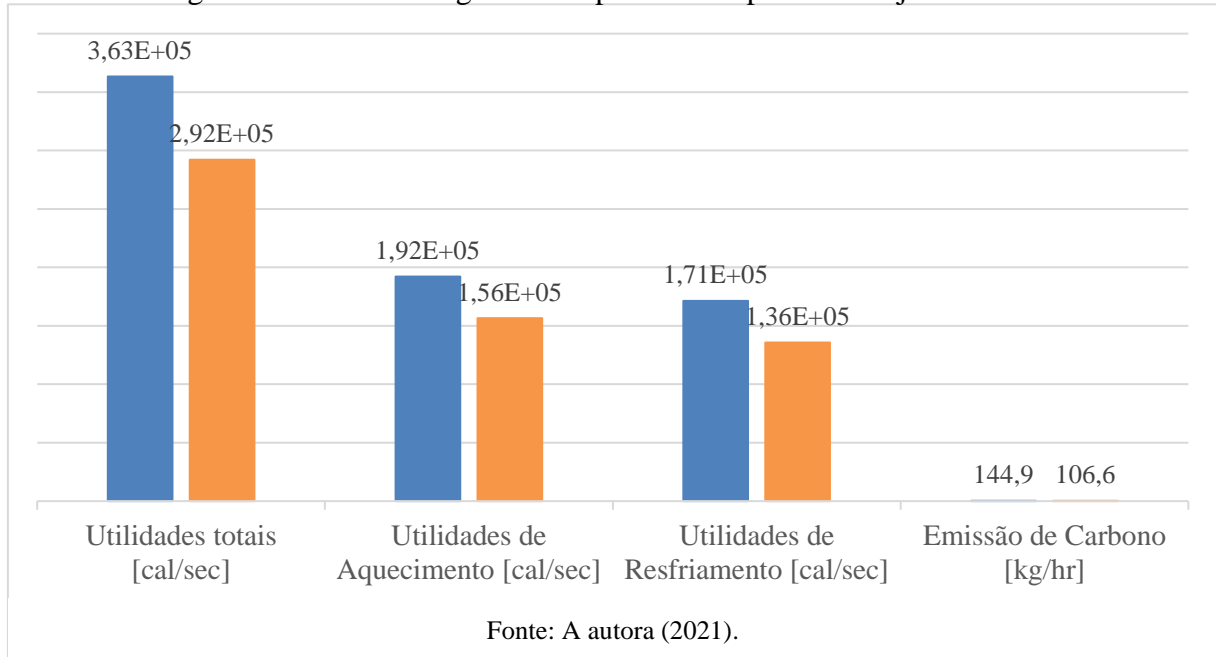
Figura 6 - Processo de produção de biodiesel simulado no Aspen Plus V11[®]



Fonte: Acervo pessoal.

O resultado do cálculo da análise energética performada é apresentada na Figura 7, contendo a quantidade energética gasta pelas utilidades (separadas por aquecimento e resfriamento) e a emissão de carbono do processo.

Figura 7 - Análise energética comparativa do processo objetivo e atual



Foi também calculado a diferença entre a energia atual do processo com a teórica ideal e os valores podem ser encontrados no Quadro 4.

QUADRO 4 – RESULTADOS DA ECONOMIA DE ENERGIA POR UTILIDADE

Propriedades	Atual	Objetivo	Economia disponível	% do Atual
Utilidades totais (cal/s)	363300	292000	71300	19,63
Utilidades de Aquecimento (cal/s)	192100	156400	35700	18,57
Utilidades de Resfriamento (cal/s)	171200	135600	35600	20,83
Emissão de carbono (kg/h)	144,9	106,6	38,85	26,47

Fonte: A autora (2021).

Através dos resultados encontrados, é possível observar pela Figura 7 que o processo possui um gasto energético de utilidades quentes maior que o de utilidades frias, valor este dentro do esperado, visto que possui uma utilidade a mais de aquecimento. Mas a análise energética demonstra principalmente que o processo proposto possui um gasto energético em 363.300 cal/s, quando idealmente poderia ter um gasto de 292.000 cal/s. Com essa diferença, entende-se que 19,63% do gasto energético total está em excesso e poderia ser otimizado.

A taxa de emissão de carbono encontrada no processo de 144,9 kg/h representa um valor de 26,4% acima da taxa ideal. Esse valor destaca que mais de $\frac{1}{4}$ do valor total do principal gás do efeito estufa poderia ser reduzido, através de alguma mudança no processo ou combustível utilizado.

O mesmo processo do *Aspen Plus V11*[®] foi inserido no software *WAR algorithm* e, com a quantidade de energia total utilizada pelas utilidades (363.300 cal/s = 54,75 x 10² MJ/hr),

foi possível encontrar o PEI do processo atual e comparar com o PEI do processo teórico, resultados apresentados no Quadro 5.

QUADRO 5 – ANÁLISE DO WAR ALGORITHM

Taxas das Propriedades	Atual	Objetivo	Unidade
Consumo de Energia do processo	5475	4398	MJ/h
PEI de entrada do processo	54,5	54,5	impacto/h
PEI gerado no processo	173,4	172,2	impacto/h
PEI da energia do processo	6,047	4,858	impacto/h
PEI das correntes de produto	167,4	167,4	impacto/h
PEI de saída do processo	227,9	226,7	impacto/h

Fonte: A autora (2021).

A avaliação dos dados encontrados no *WAR algorithm* referente ao PEI do processo químico, demonstra que o PEI do processo é positivo, ou seja, que o processo simulado produz um impacto ambiental. Devido as considerações realizadas na utilização do software, os valores não serão exatos, mas trarão contribuições na análise através da escala e relação entre os PEI de cada processo. O PEI gerado no processo equivale a 76,1% do PEI de saída e, portanto, indica uma oportunidade de estudo para reduzir o seu valor, seja através de maiores rendimentos do processo ou até uma diferença em sua escala.

As correntes de produto têm um papel significativo no PEI gerado do processo, sendo responsável por uma geração de 73,5%, e por isso é importante controlar o processo com a quantidade desejada a ser produzida do produto de interesse, otimizando também os resíduos gerados e minimizando os impactos ambientais de substâncias secundárias. Apesar de apenas 3,5% ser proveniente da energia utilizada no processo, o intuito em qualquer design verde em processos seria otimizar e reduzir ao máximo o impacto causado. É possível observar que a diferença entre o PEI do processo atual e do objetivo se deu unicamente pela energia de cada processo, já que nenhuma alteração foi ainda feita.

