UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA POLITÉCNICA

FÁBIO ROSA

Análise de Eco-eficiência da substituição de coalescente na formulação de tinta decorativa

SÃO PAULO

2019

FÁBIO ROSA

Análise de Eco-eficiência da substituição de coalescente na formulação de tinta decorativa

Versão corrigida

(Versão original encontra-se na unidade que aloja o Programa de Pós-Graduação)

Dissertação apresentada à Escola Politécnica da Universidade de São Paulo para a obtenção do título de mestre em ciências

Área de concentração: Engenharia Química

Orientador: Prof. Dr. Luiz Alexandre Kulay

SÃO PAULO

2019

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

Este exemplar foi revisado e corrigido em relação à versão original, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo,_____de_____de _____

Assinatura do autor: _____

Assinatura do orientador: _____

Catalogação-na-publicação

Rosa, Fábio
Análise de Eco-eficiência da substituição de coalescente na formulação de tinta decorativa / F. Rosa -- versão corr. -- São Paulo, 2019.
105 p.

Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Química.

1.Eco-eficiência 2.Avaliação do Ciclo de Vida (ACV) 3.Coalescente 4.Desempenho Ambiental 5.Projeto para o Meio Ambiente I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Química II.t.

A Deus, Princípio e Fim de todas as coisas,

aos meus pais, por quem serei para sempre grato,

à minha esposa,

aos meus filhos e

ao meu irmão.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus Pai, ao Filho Jesus, ao Espírito Santo e a Maria Santíssima na qual me sustentam todos os dias.

Agradeço à minha esposa Claudia, aos meus filhos Gabriel e Gustavo, aos meus pais Ademar e Julia e ao meu irmão Marcos, verdadeiros tesouros em minha vida, que me apoiaram e de alguma forma contribuíram para a chegada até aqui.

De modo particular, minha imensurável gratidão e admiração pelo meu orientador Prof. Luiz Kulay, pelos riquíssimos ensinamentos, por toda paciência e apoio ao longo desses últimos anos.

Agradeço aos meus colegas do Grupo de Prevenção da Poluição (GP2), de modo especial o Alex, na qual sempre encontrei a pronta disposição para ajudar e incentivar em meu desenvolvimento. De modo especial agradeço ao Prof. Gil Anderi da Silva, pelas oportunidades de aprendizado que me foram proporcionadas.

Agradeço ao Silmar Barrios pela ajuda e sugestões ao longo do projeto e à Fabiana Marra por todo incentivo e apoio.

Agradeço aos colegas de trabalho da Oxiteno Juliane Pereira, Lorena Brancaglião, Daniel Falchetti e Claudia Gabriela na qual contribuíram na coleta de dados para este trabalho.

RESUMO

ROSA, F. **Análise de Eco-eficiência da substituição de coalescente na formulação de tinta decorativa**. 2019. 105 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2019.

Este trabalho apresenta uma análise de eco-eficiência de diferentes coalescentes afim de indicar uma alternativa com maior eco-eficiência avaliando os efeitos da substituição de coalescente de uso tradicional na formulação de tinta decorativa, por moléculas projetadas segundo princípios de DfE (*Design for Environment*). A análise de eco-eficiência baseou-se no uso da ferramenta de avaliação de desempenho ambiental, a ACV - Avaliação de Ciclo de Vida atribucional, com uma abordagem "do berço ao túmulo" e em uma Unidade Funcional de: "proteger uma superfície de 50 m^2". Os modelos do sistema do produto foram gerados por dados primários e secundários e nenhuma situação multifuncional foi identificada. A comparação levou em consideração os impactos nas formas de mudança climática, depleção fóssil, depleção de água, toxicidade humana e smog. Adicionalmente foi realizada uma análise econômica dos diferentes coalescentes com base nos preços de mercado. O trabalho buscou ainda contribuir com a proposição de práticas industriais mais eficientes do segmento de tintas, que privilegiem o equilíbrio entre o crescimento econômico e a preservação do meio ambiente.

O coalescente alternativo (CA-2) alcançou o melhor resultado de eco-eficiência quando comparado ao coalescente tradicional de mercado (CA-P) e ao coalescente alternativo (CA-1). Os resultados gerados pelo estudo de ACV mostram que o coalescente CA-2 possui desempenho ambiental superior ao coalescente tradicional de mercado em todas as categorias de impacto estudas sendo elas a de Mudança Climáticas (MC), Toxicidade Humana (TH), Depleção de água (DA) e Depleção Fóssil (DF) e Smog, superando uma lacuna deixada pelo coalescente alternativo CA-1 na categoria Smog.

Neste trabalho foi possível então conciliar as funções técnicas do produto com aspectos relacionados à sustentabilidade favorecendo a alternativa de produtos eco-eficientes em mercados maduros, mantendo competitividade e permitindo atingir novos mercados.

Palavras-chave: Coalescente. Avaliação de Ciclo de Vida. Ecoeficiência. Desempenho Ambiental. Projeto para o Meio Ambiente

ABSTRACT

ROSA, F. **Eco-efficiency Analysis of coalescent substitution in decorative paint formulation**. 2019. 105 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2019.

This study presents an eco-efficiency analysis of different coalescent agents in order to indicate a more eco-efficient alternative by evaluating the effects of traditional coalescent agents' replacement in traditional paint formulation by molecules designed according to DfE (Design for Environment) principles. The eco-efficiency analysis was based on the use of the environmental performance assessment tool, the LCA - Attributional Life Cycle Assessment, with approach 'cradle-to-grave' and for a Functional Unit of: "to protect a surface of 50 m^2". The Product system models have been generated by primary and secondary data and no multifunctional situations were identified. The comparison took into account impacts in the form of climate change, human toxicity), water depletion, fossil depletion and smog. Additionally, an economic analysis of the different coalescent agents has been developed based on the market prices. The work also contributed to the proposition of more efficient industrial practices in the coatings segment, which favor the balance between economic growth and the preservation of the environment.

The alternative coalescent (CA-2) achieved the best eco-efficiency result when compared to traditional market coalescent (CA-P) and alternative coalescent (CA-1). The results generated by the LCA study show that the CA-2 coalescent has better environmental performance than the traditional coalescent market in all impact categories studied, being these Climate Change (MC), Human Toxicity (TH), Water Depletion (DA) and Fossil Depletion (DF) and Smog, overcoming a gap left by the alternative coalescent CA-1 in the Smog category.

In the study was possible to reconcile the technical performance of the product with aspects related to sustainability favoring the alternative of eco-efficient products in mature markets, maintaining competitiveness and opportunities in the new markets.

Keywords: Coalescent. Life Cycle Assessment. Eco-efficiency. Environmental performance. Design for Environment

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Evaporação da água nas diferentes etapas de secagem do látex..... 21

Figura 2 - Reação global de formação do 2,2,4-trimetil-1,3-pentanodiol monoisobutirato (CA-P) a partir de isobutiraldeido, e tendo NaOH como catalisador de processo..... 22

Figura 3 - Impressão digital ambiental gerada pelo método BASF de AEE..... 26

Figura 4 - Exemplo de forma de comunicação de resultados de uma AEE: Método BASF..... 27

Figura 5 - Estrutura metodológica da ACV destacando suas etapas operativas e aplicações diretas..... 29

Figura 6 - Elementos obrigatórios e opcionais da etapa de ICV.....33

Figura 7 - Representação simplificada da produção de CA-P 49

Figura 8 - Representação do processo de extração de NaCl e do artifício de simulação criado para descrever adequadamente a corrente que alimenta o estágio de purificação de CA-P..... 52

Figura 9 - Sistema de colunas de destilação e suas pressões de operação.....53

Figura 10 - Esquema da lógica de simulação do estágio de purificação de CA-P para atender às duas condições de análise.....54

Figura 11 - Análise de Sensibilidade para o condensador da 1º coluna destilação.....55

Figura 12 - Análise de sensibilidade do refervedor da 1º coluna de destilação.....56

Figura 13 - Representação esquemática do Sistema de Produto para Tinta CA-P.....59

Figura 14 - Representação esquemática do Sistema de Produto para Tinta CA-1.....60

Figura 15 - Perfil ambiental da tinta padrão (Sistema A) utilizando CA-1 -berço ao túmulo.....70

Figura 16 - Contribuição de impacto nas diferentes etapas do ciclo de vida da tinta Sistema A.....71

Figura 17 - Perfil ambiental da tinta padrão (Sistema A) utilizando CA-1 - berço ao portão da fábrica produtora do coalescente.....72

Figura 18 - Perfil ambiental da tinta padrão (Sistema B) utilizando CA-1 - berço ao túmulo.....78

Figura 19 - Contribuição de impacto nas diferentes etapas do ciclo de vida da tinta para o Sistema B.....78

Figura 20 - Representação esquemática do Sistema de Produto para Tinta CA-P, CA-1 e CA-2.....82

Figura 21- Perfil ambiental da tinta com diferentes coalescentes - berço ao túmulo.....87

Figura 22 - Contribuição de impacto por etapas do ciclo de vida da tinta com diferentes coalescentes.....87

Figura 23 - Impressão digital ambiental dos coalescentes CA-P, CA-1 e CA-2.....93

Figura 24 - Diagrama de avaliação de eco-eficiência coalescentes CA-P, CA-1 e CA-2.....95

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Os tipos básicos de eco-eficiência Produto ou produção primária.....25

Tabela 2 - Síntese de CA-P utilizando diferentes concentrações de NaOH e tempos de batelada.....51

Tabela 3 - Consumo em valor mássico das utilidades quentes em frias do processo.....57

Tabela 4 - Consumos estimados de matéria e energia para produção de CA-P tendo em conta os Sistemas A e B – valores relativizados para 1,0 unidade de CA-P.....62

Tabela 5 - Substituintes potenciais do isobutiraldeido e os pontos de semelhança com essa molécula.....64

Tabela 6 - Consumos de matérias-primas e insumos para produção de 1,0 kg CA-1.....65

Tabela 7 - Oferta Interna de Energia Elétrica para o México (ano base: 2015).....66

Tabela 8 - Oferta Interna de Energia Elétrica para os Estados Unidos (ano base: 2015).....67

Tabela 9 - Composição das Tintas CA-P e CA-1 em termos de seus grupos de constituintes.....68