A análise com o *software WAR* mostrou que a abordagem pode trazer informações relevantes para a temática de design de processos verde, fomentando discussões e análise crítica acerca de seus resultados. A ferramenta também é uma boa escolha para comparar processos químicos no início do desenvolvimento, por indicar qual processo teria um impacto ambiental maior, seja por conta do processo em si ou dos produtos produzidos (RUIZ-MERCADO et al., 2016). Apesar de algumas considerações terem sido feitas, como a classificação das categorias de toxicidade como unidade e a incerteza dos dados de impacto ambiental primário dos componentes químicos (como a dose letal LD50 e LC50, etc.), a utilização da ferramenta em

casos comparativos cumpre com o seu propósito.

A partir desses resultados encontrados, uma análise mais aprofundada foi realizada para entender a viabilidade de alterações no processo que trouxessem uma maior economia de energia e um menor impacto ambiental. Brondani et al. (2012) e Siregar et al. (2015), demonstram que a etapa de transesterificação tem um papel importante nos impactos ambientais, tanto pela liberação de poluentes, quanto pelo alto consumo energético, por isso alterações no processo produtivo podem afetar diretamente a LCA do biodiesel.

Utilizando a ferramenta de “encontrar mudanças no *design*” do *Aspen Plus V11*[®], encontrou-se cinco possíveis soluções de alteração no processo, conforme Quadro 6. Não foi encontrado nenhuma solução para alteração das utilidades já existentes, apenas com a inserção de novos trocadores.

QUADRO 6 – SOLUÇÕES PARA ALTERAÇÃO DO DESIGN DO PROCESSO DE PRODUÇÃO

Solução	Economia de energia (%)	Retorno (ano)	Economia de energia em custo (\$/ano)	Local do trocador	
				Fluido do lado quente	Fluido do lado frio
1	14,35	2	6545	Condensador T-103	Reboiler T-101
2	2,75	9,4	1256	Condensador T-103	E-101
3	9,5	460,5	23	Condensador T-102	Reboiler T-101
4	1,83	2363	4	Condensador T-102	Trocador de calor do R-101
5	0,53	8046	1	Condensador T-102	E-101

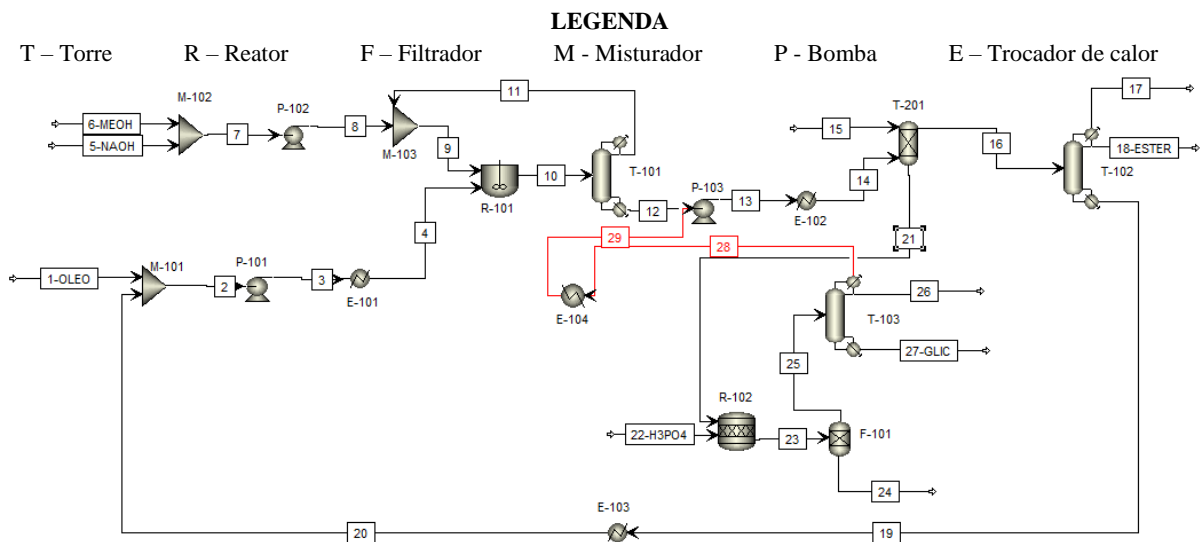
Fonte: A autora (2021)

Outras soluções obtidas através de uma visão crítica também poderiam ser implementadas pensando na otimização do processo. O resfriamento da corrente de reciclo do óleo no E-103 passando de 338°C a 25°C, para depois aquecer a 60°C no E-101 pode ser um gasto de energia extra, comparado com o resfriamento do reciclo até 60°C e o aquecimento da vazão menor de entrada de óleo a 60°C. As utilidades alocadas também possuem margem para alteração, como a utilização de correntes com algumas temperaturas mais próximas a temperatura de interesse e/ou a mudança do tipo de utilidade, como por exemplo a utilização de água da torre de resfriamento no lugar do ar na U-5.

A opção escolhida foi implementar a solução 1 para analisar as diferenças em relação ao primeiro caso no consumo energético e impacto ambiental, por ser a mais viável economicamente. Nesse caso, inseriu-se um trocador de calor entre o condensador da coluna de destilação T-103 e o *reboiler* da T-101, com as temperaturas de 70°C e 59°C

respectivamente, pensando em otimizar o calor gasto no segundo equipamento. Foi preciso alterar as configurações da coluna de destilação T-103 trocando o condensador total para parcial vapor-líquido e utilizou-se a fração de massa de vapor de 0,5. O fluxograma com o novo trocador indicado em vermelho é ilustrado na Figura 8.