Tabela 10 - Perfil ambiental para 10,8 kg da tinta para o Sistema A – abordagem berço ao túmulo.....70

Tabela 11 - Principais precursores do impacto para Mudanças Climáticas.....73

Tabela 12 - Principais precursores do impacto para TH.....74

Tabela 13 – Principais precursores do impacto para DF 76

Tabela 14 - Principais precursores do impacto para Smog.....76

Tabela 15 – Perfil ambiental para 10,8 kg da tinta para o Sistema B – abordagem berço ao túmulo.....77

Tabela 16 - Consumos de matérias-primas e insumos para produção de 1,0 kg CA-2...84

Tabela 17 - Perfil ambiental para 10,8 kg de diferentes tintas – abordagem berço ao túmulo.....86

Tabela 18 – Principais precursores do impacto para Mudanças Climáticas.....89

Tabela 19 - Principais precursores do impacto para TH.....89

Tabela 20 – Principais precursores do impacto para DF 90

Tabela 21 - Principais precursores do impacto para Smog.....91

Tabela 22 - Indicadores de preços dos coalescentes CA-P, CA-1 e CA-2.....92

Tabela 23 - Normalização dos indicadores de preços dos coalescentes CA-P, CA-1 e CA-2.....92

Tabela 24 - Indicadores ambientais dos coalescentes CA-P, CA-1 e CA-2.....93

Tabela 25 - Análise de eco-eficiência dos coalescentes CA-P, CA-1 e CA-2.....94

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas
ACV	Avaliação de Ciclo de Vida
HT	Human Toxicity
CFC	Clorofluorocarboneto
DfE	Design for Environment
EPA	Environmental Protection Agency
FR	Fluxo de Referência
ICV	Inventário de Ciclo de Vida
IEA	International Energy Agency
RStoic	Stoichiometric reactor
TRACI	*Tool for Reduction and Assessment of Chemicals and Other Environmental Impacts*
Tg	Temperatura de transição vítrea
VOC	*Volatile Organic Compound* (Compostos orgânicos voláteis)
WBCSD	*World Business Council for Sustainable Development* (Conselho Empresarial Mundial para o Desenvolvimento Sustentável)
AEE	Avaliação de Eco-eficiência
CEBDS	Conselho Empresarial Brasileiro para o Desenvolvimento Sustentável

SUMÁRIO

SUMÁRIO 13

1. INTRODUÇÃO 16

2. OBJETIVO 19

3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA 20

3.1. Agentes Coalescentes 20

3.1.1. Conceitos e propriedades 20

3.1.2. Usos e Aplicações 21

3.1.3. Tecnologias de Produção. 22

3.2. Design for Environment (DfE) 23

3.3. Avaliação de Eco-eficiência 24

3.4. Avaliação de Ciclo de Vida (ACV) 27

3.4.1. Conceito 27

3.4.2. Usos e aplicações 28

3.4.3. Aspectos metodológicos 29

3.4.3.1. Definição de Objetivo e Escopo 30

3.4.3.2. Análise de Inventário 32

3.4.3.3 Avaliação de Impactos 32

3.4.3.3.1. Seleção de Categorias de Impacto 34

3.4.3.3.2. Categorias de impacto 34

3.4.3.3.3. Classificação 36

3.4.3.3.4. Caracterização 36

3.4.3.3.5. Normalização 37

3.4.3.3.6. Agrupamento 38

3.4.3.3.7. Ponderação 39

3.4.3.4. Interpretação 40

3.5. Trabalhos de ACV relacionados com revestimentos 41

4. MÉTODO DE TRABALHO 43

4.1. Revisão de literatura 43

4.2. Construção de Modelos 44

4.3. Determinação dos desempenhos ambiental e econômico 44

4.3.1. Avaliação de desempenho ambiental 44

4.3.2. Análise econômica 45

4.4. Análise de Eco-eficiência 46

5. BREVE DESCRIÇÃO DOS PROCESSOS DE SÍNTESE DE CA-P E CA-1 47

6. MODELAGEM DOS PROCESSOS PRODUTIVOS DE CA-P E CA 1.....48

6.1. Modelo do Processo de produção de CA-P 48

6.1.1. Estágio 1: Reação 49

6.1.2. Estágio 2: Separação de resíduos..... 51

6.1.3. Purificação de CA-P 52

6.1.4. Estimativas de consumo de utilidades 55

6.2. Modelo do Processo de produção de CA-1 57

7. MODELAGEM DO CICLO DE VIDA..... 58

7.1.Definição de Objetivo e Escopo 58

7.1.1 Definição de Objetivos 58

7.1.2 Definição de Escopo.....58

7.2. Análise de Inventário..... 61

7.2.1. ICV da produção de CA-P..... 62

7.2.2. ICV da produção de CA-1 65

7.2.3. ICV da geração de eletricidade..... 66

7.2.4. ICV da produção de vapor de síntese de CA-1 67

7.2.5 ICV da produção das tintas CA-P e CA-1 67

7.2.6. ICV da aplicação das tintas 68

8. RESULTADOS E DISCUSSÃO 69

8.1. Avaliação de Impacto Ambiental – Sistema A..... 69

8.1.1. Mudanças Climáticas..... 72

8.1.2. Toxicidade Humana..... 74

8.1.3. Depleção de Água..... 75

8.1.4. Depleção Fóssil..... 75

8.1.5. Smog 76

8.2. Avaliação de Impacto Ambiental – Sistema B 77

9. PROPOSTA DE COALESCENTE ALTERNATIVO..... 80

9.1. Desenvolvimento do coalescente CA-2..... 80

9.2. Modelo do processo de produção de CA-2 80

9.3. Breve descrição do processo de síntese de CA-2 80

9.4. Modelo do Ciclo de Vida para o coalescente CA-2 81

9.4.1. Definição de Objetivo e Escopo 81

9.4.1.1. Definição do Objetivo.....81

9.4.1.2. Definição de Escopo.....81

9.4.2. Análise de Inventário 83
9.4.2.1. ICV da produção de CA-2 83
9.4.2.2 ICVs da geração de eletricidade e vapor para síntese de CA-2 85
9.4.2.3. ICVs da produção e da aplicação de tinta com coalescente CA-2 85

10. ANÁLISE DE RESULTADOS 86
10.1. Desempenho Ambiental do CA-2 86
10.2. Avaliação Econômico do CA-2 91
10.3. Avaliação de Eco-eficiência 92

11. CONCLUSÕES 96

12. TRABALHOS FUTUROS 97

13. REFERÊNCIAS 98

APÊNDICES 102

1. INTRODUÇÃO

Os desenvolvimentos tecnológicos no campo das tintas decorativas comerciais têm sido continuamente aperfeiçoados, não apenas no que se refere as suas propriedades aplicações e formulações, mas também no tocante a melhoria do desempenho ambiental do produto (OLIVEIRA et al.; 2014).

As tintas decorativas a base de água contém látices, que são polímeros que necessitam de um teor de coalescente para formar filmes contínuos e homogêneos em diversas condições de temperatura.

Atualmente existe uma necessidade crescente de se obter coalescentes que atendam à legislação ambiental, em particular, quanto ao controle da emissão de compostos orgânicos voláteis (VOC) para a atmosfera. Isso se justifica pelo fato de os coalescentes que registram baixa emissão de VOC possuirem, ao mesmo tempo, reatividade fotoquímica desprezível ou negligenciável (EPA, 2012).

Ao longo das últimas cinco décadas o consumo de recursos naturais tem sido objeto de questionamentos frequentes que ocorrem sob a motivação de prover, e garantir, meios para que necessidades de gerações futuras sejam supridas de forma equivalente ao que ocorre com a geração atual. Isto conduz a adoção de um modelo de desenvolvimento harmonizado com as capacidades da Biosfera de assimilar a depleções de recursos e a geração de rejeitos que sistemas antrópicos lhe irão impor para sustentar aquelas gerações.

Esse conceito foi apresentado no relatório *Our common future*, elaborado pela Comissão Mundial sobre o Meio Ambiente e o Desenvolvimento em 1987, e disseminado por intermédio de conferências (casos da RIO-92, e das que a sucederam), protocolos de envergadura internacional (Montreal e Kyoto), e políticas de ação de âmbito coletivista (como os Objetivos de Desenvolvimento do Milênio, e mais recentemente, os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável) (SACHS, 2012; RAKSHIT, 2015). Para poder avaliar o desempenho ambiental de forma consistente e representativa, é fundamental fazer-se uso de uma abordagem de foco sistêmico. Esta especificidade, juntamente com o caráter quantitativo, credenciam a Avaliação de Ciclo de Vida (ACV) como técnica adequada e consistente para análises daquela natureza.

Em termos conceituais, a ACV avalia impactos sobre o entorno e o ser humano, que decorram do atendimento de necessidades desse último. Para tanto, a técnica avalia consumos e emissões associados ao ciclo de vida de produtos e serviços usados para efeito de cumprimento daquelas expectativas.

Por extensão, o ciclo de vida será definido como o conjunto de intervenções antrópicas constituído para o atendimento da referida função, desde a extração dos recursos naturais necessários a produção do bem (ou realização do serviço), até sua disposição final no ambiente, passando por todos os elos da cadeia de manufatura, por seu uso *per se*, e tendo em conta atividades de transporte que liguem tais estágios (SILVA; KULAY, 2006).

O principal benefício da utilização da ACV reside na possibilidade de incorporar a variável ambiental em processos gerenciais de tomada de decisão, nos níveis de gestão, tático e estratégico, a partir dos resultados obtidos de sua aplicação (BAUMANN; TILLMAN, 2004). Essa forma de abordagem, comum em muitas partes do mundo, é também bastante difundida no Brasil. Os achados obtidos pela comunidade científica nacional referendam esse propósito ao fazer avaliações com tais características para processos industriais, em que a ACV é aplicada com enfoque parcial, do 'berço-ao-portão da fábrica' (LIMA, 2007; CHERUBINI; RIBEIRO, 2015), e pleno, do 'berço-ao-túmulo' (SOUZA; BARBASTEFANO; TEIXEIRA, 2016). Nesses âmbitos, são aplicações usuais da ACV a: identificação de oportunidades para melhoria de desempenho ambiental de um produto, ou serviço; comparação entre os desempenhos ambientais de produtos que cumpram com a mesma função; concessão de rótulos ou selos ambientais; ou mesmo, comunicação, e formação do valor ambiental.