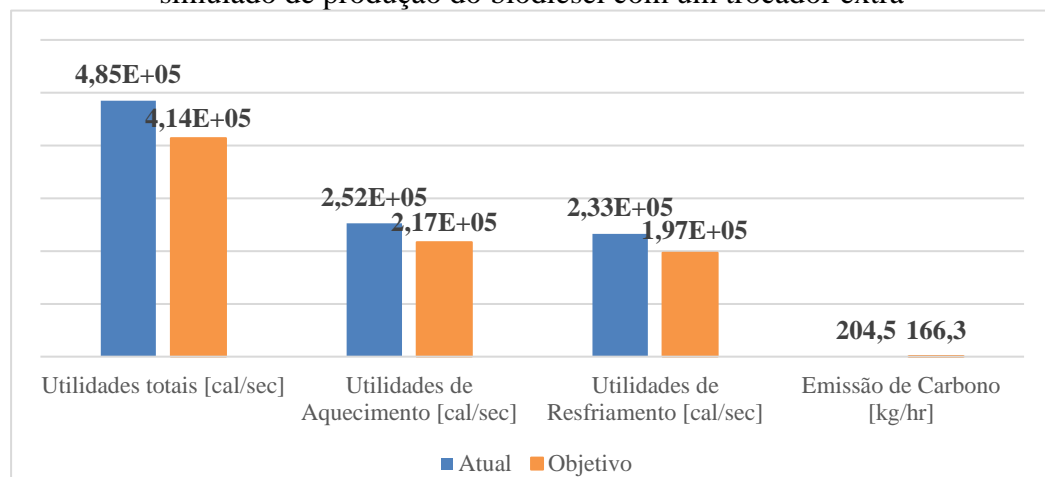
Figura 8 - Processo de produção de biodiesel após a adição de um novo trocador de calor



Fonte: acervo pessoal.

Os resultados encontrados da análise energética do novo fluxograma proposto são apresentados na Figura 9, com os gastos energéticos das utilidades e da emissão de carbono, e no Quadro 7, com o cálculo da diferença de energia atual do processo com a teórica ideal.

Figura 9 - Análise energética comparativa do processo objetivo e do atual no processo simulado de produção do biodiesel com um trocador extra



Fonte: A autora (2021).

QUADRO 7 – RESULTADOS DA ECONOMIA DE ENERGIA POR UTILIDADES COM TROCADOR EXTRA

Propriedades	Atual	Objetivo	Economia disponível	% do Atual
Utilidades totais (cal/s)	485000	413600	71400	14,71
Utilidades de Aquecimento (cal/s)	252300	216600	35700	14,14
Utilidades de Resfriamento (cal/s)	232700	197000	35700	15,33
Emissão de carbono (kg/h)	204,5	166,3	38,25	18,7

Fonte: A autora (2021)

Com a análise no WAR *algorithm* também foi encontrado os dados do Quadro 8.

QUADRO 8 – ANÁLISES DO WAR ALGORITHM NO PROCESSO COM UM TROCADOR EXTRA

Taxas das Propriedades	Atual	Objetivo	Unidade
Consumo de Energia do processo	7309	6233	MJ/h
PEI de entrada do processo	54,5	54,5	impacto/h
PEI de saída do processo	229,9	228,7	impacto/h
PEI gerado no processo	175,4	174,3	impacto/h
PEI da energia do processo	8,073	6,884	impacto/h

Fonte: A autora (2021)

Os resultados apresentados do processo com um trocador extra indicam uma diminuição da diferença energética entre o processo atual e o ideal, porém com um aumento no gasto energético, já que se tem um equipamento adicional (E-104). Com um gasto energético maior, o impacto ambiental causado também é maior, assim como a emissão de gás carbônico.

Através dos dados do WAR *algorithm*, é possível notar que o PEI gerado pelo processo sofreu um aumento em relação ao processo anterior apenas no PEI de energia do processo. Isso mostra que quando não há apenas a adição de uma utilidade, sem nenhuma alteração de rendimento do processo, o impacto ambiental adicional será apenas resultante da origem energética. O PEI da energia do processo encontrado no WAR *algorithm* representou um aumento de 33% ao emitido anteriormente.

Essa avaliação mostrou que a otimização somente através de novas utilidades não é uma solução sustentável, pois forneceria um impacto ambiental maior, mesmo que economicamente trouxesse um retorno em apenas dois anos. Este resultado é mais um indício de que os pilares econômicos e ambientais devem ser trabalhados concomitantemente.

É possível observar que pequenas variações realizadas em um processo produtivo, seja para um aumento de eficiência energética ou rendimento, podem trazer resultados diretos nos indicadores de impactos ambientais. E esses impactos do processo, serão incluídos também na

análise de ciclo de vida do produto de interesse. Segundo estudo de Brondani et al. (2015), o consumo de energia da produção de biodiesel equivale em torno de 32,45% de todo o ciclo de vida, ficando atrás apenas da etapa de fertilizante, que ocupa 36,60%, ao mesmo tempo em que a etapa de transesterificação também é responsável por 23% do potencial de aquecimento global em 100 anos (SIREGAR et al., 2015).

Por isso, é muito importante os projetos de design trabalhem juntamente com os princípios da engenharia sustentável, para não apenas solucionar o problema de um lado, mas acabar trazendo impactos para o outro, que afetará diretamente o ambiente. É preciso de uma visão a longo prazo, colocando em consideração as possíveis causas e consequências, para otimizar as variáveis que possam oferecer os melhores resultados socialmente, economicamente e ambientalmente.

4.2. A ABORDAGEM DA ENGENHARIA DA SUSTENTABILIDADE NO ENSINO DA ENGENHARIA QUÍMICA

Por meio da revisão bibliográfica desta pesquisa, foi investigado o contexto atual do tema proposto e o interesse no objetivo a ser alcançado. A revisão da literatura foi dividida em duas vertentes com o propósito de entender o papel e relevância dos temas no campo de atuação e formação de um Engenheiro Químico, sendo eles a química verde e o desenvolvimento sustentável.

A criação da ciência Química Verde nos últimos 30 anos trouxe consigo temas de grande destaque, instigando a importância de regulamentos ambientais, o avanço constante de tecnologias acerca de substâncias químicas, além de principalmente focar os seus esforços e estudos para a prevenção de impactos ambientais. Por muitos anos, materiais químicos eram usados sem ter total conhecimento sobre as consequências que seu uso poderia provocar, tanto ao meio ambiente, quanto à saúde humana.

A compreensão dos 12 princípios da ciência relatada se torna pertinente para a formação de novos profissionais que poderão trabalhar diretamente com produtos e/ou processos químicos. Entender e contabilizar os possíveis impactos causados por suas ações e usos, pode trazer mudanças em seus trabalhos, estimulando a percorrer um caminho com menos ameaças para o futuro do planeta.

Paralelamente a essa temática, com a finalidade de atingir a região entre os três pilares da sustentabilidade, sendo eles o social, o econômico e o ambiental, o desenvolvimento

sustentável foi ganhando espaço e força política nos últimos anos. O conceito busca conciliar as necessidades e o desenvolvimento humano com a capacidade do planeta de lidar com as consequências, conseguindo uma relação harmoniosa entre ambos.

Aumentando a preocupação em relação a utilização dos recursos da natureza e ao desenvolvimento socioeconômico, os Objetivos de Desenvolvimento Sustentáveis foram criados e enfatizados por todos os 192 países que participaram da cúpula, com uma meta de desenvolvimento do planeta até 2030. O foco de inserir o mundo em um caminho sustentável, carrega mudanças em todas as áreas de atuação, inclusive na engenharia.

Com o escopo de conseguir atender as necessidades dos indivíduos, apoiar as inovações e trabalhar para não afetar a capacidade do ecossistema, os engenheiros são responsáveis por desenvolver soluções necessárias e relevantes para o mundo sustentável. Os engenheiros necessitam trabalhar com o foco na redução de resíduos, gestão de materiais, prevenção de poluição e melhoria de produto. A relevância dessa temática deve ser ensinada já na base da pirâmide, ou seja, na formação desses cidadãos e profissionais.

Outra evidência desse contexto aparece em abril de 2019, através da publicação da Resolução CNE/CES 2/2019 (BRASIL, 2019), que estabelece as novas Diretrizes Curriculares Nacionais do Curso (DCN) de Graduação em Engenharia na qual as Instituições de Educação Superior devem seguir para o desenvolvimento dos cursos de Engenharia no Sistema de Educação Superior do país. Neste documento, é definido que os cursos de graduação devem montar os seus Projetos Pedagógicos do Curso (PPC) de forma que assegure o desenvolvimento das competências determinadas no perfil do egresso.

Uma das características principais esperada dos egressos é “atuar com isenção e comprometimento com a responsabilidade social e com o desenvolvimento sustentável”, e para isso o curso de graduação deve fornecer que o estudante seja “capaz de compreender a legislação, a ética e a responsabilidade profissional e avaliar os impactos das atividades de Engenharia na sociedade e no meio ambiente” (Resolução CNE/CES 2/2019).

Através destas novas DCN, é incontestável que todos os cursos de engenharia devem trabalhar para manter a vertente da Engenharia Sustentável como um pilar necessário da graduação e dos PPCs. A temática consegue ser inserida através de fundamentações teóricas dos quatro objetivos (redução de resíduos, gestão de materiais, prevenção de poluição e melhoria de produto) e da contextualização das respectivas áreas de cada curso. Também possui oportunidade para ser implementada na prática, com simulações e experimentos, como foi um dos casos realizado nesta pesquisa. Uma proposta que pode ser aplicada a todas as engenharias

é a Engenharia Sustentável ser difundida com mais ênfase no final do curso, quando o graduando já possui os conhecimentos básicos necessários e consegue combinar a atribuição do engenheiro com a sustentabilidade em sua área de formação.

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este trabalho teve como meta contextualizar a temática da química verde e do desenvolvimento sustentável no campo da Engenharia Química. Com seu desenvolvimento foi possível compreender a relevância dessas temáticas para a formação e utilização por parte do profissional e avaliar a viabilidade de ferramentas que fornecem insumos para análises críticas acerca de processos produtivos.

Através da revisão bibliográfica, foi possível relacionar as temáticas em destaque com o escopo da Engenharia Química e a importância da inserção dessas temáticas na grade curricular do curso de graduação. Seguindo os princípios da química verde, é essencial o entendimento das consequências causadas pela utilização dos compostos químicos, para buscar reduzir os impactos ambientais causados.

O conceito sistêmico de desenvolvimento sustentável e sustentabilidade é um pouco mais consolidado e faz parte da vertente de engenharia sustentável atual. Porém, os cursos de graduação ainda precisam atualizar suas grades e inserir essas temáticas na formação dos novos profissionais, apresentando os princípios sustentáveis e sua atuação. O enraizamento desses valores na base faz com que suas mentalidades e ações sejam guiadas por um mundo mais sustentável, procurando por soluções verde a longo prazo. Como exemplo, os ODS poderiam ser mais discutidos e disseminados nos cursos de graduação de todas as áreas, pois além de trazer a mentalidade de sustentabilidade e consequências das ações, também poderiam ser responsáveis por fornecer soluções inovadoras e muito representativas para o mundo em que vivemos.

A mudança da matriz energética baseada em combustíveis fósseis para combustíveis renováveis é lenta e gradual, porém é importante ter um contínuo debate sobre o assunto com estudos cada vez mais aprofundados. O estudo de caso da produção de biodiesel por óleos vegetais, realizado com duas ferramentas diferentes, complementou a discussão e trouxe dados interessantes proporcionando uma maior clareza dos impactos ambientais causados e possíveis soluções de mitigação. O uso do *Aspen Plus V11*[®] proporcionou a simulação e análise energética do processo. Já a utilização do *software* WAR foi eficiente em fornecer resultados do processo em termos de impactos ambientais com variações das utilidades, mostrando que provavelmente seria eficaz em comparar dois processos químicos diferentes para um mesmo produto. Os resultados também levam a crer que qualquer variação no design de um processo pode resultar em impactos significativos na análise do ciclo de vida de um produto.

Além disso, identificou-se que a metodologia utilizada pode ser aplicada aos mais diversos processos químicos e bioquímicos, instigando a análise ambiental no desenvolvimento de processos químicos ainda na fase de formação do profissional de engenharia química, fomentando a busca por soluções cada vez mais sustentáveis.

Como sugestões para futuros trabalhos:

- Fazer uma análise mais aprofundada do processo utilizado, com análise das correntes e vazões, procurando possíveis mudanças e rendimentos, como uma integração energética entre elas, podendo ser utilizada a ferramenta GREENSCOPE ou outras. Entender o que essas mudanças representam em termos de impacto ambiental.
- Realizar um estudo detalhado da relação entre o impacto econômico e o impacto ambiental do processo em questão, podendo até ser feito uma análise comparativa com um processo de combustível fóssil.
- Comparar processos de produção de biodiesel diferentes, procurando formas de otimização do processo em questão, analisando o impacto ambiental final de cada um dos processos.