Por se tratar de uma técnica de diagnóstico a ACV serve também para projetar novos produtos, ou tornar os já existentes mais ambientalmente efetivos, a partir conceitos tais como Produção mais Limpa (P + L), logística reversa, Ecologia Industrial e Economia Circular. Sob enfoque, a ACV tem muito a contribuir para o desenvolvimento do setor global de tintas, em especial, no âmbito daquelas de uso imobiliário. A adoção de um enfoque como esse permitiria identificar gargalos ambientais na formulação, ou antes, nas moléculas que a constituem, ainda na fase de concepção do produto.

A partir desses achados seriam tomadas medidas para mitigação, minimização, ou até, de eliminação de impactos, previamente a instalação de seu ciclo de manufatura. No entanto, para que essa lógica funcione, é indispensável que a análise ambiental ocorra em paralelo a uma análise econômica. Essa perspectiva pode também ser suprida pelos indicadores de desempenho gerados pela ACV, que ao serem compatibilizados com congêneres de fundo financeiro gerariam um diagnóstico da ecoeficiência das ações implementadas.

2. OBJETIVO

Tendo em vista o contexto apresentado no capítulo anterior, este estudo tem por objetivo propor uma alternativa mais Ecoeficiente de tinta decorativa avaliando os efeitos da substituição do coalescente de uso tradicional em sua formulação, por moléculas projetadas segundo princípios de Produção mais Limpa (P + L).

De maneira complementar, mas nem por isso menos importante, o estudo busca ainda contribuir com a proposição de práticas industriais mais eficientes do segmento de tintas, que privilegiem o equilíbrio entre o crescimento econômico e a preservação do meio ambiente.

Essa iniciativa se desenvolve no âmbito da redução dos impactos ambientais associados aos usos a que o bem de consumo se propõe, e para tanto, faz uso de Avaliação de Ciclo de Vida (ACV), uma técnica de gestão ambiental que está voltada à elaboração de diagnósticos sistêmicos e quantitativos do desempenho ambiental de produtos, processos e serviços gerados pela Tecnosfera.

3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1. Agentes Coalescentes

3.1.1. Conceitos e propriedades

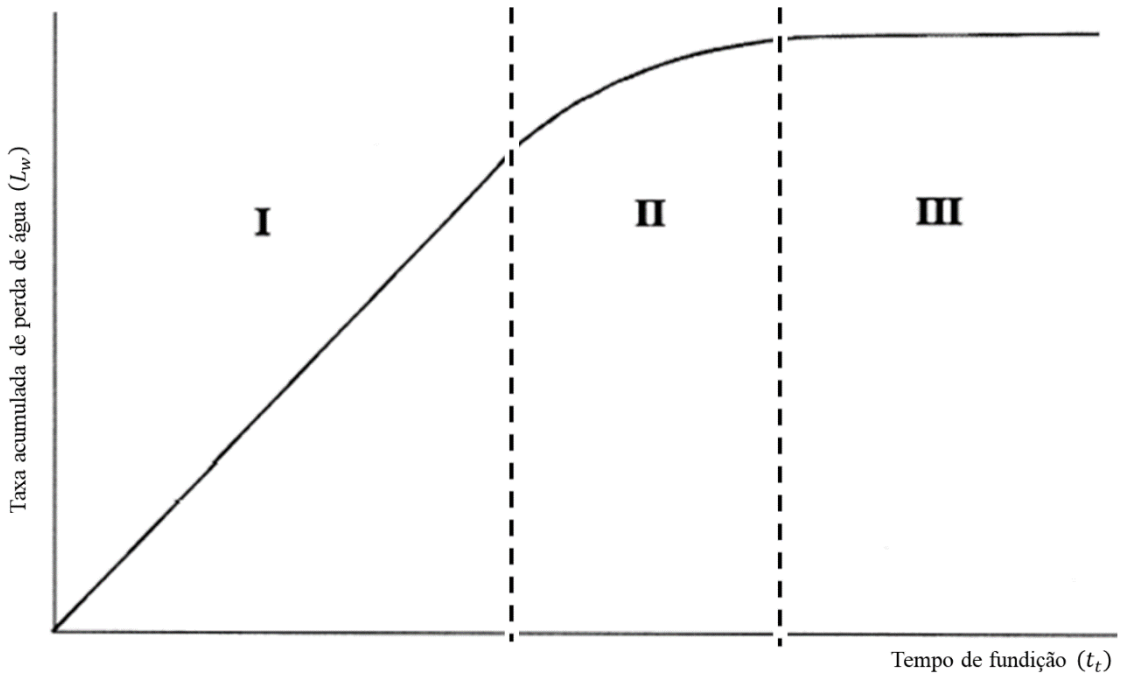
Uma tinta decorativa pode ser definida como uma composição líquida, geralmente viscosa e de boa capacidade de dispersão de partículas sólidas. Sua secagem (ou cura), proporciona a formação de um filme aderente ao substrato (superfície sobre a qual é aplicada), com o objetivo de proteger e decorar o ambiente (FAZENDA et al., 2009). Atualmente, boa parte dos projetos arquitetônicos utiliza tintas decorativas à base de água, em substituição às fabricadas no passado, que na quase totalidade continham solventes orgânicos.

As tintas decorativas a base de água contém látices; ou seja, polímeros produzidos a partir de polimerização em emulsão, que requerem a presença de agentes coalescentes para formar filmes. Dessa associação derivam revestimentos com brilho e propriedades mecânicas adequadas para variadas aplicações. Portanto, os agentes coalescentes (ou tão somente, coalescentes) correspondem a solventes, cujas propriedades físico-químicas são capazes de plastificar a fase polimérica presente na tinta à base de água, reduzindo sua temperatura de transição vítrea (T_g). A Tg refere-se a temperatura a partir da qual um polímero passa do estado vítreo para um estado “maleável”, sem ocorrência de mudança estrutural. Abaixo desse patamar o material não dispõe de energia interna na suficiente para permitir deslocamento de uma cadeia com relação a outra por mudanças conformacionais. A diminuição da Tg leva à formação de filmes mais homogêneos e contínuos, nos casos em que o produto será exposto a condições distintas de temperatura e umidade (DEHAN et al., 2017). Os coalescentes precisam ser estáveis na presença de água, compatíveis com os ativos que perfazem a formulação da tinta, e não podem desestabilizar as partículas de polímero contidas no meio (SANTOS et al, 2018). Eles devem ser também voláteis o suficiente para vaporizarem durante a secagem dos filmes após a exalação da água. Os coalescentes devem ter ponto de ebulição elevado, (em geral, > 140 °C) para suportar de forma adequada e eficiente o processo de formação de filme (TAYLOR et al., 2018). O 2,2,4-trimetil-1,3-pentanodiol monoisobutirato constitui-se em um coalescente que reúne esses predicados de maneira equilibrada, sendo, por isso mesmo, usado com regularidade pelo segmento de tintas (SCHROEDER et al., 2011).

3.1.2. Usos e aplicações

As tintas decorativas à base de água necessitam ter boa formação de filme para proporcionar propriedades adequadas à aplicação. O mecanismo de formação de filme de látex pode ser descrito a partir da sucessão de três etapas (STEWARD et al., 2000). A Figura 1 demonstra a evaporação da água nas diferentes etapas de secagem do látex.

Figura 1. Evaporação da água nas diferentes etapas de secagem do látex



Fonte: Adaptado de Steward et al. (2000).

Na primeira etapa ocorre a evaporação da água e o empacotamento das partículas. O filme formado neste estágio é quebradiço. O estágio II se desenvolve a uma temperatura de secagem maior que a TMFF (temperatura mínima de formação de filme) do polímero. Neste estágio as partículas se deformam gerando um filme contínuo e transparente.

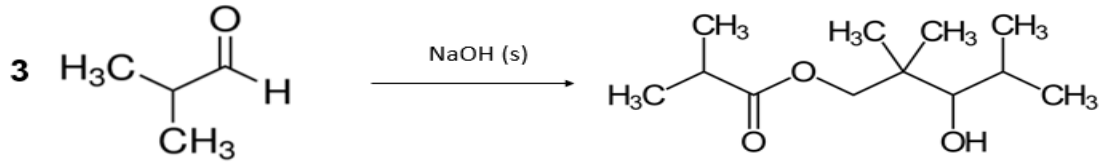
Por fim, no estágio III as cadeias poliméricas adquirem mobilidade suficiente para migrar de uma partícula a outra, formando um filme coalescido, nivelado, ou sem qualquer domínio de partículas. Para que isso ocorra, a etapa deve progredir em temperatura superior à T_g do polímero. A aparência final do filme está condicionada ao tipo e a quantidade de coalescente (STEWARD et al., 2000).

O coalescente é utilizado em combinação com o látex para auxiliar na formação de filme. A eficiência do coalescente irá depender da afinidade que apresenta com o látex. Ao interagirem com cadeias poliméricas presentes nas partículas de látex, suas moléculas aumentam o grau de mobilidade daquelas partículas favorecendo assim suas deformação e empacotamento. Disso decorre a formação de filmes de látex sem lacunas (buracos), contínuos e transparentes. A interdifusão de cadeias poliméricas entre partículas, assim como o seu entrelaçamento influem na resistência mecânica do filme (STEWARD et al., 2000).

3.1.3. Tecnologias de produção

A tecnologia de produção do coalescente tradicional de mercado, o 2,2,4-trimetil-1,3-pentanodiol monoisobutirato, que doravante passará a ser denominado de 'CA-P' (Coalescente Padrão), tem no isobutiraldeido sua principal fonte de matéria-prima. Além disso, a transformação é catalisada por hidróxido de sódio (NaOH) em estado sólido (LI et al., 2014), assim como aparece indicado a seguir na Figura 2.

Figura 2. Reação global de formação do 2,2,4-trimetil-1,3-pentanodiol monoisobutirato (CA-P) a partir de isobutiraldeido, e tendo NaOH como catalisador de processo



Fonte: Li et al. (2014).

Os autores destacam, porém, que reações paralelas que invariavelmente ocorrem no meio podem formar subprodutos como: (i) 3-hidroxi-2,2,4-trimetilpentanal; (ii) 2,2,4-Trimetil-1,3-pentanodiol; (iii) ácido isobutírico; e (iv) 2,2,4-trimetil-1,3- pentanodiol diisobutirato. O reator trabalha a cerca de 60ºC e se utiliza de um condensador com vistas a manter constante sua temperatura interna, devido ao caráter exotérmico das reações. A transformação é interrompida quando o NaOH é neutralizado por meio da adição de ácido clorídrico (HCl). O sal formado dessa reação é separado por filtração, enquanto o produto líquido – constituído pelo CA-P, e os subprodutos (i) a (iv) – segue para um sistema de destilação a fim de purificar o primeiro. A separação entre o produto de interesse (CA-P) e os demais gerados em sua síntese ocorre em duas etapas, sempre por meio de destilação.

Na primeira etapa, realizada por meio de destilação atmosférica (P = 1,0 atm), há separação entre o isobutiraldeido e o ácido isobutírico. Na segunda etapa, quando a torre opera sob vácuo, ocorre então a separação entre o CA-P e 2,2,4-trimetil-1,3- pentanodiol diisobutirato, também conhecido no jargão do segmento de tintas de por 'TXIB'.

3.2. Design for Environment (DfE)

Design for Environment (DfE) é uma prática de uso regular durante a concepção e o desenvolvimento de um produto, com o objetivo de reduzir efeitos adversos que por ele possam ser criados sobre as dimensões econômica, ambiental e social, ao longo de todo seu ciclo de vida (CHARTER; TISCHNER, 2001; FIKSEL, 1997). O DfE é visto também por alguns autores como uma técnica de projeto de produto em que a variável ambiental tem papel equivalente àquelas comumente usadas no desenvolvimento do bem (como qualidade, desempenho e custo), com o objetivo de reduzir o consumo de recursos naturais e emissões, bem como elevar a eficiência energética e a taxa de reciclagem de materiais que a eles estiverem associadas (FIKSEL, 1996). Assim, o DfE se diferencia de outras abordagens ambientais por se constituir em uma prática que analisa todas as fases do ciclo de desenvolvimento do produto com o propósito particular de reduzir, minimizar, ou até, sempre que possível, eliminar impactos ambientais (CHARTER; TISCHNER, 2001; FIKSEL, 1997; ZHANG et al., 2011; CHIANG; ROY, 2012). Logo, enquanto as práticas tradicionais de desenvolvimento de produto têm por foco principal o desempenho técnico e produtividade, o DfE amplia esse domínio de ação para também considerar, sempre de forma relevante, impactos sobre o ambiente (GIANNETTI; ALMEIDA, 2006). Sob esta perspectiva, torna-se possível então unir as funções de um produto a aspectos essenciais da Sustentabilidade, favorecendo assim a disseminação de produtos eco-eficientes sobretudo em mercados considerados maduros (KARLSSON; LUTTROPP, 2006). Para Vercalsteren (2001) as empresas deveriam ver DfE como meio para preservação não apenas do ambiente, mas também de estímulo para a competitividade, fomento de vantagens financeiras, e melhoria de sua imagem junto ao mercado e, por extensão, à sociedade. A academia mostra interesse por DfE; tanto isso é assim, que o número de publicações envolvendo essa filosofia vem aumentando. No entanto, uma constatação feita por Lindahl (2006) se confirma nos tempos atuais: as propostas científicas que tratam de DfE ocorrem em termos conceituais, sendo ainda muito pequena a quantidade de registros de estudos em que o conceito é aplicado a ciclos de manufatura.

3.3. Avaliação de Eco-eficiência

O conceito de Eco-eficiência passou a ser incorporado no ambiente empresarial de modo a impulsionar as empresas a serem mais inovadoras e competitivas, mas sempre, com responsabilidade sobre o meio ambiente (SALING et. al., 2002). O WBCSD (2000) define eco-eficiência como a criação de mais valor ao se fornecer produtos e serviços a preços competitivos que satisfaçam as necessidades humanas, trazendo qualidade de vida, reduzindo consumo de recursos e emissões ao longo do ciclo de vida do bem. Um dos focos essenciais da Eco-eficiência é reduzir a pressão sobre a capacidade de suporte do planeta; ou seja, sobre seu patrimônio de recursos. Outra definição bastante adotada para esse conceito, inclusive pelo Conselho Empresarial Brasileiro para o Desenvolvimento Sustentável – CEBDS é a de que a Eco-eficiência é um dos componentes essenciais para o atingimento do equilíbrio dinâmico da Sustentabilidade. Assim, seus elementos devem estar inseridos de maneira transversal em todas as etapas do processo produtivo (CEBDS, 1999).

Saling et al. (2002) apontam que a AEE pode subsidiar processos gerenciais de tomada de decisão estratégica, ações de marketing voltadas (ou mesmo, que envolvam) o público consumidor, bem como, fomentar atividades de pesquisa e desenvolvimento. Piotto (2003) relaciona algumas das dimensões da eco-eficiência a serem observadas para que as empresas possam fornecer produtos, ou serviços, nos quais valores ambientais tenham sido incorporados. São elas:

- Reduzir a intensidade do consumo de materiais em produtos e serviços;
- Reduzir a intensidade do consumo de energia em produtos e serviços;
- Reduzir a dispersão de compostos tóxicos;
- Promover a reciclagem;
- Maximizar o uso de recursos renováveis;
- Estender a durabilidade dos produtos; e
- Aumentar a intensidade do uso de produtos e serviços

Levando em conta critérios e aspectos como as relações direta e inversa entre os desempenhos econômico e ambiental; e a priorização de, ao menos, uma dessas vertentes, na forma de redução de custos de produção, ou de melhoria ambiental, Huppes e Ishikawa (2005) catalogaram quatro tipos básicos de Eco-eficiência. Estes estão descritos a seguir na Tabela 1.

Tabela 1. Os tipos básicos de eco-eficiência Produto ou produção primária

	Produto ou produção primária	Melhoria ambiental primária
Econômico dividido por ambiental	Valor de produção por impacto ambiental (*produtividade ambiental*)	Custo por melhoria ambiental (*custo de melhoria ambiental*)
Ambiental dividido por econômico	Impacto ambiental por valor de produção (*intensidade ambiental*)	Melhoria ambiental por custo (*eficiência ambiental*)

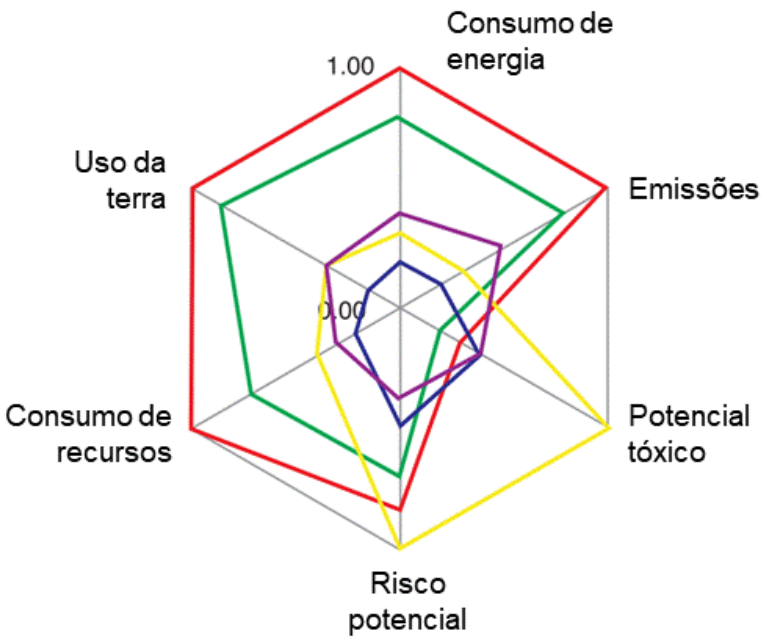
Fonte: Huppes e Ishikawa (2005)

Para transcrever essa correlação de maneira adequada foram criados métodos de quantificação para esses indicadores, envolvendo diferentes organizações e atendendo a demandas específicas dessas empresas (PIOTTO, 2003). Dessa forma, tornou-se possível mensurar impactos ambientais e custos econômicos de produtos semelhantes a partir de diferentes abordagens. No entanto, a diversidade de métodos de verificação ainda tornava árida e, nem sempre precisa, a comparação de indicadores de AEE.

Para ajudar nesse processo o *International Organization for Sandardization* – ISO decidiu elaborar a norma ISO 14045 (ISO, 2014). Esse procedimento buscou padronizar as AEE por meio de orientações como: (i) estabelecimento de uma terminologia clara; (ii) criação de estrutura metodológica comum; (iii) orientações práticas quanto ao uso da AEE para diferentes sistemas produtivos; (iv) orientação para interpretação dos resultados; e (v) incentivo a comunicação clara e inequívoca (ABNT, 2014). Em função da abordagem sistêmica da ACV, de grande utilidade para uma análise abrangente de melhorias, alguns métodos de AEE foram criados tendo como filosofia a lógica de ciclo de vida.

O método BASF (UHLMAN; SALING, 2010) é um dos pioneiros no campo da AEE. Este procedimento avalia de forma comparativa impactos ambientais e custos gerados no transcorrer dos ciclos de vida de (dois ou mais) produtos que exerçam a mesma função. No contexto ambiental, há a divisão dos indicadores obtidos na ACV em seis categorias: Uso da terra, Consumo de recursos, Risco potencial, Emissões, Potencial tóxico, e Consumo energético. A normalização do desempenho de cada produto em tais dimensões gera uma "impressão digital ambiental" (*Environmental 'fingerprint'*). A Figura 3 ilustra uma comparação por AEE de cinco produtos realizada a partir do Método BASF. Essa forma de apresentação tem por principal utilidade avaliar ganhos e perdas decorrentes da adoção das diferentes alternativas.