REFERÊNCIAS

ABIOVE, APROBIO, UBRABIO. **O setor do biodiesel alerta para o retrocesso contido em manifestação de entidades contrárias ao bem maior do Brasil**. 2021. Disponível em: <https://abiove.org.br/wp-content/uploads/2021/05/18052021_Posicionamento-conjunto_Fecombustiveis.pdf>. Acessado em: 03 de junho de 2021.

ANASTAS, P. T. WARNER, J. C. **Green Chemistry: Theory and Practice**, New York: Oxford University Press, 1998.

ASSOCIADOS, GO. **Parecer econômico sobre os impactos da redução da mistura mínima obrigatória de biodiesel ao óleo diesel commercial**. Abril de 2021. Disponível em: <<https://ubrablo.com.br/wp-content/uploads/2021/05/Parecer-Econo%CC%82mico-Impactos-da-Reduc%CC%A7a%CC%83o-da-Mistura-do-Biodiesel-ao-Diesel-2021-04-13.pdf>>. Acessado em 15 de junho de 2021.

BEREITER, Bernhard et al. **Revision of the EPICA Dome C CO₂ record from 800 to 600 kyr before present**. *Geophysical Research Letters*, v. 42, n. 2, p. 542-549, 2015.

BRUNDTLAND, Gro Harlem et al. **Our common future**. New York, v. 8, 1987.

CARVALHO, Ana, et al. **SustainPro**—A tool for systematic process analysis, generation and evaluation of sustainable design alternatives. *Computers & Chemical Engineering*, v. 50, p. 8-27, 2013.

DARK WATERS. Direção: Todd Haynes. Produção de Killer Films e Participant Media. Estados Unidos: Focus Feature, 2019. Amazon Prime Video.

DAVIDSON, C. Et al. **Preparing future engineers for challenges of the 21st century: Sustainable engineering**. *Journal of Cleaner Production* 18, 698-701. 2010.

DISCUSSÃO, Em. **Conferência Rio-92 sobre o meio ambiente do planeta: desenvolvimento sustentável do planeta**. Revista de audiências públicas do Senado Federal. Brasília, DF, ano 3, n. 11, 2012. Disponível em: <<https://www.senado.gov.br/noticias/Jornal/emdiscussao/rio20/a-rio20/conferencia-rio-92-sobre-o-meio-ambiente-do-planeta-desenvolvimento-sustentavel-dos-paises.aspx>>. Acesso em: 21 de maio de 2021.

ENGINEERING, The Royal Academy. **Report Engineering for Sustainable Development: Guiding Principles**. Publicado por The Royal Academy Engineering, 2005.

EPA. **EPA announces proposed decision regulate PFOA and PFOS in Drinking Water**. <<https://www.epa.gov/newsreleases/epa-announces-proposed-decision-regulate-pfoa-and-pfos-drinking-water>>. Acesso em: 16 de maio de 2021.

EPA. **Benefits of Green Chemistry**. Disponível em

<<https://www.epa.gov/greenchemistry/benefits-green-chemistry>>. Acesso em: 16 de maio de 2021.

EPA. **Environmental Optimization Using the Waste Reduction Algorithm (WAR)**, Agosto, 2011. Disponível em: <https://cfpub.epa.gov/si/si_public_record_report.cfm?Lab=NRMRL&dirEntryId=238300>. Acessado em: 16 de maio de 2021.

EPE. **Dados da Empresa de Pesquisa Energética**. Disponível em: <<http://epe.gov.br/pt/abcdenergia/matriz-energetica-e-eletrica>>. Acessado em: 28 de maio de 2021.

GAGNON, B. LEDUC, R. SAVARD, L. **Sustainable development in engineering: a review of principles and definition of a conceptual framework**. Groupe de Recherche en Économie et Développement International. 2008.

GIL, A. C. **Métodos e técnicas de pesquisa social**. 5. ed. São Paulo: Atlas, 1999. _____, Como Elaborar Projetos de Pesquisa. 4. ed. São Paulo: Atlas, 2002.

GOLDEMBERG, J.; LUCON, O. **Energia, meio ambiente e desenvolvimento**. 2008.

HANDL, G. **Declaration of the United Nations Conference on the Human Environment (Stockholm Declaration), 1972 and the Rio Declaration on environment and development, 1992**. United Nations Audiovisual Library of International Law. 2012. Disponível em: <https://legal.un.org/avl/pdf/ha/dunche/dunche_e.pdf>. Acesso em: 21 de maio de 2021.

IPCC. **Special Report on Global Warming of 1,5°C**, Geneva 2018.

IRENA. **Climate Change and Renewable Energy: National policies and the role of communities, cities and regions (Report to the G20 Climate Sustainability Working Group (CSWG))**, International Renewable Energy Agency, Abu Dhabi. 2019.

ISO. INTERNATIONAL ORGANIZATION FOR STANDARDIZATION. **Environmental Management: Life Cycle Assessment; Principles and Framework**. ISO, 2006.

KAMAL, I. M. Al-Malah. **ASPEN PLUS: Chemical Engineering Applications**. Wiley. New Jersey, 2017.

KNOTHE, G.; GERPEN, J. v.; KRAHL, J.; RAMOS, L. P. **Manual de biodiesel**.^a reimpressão. São Paulo: Edgard Blücher, 2006.

LÔBO, Ivon Pinheiro; FERREIRA, Sérgio Luis Costa; CRUZ, Rosenira Serpa da. **Biodiesel: parâmetros de qualidade e métodos analíticos**. Química nova, v. 32, n. 6, p. 1596-1608, 2009.

MALLICK, Subir K. et al. **A pollution reduction methodology for chemical process**

simulators. Industrial & engineering chemistry research, v. 35, n. 11, p. 4128-4138, 1996.

MALONEY, William F.; VALENCIA CAICEDO, Felipe. **Engineering growth:** innovative capacity and development in the Americas. 2017.

MCDONOUGH, William; BRAUNGART, Michael. **The Hannover Principles.** William McDonough Architects, v. 640, 1992.

MME. **Resenha Energética Brasileira.** Ministério de Minas e Energia (MME), 30 de maio de 2020. Disponível em: <<http://antigo.mme.gov.br/web/guest/secretarias/planejamento-e-desenvolvimento-energetico/publicacoes/resenha-energetica-brasileira>>. Acessado em 18 de junho de 2021.

MUNDO, Transformando Nosso. **A Agenda 2030 para o Desenvolvimento Sustentável.** Recuperado em, v. 15, p. 24, 2016.