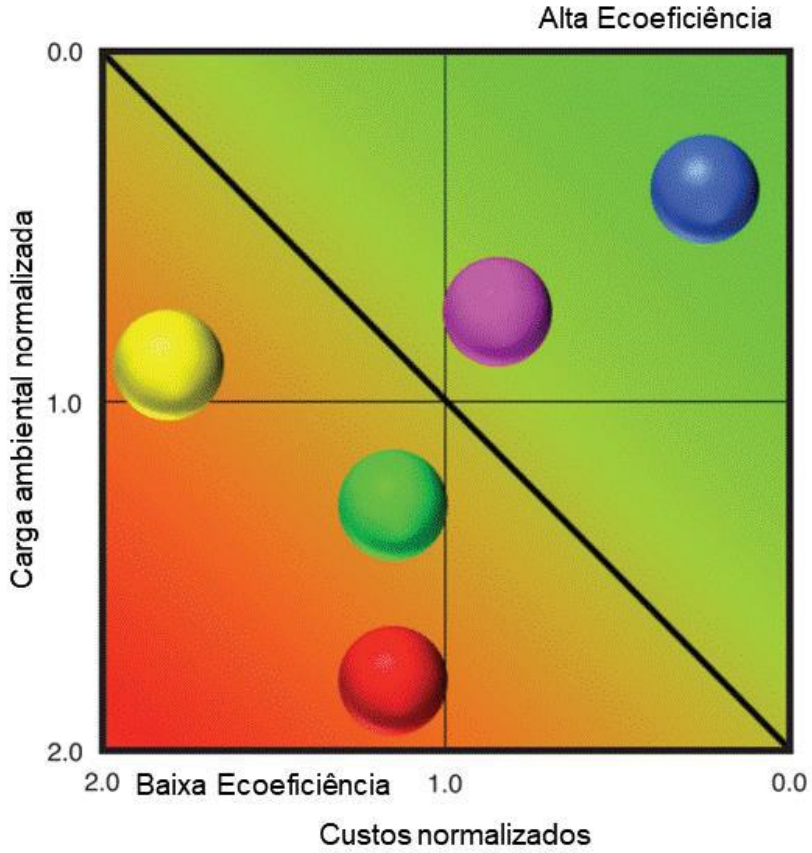
Figura 3. Impressão digital ambiental gerada pelo método BASF de AEE



Fonte: adaptado de Uhlman e Saling (2010).

A normalização dos resultados dos efeitos ambientais gerados por um produto e a ponderação desses valores origina a Pontuação Única. O valor normalizado e ponderado é correlacionado com o correspondente indicador de valor econômico, que foi também normalizado (Figura 4). As alternativas consideradas mais Eco-eficientes ocupam a área superior direita do gráfico, ao passo que aquela menos efetivas se localizarão no lugar geométrico diagonal inferior às anteriores.

Figura 4. Exemplo de forma de comunicação de resultados de uma AEE: Método BASF



Fonte: adaptado de Uhlman e Saling (2010).

3.4. Avaliação de Ciclo de Vida (ACV)

3.4.1. Conceito

O Ciclo de Vida consiste do conjunto de ações antrópicas – isto é, realizadas pelo homem – necessárias para que determinado produto ou serviço possa atender as funções para as quais foi concebido. O arranjo se inicia na interface com o meio ambiente, a partir de atividades de extração dos recursos naturais, e se estende até o Sistema de disposição final do produto, para onde este se destina tão logo não tenha mais condições de cumprir com aqueles propósitos. Ligando esses extremos, estão encadeados os processos que perfazem a cadeia de manufatura do produto, seu uso *per se*, e ações de transporte que transcorrem tanto inter (como intra) estágios do ciclo de vida (SILVA, 2010).

Nesse contexto, Avaliação do Ciclo de Vida (ACV) é uma técnica de diagnóstico a partir da qual torna-se possível quantificar impactos ambientais gerados ao longo de um ciclo de vida (SILVA, 2012). Para tanto, a ACV totaliza consumos de recursos, e emissões de rejeitos materiais e energéticos que são absorvidos pelo ciclo de vida junto ao entorno, ou para estes emanados desde aquela mesma fonte. Essa abordagem, de caráter sistêmico por essência, fornece subsídios suficientes para que a variável ambiental passe a integra o elenco de indicadores usados em processos gerenciais de tomada de decisão.

Denomina-se por aspectos ambientais, às correntes (materiais e energéticas) que circulam entre o ciclo de vida e o ambiente. Dentro dessa lógica, entende-se por impacto ambiental qualquer alteração provocada sobre o entorno (ou Biosfera), em consequência de consumos, e descartes, de aspectos ambientais proporcionados pelo ciclo de vida (ou Tecnosfera) (ABNT, 2009).

3.4.2. Usos e aplicações

Tendo em conta seu caráter diagnóstico, sempre voltado ao viés ambiental, Silva e Kulay (2006) apontam como sendo algumas das aplicações mais relevantes da ACV: (i) identificação de oportunidades de melhoria; (ii) comparação entre produtos que cumpram com uma mesma função; (iii) concessão de rótulos ou selos; e (iv) formação de valores e comunicação ambiental.

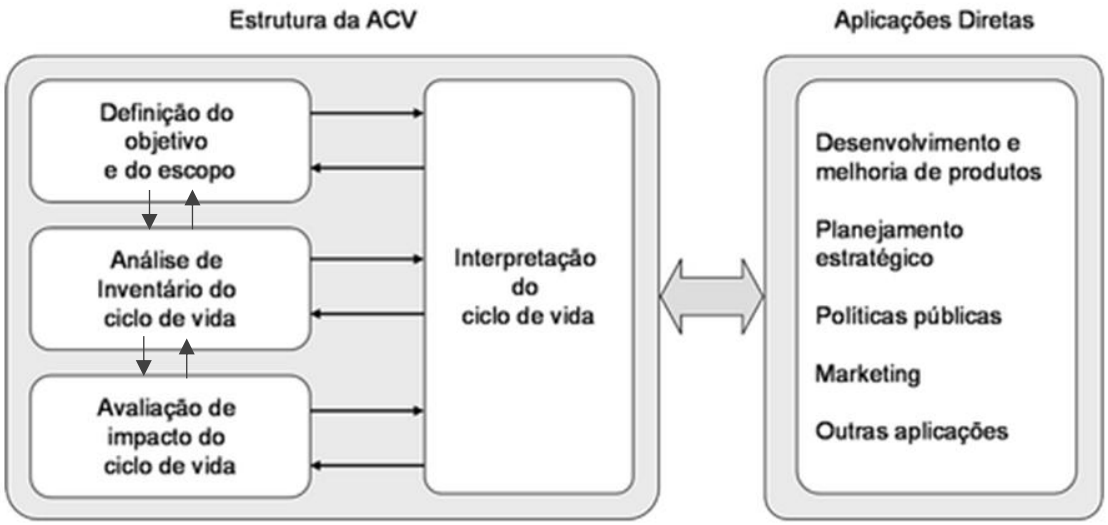
Além desses usos, que na sua plenitude, buscam verificar o desempenho ambiental de sistemas antrópicos existentes, a ACV pode ainda ser usado em caráter antecipatório (ou proativo), com vistas a detectar impactos durante as fases de concepção e projeto de novos produtos (ou serviços), bem como, em ações voltadas à remodelação de conjuntos existentes. A despeito do uso a que se destine, a ACV não pode, porém, ser entendida como um mecanismo de proposição de soluções para problemas ambientais. Antes disso, sua atribuição maior compreende investigar o grau de magnitude dos distúrbios causados pela Tecnosfera sobre a Biosfera, bem como, das implicações que estratégias concebidas para os reduzir (minimizar, ou mesmo, extinguir) podem provocar sobre no meio natural.

3.4.3. Aspectos Metodológicos

A metodologia de execução de um estudo de ACV é padronizada pela Associação Brasileira de Normas Técnicas (ABNT), que organizou a tradução das Normas ISO 14040 e 14044, publicadas em 2009 (SILVA, 2012). Em termos de estrutura, são quatro etapas de um estudo de ACV: (i) Definição de Objetivo e Escopo; (ii) Análise de Inventário; (iii) Avaliação de Impactos; e (iv) Interpretação.

Tal como aparece indicado na Figura 5, essas etapas estão interconectadas de modo interativo, permitindo que readequações de premissas e condutas de planejamento do estudo (Definição de Objetivos e Escopo), práticas relativas à sua condução (Análise de Inventário e Avaliação de Impactos), e aferição (Interpretação) ocorram, motivadas por ajustes (ou ações) realizados em outras etapas (RIBEIRO, 2009).

Figura 5. Estrutura metodológica da ACV destacando suas etapas operativas e aplicações diretas



Fonte: Adaptado de ABNT NBR ISO 14040 (2009)

Será realizado a seguir um breve relato dos elementos constituintes de cada etapa da técnica de ACV para apresentar e descrever alguns dos elementos associados à técnica, com o intuito de melhorar o entendimento do leitor quanto às análises realizadas até esta etapa do projeto.

3.4.3.1. Definição de Objetivo e Escopo

A etapa de Definição de Objetivo se ocupa de descrever de maneira clara sucinta, e inequívoca: (i) os objetivos e propósitos do estudo de ACV; (ii) justificativas para sua realização; e (iii) o público-alvo a que este se destina. De sua parte, a Definição de Escopo concentra-se em estabelecer as premissas, condicionantes e orientações, de caráteres geral e específico, que pautam o estudo (ABNT, 2009; GRIPP, 2014). É objeto desse processo a descrição de elementos tais como:

- *Processo elementar*: menor subdivisão do sistema de produto, para a qual será possível coletar informações e dados capazes de caracterizar aspectos ambientais em termos qualitativos e quantitativos;

- *Sistema de produto:* conjunto de processos elementares, interligados entre si por correntes de matéria e/ou energia, que atendam a uma função definida;

- *Função do sistema de produto:* propósito, ou finalidade do produto ou serviço cujo desempenho ambiental será objeto de avaliação por parte da ACV;

- *Unidade funcional:* parâmetro que descreve em termos quantitativos o exercício da função de um sistema de produto. Em termos aplicados, a Unidade Funcional remete à base de cálculo sobre a qual se apoia a análise empreendida pela ACV. Por conta disso mesmo, trata-se de um valor arbitrário;

- *Fluxo de referência:* quantidade de produto necessária para atender a quantidade de função (ou seja, a Unidade Funcional) que foi definida. Trata-se de outra base de cálculo usada pelo estudo;

- *Fronteiras do sistema de produto:* define a abrangência do estudo, modelando o ciclo de vida em análise. Dessa forma, estabelece os limites, e a interface entre a Biosfera e o sistema de produto, bem como deste último com outros sistemas antrópicos que constituem a Troposfera. As fronteiras de um sistema de produto podem ser elementos físicos ou virtuais. É fundamental, porém, que estas sejam capazes de delimitar de forma clara e inequívoca os meios desde (e para) onde devem circular correntes de matéria e energia que estão relacionadas ao sistema em análise;