ONU Brasil. **Objetivos de Desenvolvimento Sustentável.** Disponível em: <<https://brasil.un.org/pt-br/sdgs>>. Acesso em: 23 de maio de 2021.

ONU. **A ONU e o Meio Ambiente.** Disponível em <<https://brasil.un.org/pt-br/91223-onu-e-o-meio-ambiente#:~:text=%E2%80%9CO%20desenvolvimento%20sustent%C3%A1vel%20%C3%A9%20o,de%20atender%20suas%20pr%C3%B3prias%20necessidades.%E2%80%9D>>. Acesso em: 21 de maio de 2021.

RAMOS, L. P.; DOMINGOS, A. K.; KUCEK, K. T.; WILHELM, H. M. **Biodiesel:** um projeto de sustentabilidade econômica e socioambiental para o Brasil. Biotecnologia: Ciência e Desenvolvimento, v. 3, p. 28-37, 2003.

RESOLUÇÃO CONAMA nº 1, de 23 de janeiro de 1986. Publicada no Diário Oficial da União, de 17 de fevereiro de 1986, Seção 1, páginas 2548-2549.

RESOLUÇÃO CNPE Nº 4 de 09 de abril de 2021. Publicada no Diário Oficial da União de 13 de abril de 2021, Seção 1.

RESOLUÇÃO CNPE Nº 16 de 29 de outubro de 2018. Publicada no Diário Oficial da União de 08 de novembro de 2018, Seção 1.

RESOLUÇÃO CNE/CES 2/2019. **Diretrizes Curriculares Nacionais do Curso de Graduação em Engenharia.** Diário Oficial da União, Brasília, 26 de abril de 2019, Seção 1, pp. 43 e 44.

RICHARDSON, Roberto Jarry. **Pesquisa social:** métodos e técnicas. São Paulo: Atlas, 1989

RIO+20. **Sobre a Rio +20.** Comitê Nacional de Organização Rio+20. 2012a. Disponível em:

<http://www.rio20.gov.br/sobre_a_rio_mais_20.html>. Acesso em: 21 de maio de 2021.

RIO+20, Comitê Nacional de Organização. **Como chegamos até aqui**. Conferência das Nações Unidas sobre Desenvolvimento Sustentável. 2012b. Disponível em: <http://www.rio20.gov.br/sobre_a_rio_mais_20/rio-20-como-chegamos-ate-aqui/at_download/rio-20-como-chegamos-ate-aqui.pdf>. Acesso em: 21 de maio de 2021.

RIO+20. **ONU estabelece três pilares para o desenvolvimento sustentável dos países: econômico, social e ambiental**. 2012c. Disponível em: <senado.gov.br/noticias/Jornal/emdiscussao/rio20/temas-em-discussao-na-rio20/onu-estabelece-tres-pilares-para-o-desenvolvimento-sustentavel-dos-paises-economico-social-e-ambiental.aspx#:~:text=A%20Declaração%20de%20Joanesburgo%20estabelece,desenvolvimento%20social%20e%20proteção%20ambiental.>. Acesso em: 21 de maio de 2021.

RUIZ-MERCADO, G. J; CARVALHO, Ana; CABEZAS, Heriberto. **Using green chemistry and engineering principles to design, assess, and retrofit chemical processes for sustainability**. ACS sustainable chemistry & engineering, v. 4, n. 11, p. 6208-6221, 2016.

RUIZ-MERCADO, Gerardo J.; GONZALEZ, Michael A.; SMITH, Raymond L. **Sustainability indicators for chemical processes: III. Biodiesel case study**. Industrial & Engineering Chemistry Research, v. 52, n. 20, p. 6747-6760, 2013.

RUIZ-MERCADO, Gerardo J.; SMITH, Raymond L.; GONZALEZ, Michael A. **Sustainability indicators for chemical processes: II. Data needs**. Industrial & engineering chemistry research, v. 51, n. 5, p. 2329-2353, 2012.

SAMSUNG. **Global Goals**. Disponível em: <<https://www.samsung.com/br/apps/samsung-global-goals/>>. Acesso em: 23 de maio de 2021.

SALLET, Cíntia Letícia; ALVIM, Augusto Mussi. **Biocombustíveis: uma análise da evolução do biodiesel no Brasil**. Revista Economia & Tecnologia, v. 7, n. 2, 2011.

SILVA, D. et al. **How important is the LCA software tool you choose: Comparative results from GaBi, openLCA, SimaPro and Umberto**. In: VII Conferencia Internacional de anáLisis de Ciclo de Vida En Latinoamérica. 2017.

SIREGAR, Kiman et al. **A comparison of life cycle assessment on Oil Palm (*Elaeis guineensis* Jacq.) and Physic Nut (*Jatropha curcas* Linn.) as feedstock for Biodiesel production in Indonesia**. Energy Procedia, v. 65, p. 170-179, 2015.

TUNDO, P. ARICO, F. **Green Chemistry on Rise: Thoughts on the Short History of the Field**. Chemistry International. Vol. 29, no.5. Set-Out, 2007.

TUNDO, P. Et al. **Synthetic pathways and processes in green chemistry**. Introductory overview. Pure and Applied. Chemistry, Vol. 72, No. 7, pp. 1207–1228, 2000.

UNESCO. **Engineering for Sustainable Development**. United Nations Educational, Scientific and Cultural Organization. 2021.

UNESCO. **Twelve Principles of Green Chemistry**. Disponível em <<http://www.unesco.org/new/en/natural-sciences/science-technology/basic-sciences/chemistry/green-chemistry-for-life/twelve-principles-of-green-chemistry/>>. Acesso em: 16 de maio de 2021.

UNESCO Report. **Engineering: Issues, Challenges and Opportunities for Development**. UNESCO Publicação em 2010.

VALLERO, D. BRASIER, C. **Sustainable Design: the science of sustainable and green engineering**. John Willey & Sons, Inc. Estados Unidos. 2008.

VENTURA, Magda Maria. **O Estudo de Caso como Modalidade de Pesquisa**. SOCERJ. Rio de Janeiro. p. 383-386, set./out., 2007.

YIN, R. K. **Estudo de caso: planejamento e métodos**. 2. ed. Porto Alegre: Bookman, 2001. 290 p.

YOUNG, Douglas M.; CABEZAS, Heriberto. **Designing sustainable processes with simulation: the waste reduction (WAR) algorithm**. Computers & chemical engineering, v. 23, n. 10, p. 1477-1491, 1999.

YIN, R. K. **Evaluation: A singular craft**. In C. Reichardt & S. Rallis (Eds.), *New directions in program evaluation* (pp. 71-84). San Francisco: Jossey-Bass. 1994.

ZHANG, Yen et al. **Biodiesel production from waste cooking oil: 1. Process design and technological assessment**. Bioresource technology, v. 89, n. 1, p. 1-16, 2003.

APÊNDICE A – Reações estequiométricas e parâmetros cinéticos utilizados no reator CSTR

$$k(T) = k \left(\frac{T}{T_0} \right)^n e^{-\left(\frac{E}{R} \right) \left[\frac{1}{T} - 1/T_0 \right]} \quad (2)$$

Nº da reação	Reação	K	n	E (cal/mol)	T ₀ (°C)
1	OOO + METANOL + 0 NAOH -> METIL-O _(MIXED) + OO _(MIXED)	0,0231108	0	13500	50
2	OO + METIL-O -> OOO _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00186667	0	10300	50
3	OO + METANOL + 0 NAOH -> METIL-O _(MIXED) + 1-O _(MIXED)	0,106592	0	17400	50
4	METIL-O + 1-O -> OO _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00221667	0	16200	50
5	1-O + METANOL + 0 NAOH -> GLICEROL _(MIXED) + METIL-O _(MIXED)	0,0575411	0	6200	50
6	GLICEROL + METIL-O -> METANOL _(MIXED) + 1-O _(MIXED)	0,000266667	0	11900	50
7	MMM + METANOL + 0 NAOH -> METIL-M _(MIXED) + MM _(MIXED)	0,0231108	0	13500	50
8	METIL-M + MM -> MMM _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00186667	0	10300	50
9	MM + METANOL + 0 NAOH -> METIL-M _(MIXED) + 1-M _(MIXED)	0,106592	0	17400	50
10	METIL-M + 1-M -> MM _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00221667	0	16200	50
11	1-M + METANOL + 0 NAOH -> GLICEROL _(MIXED) + METIL-M _(MIXED)	0,0575411	0	6200	50

12	GLICEROL + METIL-M -> METANOL _(MIXED) + 1-M _(MIXED)	0,00026667	0	11900	50
13	PPP + METANOL + 0 NAOH -> METIL- P _(MIXED) + PP _(MIXED)	0,0231108	0	13500	50
14	METIL-P + PP -> PPP _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00186667	0	10300	50
15	PP + METANOL + 0 NAOH -> METIL- P _(MIXED) + 1-P _(MIXED)	0,106592	0	17400	50
16	METIL-P + 1-P -> METANOL _(MIXED) + PP _(MIXED)	0,00221667	0	16200	50
17	1-P + METANOL + 0 NAOH -> GLICEROL _(MIXED) + METIL-P _(MIXED)	0,0575411	0	6200	50
18	GLICEROL + METIL-P -> METANOL _(MIXED) + 1-P _(MIXED)	0,000266667	0	11900	50
19	PPS + METANOL + 0 NAOH -> METIL- S _(MIXED) + PP _(MIXED)	0,0077	0	13500	50
20	METIL-S + PP -> PPS _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00186667	0	10300	50
21	PPS + METANOL + 0 NAOH -> METIL- P _(MIXED) + PS _(MIXED)	0,0154	0	13500	50
22	METIL-P + PS -> PPS _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00186667	0	10300	50
23	PS + METANOL + 0 NAOH -> METIL- P _(MIXED) + 1-S _(MIXED)	0,0533	0	17400	50
24	METIL-P + 1-S -> METANOL _(MIXED) + PS _(MIXED)	0,00221667	0	16200	50
25	1-S + METANOL + 0 NAOH -> GLICEROL _(MIXED) + METIL-S _(MIXED)	0,0575411	0	6200	50
26	GLICEROL + METIL-S ->	0,00026667	0	11900	50

	METANOL _(MIXED) + 1-S _(MIXED)				
27	PS + METANOL + 0 NAOH -> METIL-S _(MIXED) + 1-P _(MIXED)	0,0533	0	17400	50
28	METIL-S + 1-P -> METANOL _(MIXED) + PS _(MIXED)	0,00221667	0	16200	50
29	PPO + METANOL + 0 NAOH -> METIL-O _(MIXED) + PP _(MIXED)	0,0077	0	13500	50
30	METIL-O + PP -> PPO _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00186667	0	10300	50
31	PPO + METANOL + 0 NAOH -> METIL-P _(MIXED) + PO _(MIXED)	0,0154	0	13500	50
32	METIL-P + PO -> PPO _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00186667	0	10300	50
33	PO + METANOL + 0 NAOH -> METIL-P _(MIXED) + 1-O _(MIXED)	0,0533	0	17400	50
34	METIL-P + 1-O -> METANOL _(MIXED) + PO _(MIXED)	0,00221667	0	16200	50
35	PO + METANOL + 0 NAOH -> 1-P _(MIXED) + METIL-O _(MIXED)	0,0533	0	17400	50
36	METIL-O + 1-P -> PO _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00221667	0	16200	50
37	MMP + METANOL + 0 NAOH -> METIL-P _(MIXED) + MM _(MIXED)	0,0077	0	13500	50
38	MM + METIL-P -> METANOL _(MIXED) + MMP _(MIXED)	0,00186667	0	10300	50
39	MM + METIL-P -> METANOL _(MIXED) + MMP _(MIXED)	0,0154	0	13500	50
40	MP + METIL-M -> METANOL _(MIXED) + MMP _(MIXED)	0,00186667	0	10300	50