- *Tratamento de situações de multifuncionalidade:* na maior parte dos casos, um estágio do Sistema de Produto é capaz de gerar coprodutos. Esse quadro define as chamadas situações de multifuncionalidade. O tratamento de tais ocorrências visa distribuir aspectos ambientais gerados ao longo do sistema (inclusive os que ocorrem no estágio multifuncional) entre os coprodutos. Os procedimentos mais comuns para o tratamento de situações de multifuncionalidade são: (i) Alocação por critérios físicos (massa, energia, entre outros), ou econômicos (custo, preço); (ii) Esgotamento (*Surplus Method*) em que todos os aspectos ambientais devem ser atribuídos indiscriminadamente ao produto em análise; e (iii) Expansão de Fronteiras (*System Expansion*), que repete a lógica do Esgotamento, mas debita cargas evitadas pela substituição de bens de consumo, pelos subprodutos gerados no sistema, do desempenho acumulado pelo produto em estudo;

- *Critérios de exclusão de dados:* são diretrizes qualitativas e quantitativas usadas para modular o sistema de produto, desde os quais aspectos ambientais podem deixar de ser avaliados pela ACV. Os critérios quantitativos têm em conta as contribuições cumulativas mássicas e energéticas às entradas e saídas de um processo elementar. Nesse contexto, aspectos ambientais cujas contribuições cumulativas imponham acréscimos inferiores ao patamar convencionado (1,0%, 2,0%, ou outro), deixam de ser considerados pelo estudo. Já os critérios qualitativos se apoiam no grau de relevância ambiental de cada aspecto ambiental para as categorias de impacto definidas para a análise;

- *Tipo e qualidade de dados:* o *'tipo de dados'* especifica quais as procedências dos dados a serem usados no estudo (primários, secundários ou mistos). De sua parte, a '*qualidade dos dados'* especifica características desses parâmetros com níveis de precisão e acurácia suficientes para não comprometer a robustez do modelo de sistema de produto. Esses padrões remetem as coberturas temporal, geográfica e tecnológica que balizam a coleta de dados, bem como à precisão e a representatividade dos valores amostrados para a análise;

- *Categorias de impacto e metodologia de alocação de impacto:* determina qual é a metodologia de quantificação de impactos mais adequada para o problema em questão, bem como, as categorias de impacto que serão incorporadas no estudo.

- *Análise crítica:* verificação do grau atendimento dos requisitos que deveriam ser cumpridos para efeito de elaboração de uma ACV.

3.4.3.2. Análise de Inventário

A Análise do Inventário do Ciclo de Vida (ICV) é uma etapa fundamental para a realização do estudo de ACV. Esta trata de quantificar as correntes de matéria e energia usadas na construção do modelo de sistema de produto (Santos, 2005). Esses dados devem ser suficientemente consistentes e representativos para que a ACV seja também confiável. A etapa se divide em duas ações: (i) coleta de dados; e (ii) tratamento de dados.

A coleta de dados compreende a busca de informações e valores que representem aspectos ambientais e demais correntes (como os fluxos intermediários e de produto que, respectivamente, interligam estágios de um mesmo sistema de produto, e dois sistemas de produto entre si). Esses podem ser primários, ou seja, baseados em medições de campo, ou dados experimentais, recolhidos diretamente junto ao sistema de produto em análise; ou secundários, quando são coletados de fontes bibliográficas (artigos, revistas, manuais ou livros), sendo por isso, e naturalmente, menos próprios das condições em avaliação.

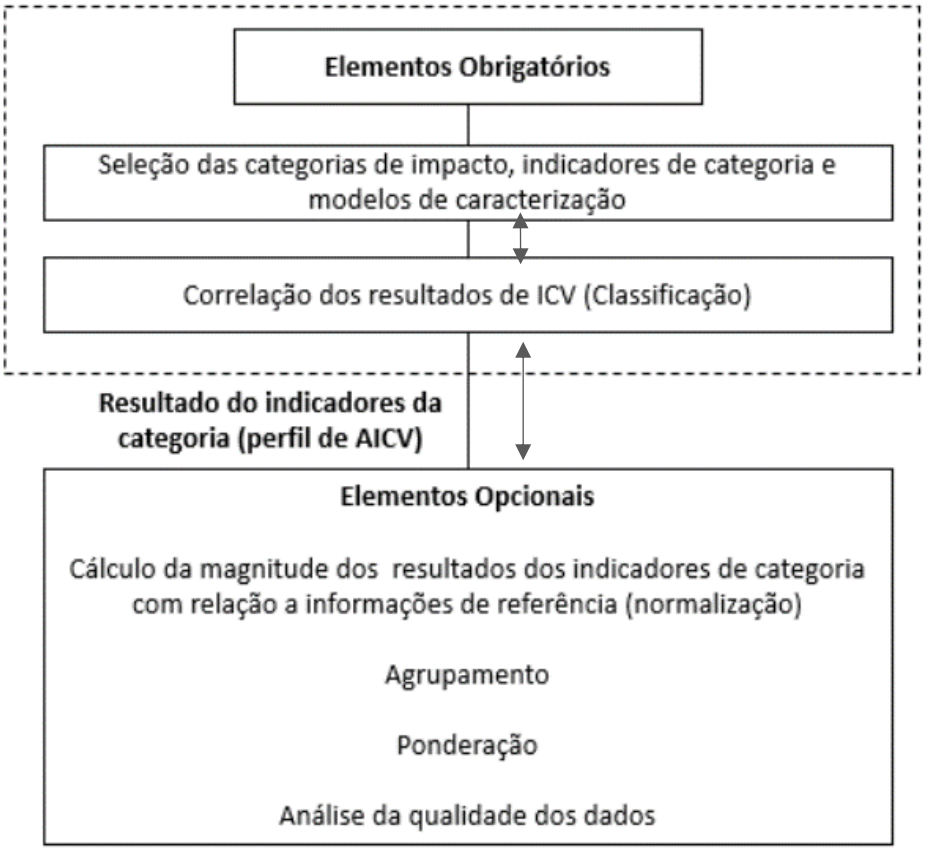
O tratamento dos dados compreende outras duas atividades: (i) ajuste ao fluxo de referência; e o (ii) tratamento de situações de multifuncionalidade. A etapa de ajuste ao fluxo de referência compreende expressar os valores de todas as correntes de matéria e energia que perfazem o sistema em termos daquela base de cálculo. Assim como já foi discutido, o tratamento de multifuncionalidades predispõe a seleção de um método para partição de aspectos ambientais (que deve necessariamente ser comum a todos os casos de geração de coprodutos), e sua aplicação (RIBEIRO, 2009). A elaboração do ICV pode também fazer uso de procedimentos complementares, como as Análises de Sensibilidade e de Incerteza, para verificar os graus de robustez e representatividade dos dados.

3.4.3.3. Avaliação de impactos

A Avaliação de Impactos Ambientais do Ciclo de Vida (AICV) afere os impactos impostos a natureza e ao ser humano, por conta do atendimento da função exercida pelo produto (ou serviço) em estudo. A norma ABNT NBR ISO 14040 (ABNT, 2009a) define

elementos obrigatórios e opcionais da AICV (Figura 6). Os elementos obrigatórios são essenciais à condução da etapa de AICV; portanto, na impossibilidade de esses serem cumpridos a análise ficaria incompleta.

Figura 6. Elementos obrigatórios e opcionais da etapa de AICV



Fonte: Adaptado da ABNT NBR ISO 14040

Já os elementos opcionais permitem com que os resultados da AICV possam ser expressos de maneira diferente daquela obtida com os elementos obrigatórios: o *Perfil de Impactos Ambientais*. No entanto, para que essa transformação ocorra, deve-se fazer uso, de indicadores que muitas vezes introduzem certo grau de subjetividade aos resultados. São chamados de elementos obrigatórios da AICV: seleção de categorias de impactos e seus respectivos indicadores; classificação; caracterização; e definição do perfil de impacto ambiental. Por outro lado, consideram-se opcionais os procedimentos de Normalização, Agrupamento, Ponderação e Análise da qualidade dos dados.

3.4.3.3.1. Seleção de Categorias de Impacto

A seleção das categorias de impacto ambiental define os indicadores e modelos a serem utilizados pelo estudo para efeito de AICV. Muniz (2012) lista algumas premissas que devem ser consideradas durante a seleção das categorias de impacto. São elas:

- As categorias devem permitir uma avaliação abrangente dos principais impactos resultantes das correntes de matéria e energia que foram calculados no ICV;
- As categorias de impacto devem também evitar sobreposição de impactos;
- Elas devem ser reconhecidas e aprovadas internacionalmente;
- É recomendável selecionar o número restrito de categorias de impacto, com vistas a reduzir a complexidade do estudo, e aprimorar a análise crítica dos resultados.

A quantificação dos resultados das categorias de impacto é realizada com base no estabelecimento de indicadores que estabelecem uma medida comum (e científica) para a conversão dos valores dos aspectos ambientais. A profundidade com que os impactos são avaliados é definida por meio da adoção de indicadores intermediários (*Midpoint)* e finais (*Endpoints).* Os indicadores de *Midpoint* se ocupam de analisar efeitos primários ocasionados pelo consumo e a disposição de determinado aspecto ambiental. Portanto, uma modelagem do tipo *Midpoint* resulta em avaliações menos complexas, que leva em conta potenciais de Aquecimento Global, Toxicidade Humana, Depleção de recursos naturais, entre outros (SILVA e KULAY, 2006).

De sua parte, os indicadores *Endpoints* tratam de avaliar desdobramentos finais (ou diretos) que tenham sido gerados a partir de cadeias de causa e efeito, sobre o meio ambiente e a saúde humana (SUGAWARA, 2012). Dada esta característica, os resultados de AICVs baseadas em *Endpoints* são em geral apresentados em unidades relativizadas e mais abstratas como *Disability-Adjusted Life Year* (DALY), *Years of potential life lost* (YPLL), ou mesmo, em base econômica.