41	MP + METANOL + 0 NAOH -> METIL- P _(MIXED) + 1-M _(MIXED)	0,0533	0	17400	50
42	METIL-P + 1-M -> MP _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00221667	0	16200	50
43	MP + METANOL + 0 NAOH -> METIL- M _(MIXED) + 1-P _(MIXED)	0,0533	0	17400	50
44	METHYL-M + 1-P -> MP _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00221667	0	16200	50
45	PPLI + METHANOL + 0 NAOH -> METHY-LI _(MIXED) + PP _(MIXED)	0,0077	0	13500	50
46	METHY-LI + PP -> PPLI _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00186667	0	10300	50
47	PPLI + METANOL + 0 NAOH -> METIL- P _(MIXED) + PLI _(MIXED)	0,0154	0	13500	50
48	METIL-P + PLI -> PPLI _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00186667	0	10300	50
49	PLI + METANOL + 0 NAOH -> METHY- LI _(MIXED) + 1-P _(MIXED)	0,0533	0	17400	50
50	METHY-LI + 1-P -> PLI _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00221667	0	16200	50
51	PLI + METANOL + 0 NAOH -> METIL- P _(MIXED) + 1-LI _(MIXED)	0,0533	0	17400	50
52	METIL-P + 1-LI -> PLI _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00221667	0	16200	50
53	1-LI + METANOL + 0 NAOH -> GLICEROL _(MIXED) + METHY-LI _(MIXED)	0,0575411	0	6200	50
54	GLICEROL + METHY-LI -> METHANOL _(MIXED) + 1-LI _(MIXED)	0,000226667	0	11900	50
55	POO + METANOL + 0 NAOH -> METIL-	0,0154	0	13500	50

	$O_{(MIXED)} + PO_{(MIXED)}$				
56	$METIL-O + PO \rightarrow METANOL_{(MIXED)} + POO_{(MIXED)}$	0,00186667	0	10300	50
57	$POO + METANOL + 0\ NAOH \rightarrow METIL-P_{(MIXED)} + OO_{(MIXED)}$	0,0077	0	13500	50
58	$METIL-P + OO \rightarrow POO_{(MIXED)} + METANOL_{(MIXED)}$	0,00186667	0	10300	50
59	$POS + METANOL + 0\ NAOH \rightarrow METIL-S_{(MIXED)} + PO_{(MIXED)}$	0,0077	0	13500	50
60	$METIL-S + PO \rightarrow METANOL_{(MIXED)} + POS_{(MIXED)}$	0,00186667	0	10300	50
61	$POS + METANOL + 0\ NAOH \rightarrow METIL-P_{(MIXED)} + OS_{(MIXED)}$	0,0077	0	13500	50
62	$METIL-P + OS \rightarrow METANOL_{(MIXED)} + POS_{(MIXED)}$	0,00186667	0	10300	50
63	$POS + METANOL + 0\ NAOH \rightarrow METIL-O_{(MIXED)} + PS_{(MIXED)}$	0,0077	0	13500	50
64	$METIYL-O + PS \rightarrow METANOL_{(MIXED)} + POS_{(MIXED)}$	0,00186667	0	10300	50
65	$PLIO + METANOL + 0\ NAOH \rightarrow METIL-O_{(MIXED)} + PLI_{(MIXED)}$	0,0077	0	13500	50
66	$METIL-O + PLI \rightarrow METANOL_{(MIXED)} + PLIO_{(MIXED)}$	0,00186667	0	10300	50
67	$PLIO + METHANOL + 0\ NAOH \rightarrow METIL-P_{(MIXED)} + LIO_{(MIXED)}$	0,0077	0	13500	50
68	$METIL-P + LIO \rightarrow METANOL_{(MIXED)} + PLIO_{(MIXED)}$	0,00186667	0	10300	50
69	$PLIO + METANOL + 0\ NAOH \rightarrow METIY-LI_{(MIXED)} + PO_{(MIXED)}$	0,0231108	0	13500	50

70	METHY-LI + PO -> METANOL _(MIXED) + PLIO _(MIXED)	0,00186667	0	10300	50
71	LIO + METANOL + 0 NAOH -> METIL-O _(MIXED) + 1-LI _(MIXED)	0,0533	0	17400	50
72	METIL-O + 1-LI -> LIO _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00221667	0	16200	50
73	LIO + METANOL + 0 NAOH -> METHY-LI _(MIXED) + 1-O _(MIXED)	0,0533	0	17400	50
74	METHY-LI + 1-O -> LIO _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00221667	0	16200	50
75	OOS + METANOL + 0 NAOH -> METIL-S _(MIXED) + OO _(MIXED)	0,0077	0	13500	50
76	METIL-S + OO -> OOS _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00186667	0	10300	50
77	OOS + METANOL + 0 NAOH -> METIL-O _(MIXED) + OS _(MIXED)	0,0154	0	13500	50
78	METIL-O + OS -> OOS _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00186667	0	10300	50
79	OS + METANOL + 0 NAOH -> METIL-O _(MIXED) + 1-S _(MIXED)	0,0533	0	17400	50
80	METIL-O + 1-S -> METANOL _(MIXED) + OS _(MIXED)	0,00221667	0	16200	50
81	OS + METANOL + 0 NAOH -> METIL-S _(MIXED) + 1-O _(MIXED)	0,0533	0	17400	50
82	METIL-S + 1-O -> METANOL _(MIXED) + OS _(MIXED)	0,00221667	0	16200	50
83	OOLI + METANOL + 0 NAOH -> METHY-LI _(MIXED) + OO _(MIXED)	0,0077	0	13500	50
84	METHY-LI + OO -> OOLI _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00186667	0	10300	50

	METANOL _(MIXED)				
85	OOLI + METANOL + 0 NAOH -> METIL-O _(MIXED) + LIO _(MIXED)	0,0154	0	13500	50
86	METIL-O + LIO -> OOLI _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00186667	0	10300	50
87	MPLI + METANOL + 0 NAOH -> METHY-LI _(MIXED) + MP _(MIXED)	0,0077	0	13500	50
88	METHY-LI + MP -> MPLI _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00186667	0	10300	50
89	MPLI + METANOL + 0 NAOH -> METIL-M _(MIXED) + PLI _(MIXED)	0,00877	0	13500	50
90	METIL-M + PLI -> MPLI _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00186667	0	10300	50
91	MPLI + METANOL + 0 NAOH -> METIL-P _(MIXED) + MLI _(MIXED)	0,0077	0	13500	50
92	METIL-P + MLI -> MPLI _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00186667	0	10300	50
93	MLI + METANOL + 0 NAOH -> METIL-M _(MIXED) + 1-LI _(MIXED)	0,0533	0	17400	50
94	METIL-M + 1-LI -> MLI _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00221667	0	16200	50
95	MLI + METANOL + 0 NAOH -> METHY-LI _(MIXED) + 1-M _(MIXED)	0,0533	0	17400	50
96	METHY-LI + 1-M -> MLI _(MIXED) + METANOL _(MIXED)	0,00221667	0	16200	50