3.4.3.3.2. Categorias de Impacto

As categorias de impacto que aparecem listadas a seguir compõem parte do elenco daquelas comumente utilizadas na realização de estudos de ACV:

- Acidificação: ocorre a partir da emissão de substâncias solúveis em água que, em primeira estância, ocasionam a redução do pH das chuvas. Dentre as causas de ordem secundária, tem-se: a alteração do teor de acidez do solo e degradação de patrimônios e da vida aquática. Os Potenciais de Acidificação (AP) são em geral descritos em kg $SO_{2\ eq}$/ kg emissão (Guinée et al, 2002)

- Eutrofização: refere-se ao enriquecimento de corpos hídricos e do solo por disposição de nutrientes, que eleva a produção de biomassa nesses meios. O excesso de biomassa ocasiona no aumento da taxa de consumo de oxigênio livre pelo processo de decomposição da matéria, alterando as condições naturais desses ambientes e afetando a biodiversidade local. O potencial de eutrofização (EUT) é em geral expresso como kg P_{eq}/kg emissão (Huijbregts, et al. 2003).

- Mudanças climáticas: representa o aumento da retenção da radiação infravermelha na superfície terrestre, intensificado em especial da crescente quantidade de CO_2, N_2O, CH_4, aerossóis e outros gases na atmosfera, que impedem a dispersão dos raios solares. Os potenciais de Mudanças Climáticas (MC) costumam ser indicados em (kg $CO_{2\ eq}$/ kg emissão) (Frischknecht et al 2002).

- Depleção abiótica: representa a redução de recursos naturais não bióticos utilizados como insumos no sistema de produto, como combustíveis fósseis e minérios. O fator de impacto de Depleção abiótica (DA) se origina do quociente entre o consumo de certo recurso natural e sua oferta (Huijbregts, et al. 2003).

- Formação fotoquímica de ozônio: nevoeiro decorrente da reação fotoquímica entre óxidos de nitrogênio e sustâncias orgânicas voláteis, também denominada de Smog, que podem diminuir a atividade de fotossíntese da flora pela redução de luminescência solar. Os fatores que descrevem o Potencial de formação de foto-oxidantes (FFO) se referem em kgC_2H_{4eq}/kg emissão (Frischknecht et al 2002).

- Ecotoxicidade terrestre: diz respeito ao impacto causado sobre ecossistemas terrestres por substâncias tóxicas emitidas para o ar, solo ou água. Algumas das consequências finais deste impacto são a redução da produção agrícola, e biodiversidade da flora e da fauna. O potencial de ecotoxicidade (ECT) costuma ser descrito em termos de kg 1,4 $DB_{eq.}$/kg emissão (Huijbregts, et al. 2017).

- Depleção da camada de ozônio: redução da camada de ozônio existente na estratosfera, que permite a passagem de radiação ultravioleta à superfície terrestre, aumentando a ocorrência de problemas de pele, doenças oculares e interferências no ecossistema. O modelo de caracterização utilizado para medir impactos dessa natureza foi desenvolvido pela Organização Meteorológica Mundial (WMO) e define o potencial de depleção de camada de ozônio (OLD) de diferentes gases na forma de kg CFC-11_{eq}/ kg emissão (Huijbregts, et al. 2003).

- Toxicidade humana: emissão de substâncias tóxicas nos compartimentos de ar, solo ou água, sob a forma de compostos aromáticos, metais, agroquímicos, entre outros, que podem causar problemas à saúde do homem ao serem inaladas ou ingeridas. Os fatores de caracterização para HT são calculados considerando critérios como destino, exposição, e efeitos das substâncias tóxicas em horizonte temporal infinito, sendo descritos assim como o ECT em termos de kg 1,4 DB_{eq}/ kg emissão (Huijbregts, et al. 2017).

3.4.3.3.3. Classificação

A etapa de classificação agrupa os aspectos ambientais que constam do ICV em relação as categorias de impacto selecionadas para tomar parte da AICV. Essa atividade é necessária, pelo fato de certos aspectos ambientais poderem contribuir para mais de um impacto. Os aspectos ambientais podem ser computados mais de uma vez durante a classificação desde que os impactos por eles ocasionados sejam independentes entre si (JENSEN et.al., 1997). Em contrapartida, nos casos em que um único aspecto ambiental contribui para categorias dependentes a ABNT NBR ISO 14044 recomenda a aplicação de mecanismos distributivos (ABNT, 2009b).

3.4.3.3.4. Caracterização

Na etapa de caracterização os resultados aglutinados no ICV são correlacionados às categorias de impacto de forma quantitativa. O processo ocorre por meio da aplicação de *fatores de equivalência*, que são representados por uma substância (ou, padrão) que é capaz de expressar a magnitude de contribuição de outros precursores que contribuem para aquele potencial de impacto.

Logo, o impacto ambiental total da categoria pode ser descrito a partir da equação (Eq. 1) indicada a seguir:

$$S_J = \sum Q_{ij} \times m_i \qquad \text{(Eq. 1)}$$

Em que:

S_J: impacto total da categoria de impacto j;

m_i: quantidade da carga ambiental i associada às correntes de matéria e energia que foram calculadas no ICV;

Q_{ij}: fator de equivalência para a carga ambiental i na categoria de impacto j.

Os resultados de desempenho ambiental das categorias de impacto selecionadas para certo estudo serão colocados lado a lado, estabelecendo assim o chamado *Perfil de Impactos Ambientais* associado à função em estudo.

3.4.3.3.5. Normalização

A normalização consiste do primeiro procedimento não obrigatório da AICV. A partir dela pode-se expressar os valores das categorias que compõem o Perfil de Impactos na forma de uma mesma referência. Dessa forma, os desempenhos em cada categoria passam não apenas a ser comparáveis, como também podem ser somados para compor um *Indicador Único* de desempenho.

De acordo com Muniz (2012), a normalização se dá por meio da divisão da carga total de uma categoria de impacto pela magnitude real desta mesma categoria ao longo de certo tempo, ou para certa área, ou ainda, sobre um número determinado de pessoas de uma comunidade. Dessa forma, são exemplos de fatores de normalização: (i) utilização de recursos por uma dada área global, regional ou local; (ii) emissões ou consumos totais em uma dada área em base *per capita*; ou (iii) razão entre valores de duas alternativas.

Passuello (2007) exemplifica esta possibilidade por meio das emissões de CO_2 de um certo produto. Nesse caso hipotético, o objeto em estudo causa impacto na forma de Aquecimento Global de 1,0 t $CO_{2\ eq}$. Por outro lado, a contribuição anual do país onde o mesmo é manufaturado atinge a marca de 1.000.000 t $CO_{2\ eq}$. A partir desses dados pode-se concluir que a contribuição normalizada do produto para o país, em termos da referida categoria de impacto, será de 10^{-6} ano, ou seja, de 31,5 segundos.

O *Perfil Normalizado de Impactos Ambientais* será o produto final da aplicação do procedimento de normalização. Muito embora útil, sobretudo para efeito de tomada de decisão, esse resultado se cerca de elevado grau de subjetividade, e por isso mesmo, de certa imprecisão, por conta da dificuldade em se obter valores consistentes e confiáveis para os índices totalizados que servem ao processo (SUGAWARA, 2012).

3.4.3.3.6. Agrupamento

A etapa de agrupamento tem por objetivo reordenar as categorias de impacto. De acordo com a norma ABNT NBR ISO 14044 (ABNT, 2009b) esta atividade pode ser realizada a partir de dois enfoques:

- Congregação de categorias de impacto que apresentem características comuns (por exemplo: abrangência geográfica local, regional ou global); ou,
- Organização de categorias de impacto em função de um critério de importância que pode inclusive vir a ser quali-quantitativo.

Baumann e Tillman (2004) colocam que o agrupamento possui benefícios quanto à apresentação dos resultados, que por isso se tornam mais compreensíveis para o leitor. Por outro lado, as autoras alertam para o fato de que o uso de fatores subjetivos (segundo dos enfoques) de agrupamento pode inadvertidamente disfarçar os resultados de impacto, e assim, comprometer sua clareza e confiabilidade.

3.4.3.3.7. Ponderação

A ponderação consiste de um método quali-quantitativo, em que as categorias de impactos são relacionadas entre si para efeito de avaliação de importância. O intuito dessa atividade é semelhante ao da normalização, de criar um indicador único de desempenho ambiental para o objeto de estudo. No entanto, esse índice seria composto tendo em conta o grau de importância de cada categoria de impacto. Para tanto, critérios de ordem social, econômica, técnica, e até científica, são adotados para a composição dos *pesos* a serem atribuídos a cada categoria de impacto (RIBEIRO, 2009). Destacam-se entre os critérios:

- Monetização: uma avaliação econômica, cuja abordagem visa atribuir custos, ou preços, aos impactos ambientais, em função do grau de modificação da qualidade do entorno que esses proporcionam. Nesse contexto, o preço pode ser entendido, portanto, como a *disposição a pagar* da comunidade afetada pelo atendimento da função do objeto em estudo. Por conta de suas características, essa abordagem é baseada em valores e preferências sociais;

- Limite projetado: que consiste da diferença entre os níveis atual e desejado de poluição de certa área, e que podem ser estabelecidos por autoridades ambientais locais, ou por padrões internos de uma companhia;

- Abatimento tecnológico: método que estuda a possibilidade de redução da carga ambiental por meio da adoção de diferentes tecnologias;

- Painéis sociais: tomam em conta a opinião de especialistas (acadêmicos ou não), executivos, autoridades, e *stakeholders* para efeito de definição de fatores de peso entre as categorias de impacto. Muito embora dependente de grande volume de pontos de vista, trata-se de uma das práticas adotadas com mais frequência para dar suporte ao procedimento de ponderação.

Definidos os pesos, o procedimento de ponderação pode ser implementado a partir da aplicação da equação (Eq. 2) (Muniz, 2012):

$$X = \sum(W_j \times N_j) \qquad \text{(Eq. 2)}$$

Onde:

X: índice ambiental;

W_j: fator de ponderação para a categoria de impacto (j);

N_j: resultado normalizado do impacto (j).

A subjetividade é também uma característica inerente ao processo de ponderação, visto que sua condução passa necessariamente por premissas de caráter social baseadas na importância e na relevância percebidas de certo impacto (Baumann e Tillman, 2004). Contudo, Muniz (2012) comenta que a ponderação pode ter um perfil racional com o uso de teorias de decisão, pelo fato destas serem desenvolvidas a partir de bases e ditames científicos.

3.4.3.4. Interpretação

A interpretação dos resultados tem por objetivo identificar vulnerabilidades de um estudo de ACV com o intuito de equacioná-las. Para tanto, essa etapa metodológica aplica procedimentos de verificação sobre a estrutura metodológica da ACV, além de critérios e premissas usados para efeito de definição de objetivo e escopo, os dados empregados para composição do ICV, além dos métodos e categorias de impacto que terminaram por compor o Perfil de Impacto Ambiental do produto objeto do estudo.

Dado o caráter iterativo entre as etapas da ACV, essa análise pode se reverter em ajustes de objetivos, fronteiras, na busca de dados adicionais, revisão de critérios para tratamento de multifuncionalidades, entre outros elementos. O objetivo da interpretação se restringe a harmonizar o estudo; este procedimento trata também de identificar focos de impacto, e propor ações que possam mitigá-los, minimizá-los ou até, sempre na medida da possibilidade, eliminá-los.

3.5. Trabalhos de ACV relacionados com revestimentos

Um levantamento efetuado junto a literatura recente permitiu identificar algumas produções cientificas em que o processo de aprimoramento de desempenho ambiental de materiais de recobrimento foi amparado por resultados originados de estudos de ACV.

É este o caso do estudo conduzido por Wigger et.al. (2017), que aplicaram a técnica para comparar o desempenho ambiental de cerâmicos à base de cromo duro convencional, com aquele alcançado por nanopartículas de cobalto de carboneto de tungstênio (nano-WC-Co), como agentes de revestimento de rolos transportadores. A ACV mostrou que o uso de nano-WC-Co trouxe redução de impactos com relação ao cromo duro, em termos de Depleção de metais (– 98%), e de água (– 91%), Ocupação de terras agricultáveis (–83%), Toxicidade humana (– 73%) e Eutrofização de água doce (– 79%). Parâmetros como a eficiência do processo de pulverização térmica, e a longa vida útil do nano-WC-Co foram decisivos para que tais resultados fossem obtidos.

Seguindo a mesma linha de abordagem, Upadhyayula et al. (2017) avaliaram os efeitos da substituição de revestimento de zinco galvanizado obtido via imersão a quente (HDG), por grafeno Polieterimida (grafeno-aço-PEI) na proteção de painéis metálicos contra corrosão. A estrutura de grafeno-aço-PEI produziu menores impactos em quase todas as categorias avaliadas, ao assumir-se que este revestimento não requer manutenção durante a vida útil da estrutura.

Stieberova et al. (2017) verificaram os efeitos ambientais da mudança de um revestimento a base de fluoreto de polivinila (PVDF), por outro elaborado com nanopartículas auto-limpantes (SCC) a base de ZnO. A função selecionada para a análise compreendeu a proteção de estruturas de blindagem. Os resultados da ACV mostram que o SCC apresenta melhor desempenho que o PVDF em todas as categorias avaliadas. Isto deveu-se em grande à eliminação de impactos durante o estágio de uso, pelo fato de o SCC não requerer manutenção durante o estágio de uso do ciclo de vida. Esse ganho superou em muito os impactos adicionais decorrentes da manufatura do mesmo ativo.

Finalmente, Dehan et al. (2017) compararam por meio de ACV, um revestimento de barreira de alto desempenho formulado à base de água (Barrier Plus), com sucedâneo convencional, derivado de solventes, para a proteção de aço estrutural contra a corrosão.

Os resultados proporcionados pela ACV fizeram constatar que o Barrier Plus tem melhor perfil ambiental do que o revestimento de referência da indústria, mostrando resultados promissores em relação aos *benchmarks* comerciais a base de água.

Muito embora a pesquisa tenha identificado achados importantes no campo dos revestimentos, esta ação não detectou esforços cientifico-acadêmicos que observassem o desempenho ambiental de agentes coalescentes por meio de ACV. Este estudo se propõe a dar uma contribuição para o tema, preenchendo, ainda que em parte, essa lacuna. Assim, e como já fora enunciado no capítulo 2 – Objetivos, a iniciativa trata de avaliar os efeitos ambientais da substituição de um agente coalescente de uso convencional na formulação de tintas decorativas, por molécula projetada com vistas a reduzir os impactos ambientais gerados durante o uso daquele produto.

4. MÉTODO DE TRABALHO

Para atender de maneira satisfatória os objetivos estabelecidos para este estudo um conjunto de ações coordenadas foi estabelecido a título de Método de Trabalho. Este compreende os seguintes passos: (i) Revisão de Literatura com a finalidade de identificar aspectos tecnológico-processuais, de ordens ambiental e econômica, que descrevam as rotas de obtenções dos coalescentes em análise; (ii) Construção de modelos capazes de representar as cadeias de manufatura daqueles ativos; (iii) Determinação de desempenhos ambientais e econômicos dos produtos em análise; (vi) Condução de uma Análise de Eco-eficiência e formulação de considerações sobre esses achados.

Cada uma daquelas etapas passa a ser descrita a seguir em maiores detalhes, a fim de proporcionar um quadro detalhado das ações empreendidas, dos produtos e resultados que a partir dela foram gerados, e das adaptações que, por circunstâncias diversas (que também estão relatadas neste documento) precisaram ser realizadas.

Por fim, questões alusivas a sigilo industrial impedem que sejam conhecidos os nomes comerciais dos produtos investigados neste estudo. Para contornar essa situação, o agente coalescente de aplicação regular na formulação de tintas decorativas passará a ser denominado pela sigla ‘CA-P’, ao passo que aquele que resulta de desenvolvimentos recentes irá ser qualificado de ‘CA-1’.

4.1. Revisão de Literatura

O método de trabalho se iniciou por uma Revisão de Literatura, conduzida com o propósito de caracterizar os objetos avaliados pelo estudo – agentes coalescentes usados na formulação de tintas decorativas –, quanto a tecnologia de manufatura, condicionantes processuais e operativos e aspectos logísticos. Dado o caráter da análise, o levantamento daquelas especificidades versou sobre todo o ciclo de vida dos coalescentes, partindo da extração de recursos naturais usados em ativos que os compõem, e seguindo até o descarte final dos mesmos. Outro objetivo da pesquisa consistiu da identificação de dados que descrevessem consumos e emissões, tanto de materiais, como energéticas, que ocorrem naqueles escopos de produção. Por fim, a Revisão de Literatura empenhou-se em obter dados que descrevessem o perfil econômico dos ativos em análise.

As informações coletadas nesta etapa do estudo serviram de subsídio para elaboração de modelos consistentes e representativos das condições técnica, ambiental e econômica dos referidos bens de produção.

4.2. Construção de Modelos

A construção de modelos que representassem as cadeias de manufatura do CA-P e do CA-1 compreendeu três atividades: (i) Definição das tecnologias mais frequentes para produção desses ativos, bem como, identificação de parâmetros que expressassem suas condições médias de operação; (ii) Coleta de dados capazes de caracterizar e de quantificar consumos de matérias-primas e insumos, utilidades, perdas e emissões, além de aspectos logísticos associados àqueles arranjos; e (iii) Formulação dos modelos *per se*.

Os levantamentos transcenderam os limites da síntese dos coalescentes, seguindo ao longo dos ciclos de vida desses produtos desde níveis iniciais de intervenção antrópica, de extração de recursos naturais, até a disposição final do produto. Considerando a diferença de maturidade técnica entre as cadeias de produção, buscou-se que os modelos fossem suficientemente harmônicos em termos de graus de detalhe e aprofundamento, para que eles pudessem ser comparados sem que houvesse interferência daquele efeito.

4.3. Determinação dos desempenhos ambiental e econômico

4.3.1. Determinação de desempenho ambiental

Os desempenhos ambientais foram estabelecidos a partir da técnica de ACV. Para ambos os casos a técnica foi aplicada com viés atribucional e enfoque do tipo ‘berço-ao-túmulo’. As normas ABNT NBR ISO 14040 e 14044 (ABNT, 2009a; 2009b) forneceram orientações metodológicas gerais para as análises.

O fato de os coalescentes serem ingredientes das tintas decorativas faz deles bens de produção. Dessa forma, e como ocorre com outros constituintes da formulação, os fins a que esses ativos se destinam orientam as funções do bem de consumo.

Se observada no contexto do estudo, e sob a perspectiva de ciclo de vida, tal circunstância provoca quatro desdobramentos imediatos: (i) aplica-se ACV para uma função exercitada pela tinta decorativa; (ii) a formulação da tinta é comum em termos de seus componentes, e as quantidades deles, excetuando-se tão somente, os coalescentes; (iii) a substituição de CA-P por coalescente alternativo não implica em alteração do desempenho técnico de quaisquer outros constituintes da formulação da tinta; e, (iv) o ciclo de vida do coalescente se encerra com sua vaporização para o ambiente, logo após se dar a aplicação da tinta e, exatamente, quando se esgota a função desse ativo.

4.3.2. Análise econômica

Uma verificação que se proponha a gerar um diagnóstico depende de indicadores que forneçam diretrizes consistentes quanto às dimensões por ela analisadas. Para o caso típico de Análise Econômica, costumam ser considerados custos (p.e., de matéria-prima, energia, manutenção, transporte, entre outros) e outros desembolsos (impostos e tarifas), bem como percentuais que descrevam margens de lucro. Além disso, as análises de fundo econômico costumam ser realizadas para um horizonte temporal definido.

O fato de serem bens de produção limita o elenco de opções de verificação da vertente econômica para produtos coalescentes. Isso porque, nem todos os elementos adotados para composição de custos são de fácil coleta, ou mesmo, e até, costumam estar disponíveis.

De qualquer maneira, índices como preço, descritos tanto sob a forma de valores absolutos, como em termos de participação relativa sobre montantes totais, aparecem como opções aceitáveis para desenvolvimento desta análise. Assim sendo, decidiu-se que a análise econômica seria realizada com base em informações de preço de mercado do coalescente obtidas através do canal comercial de empresas do segmento de tintas. Essa escolha gerou como desdobramento imediato a necessidade de realização de uma Análise de Sensibilidade para que os efeitos da variabilidade sobre o indicador de Eco-eficiência fossem aferidos.

4.4 Análise de Eco-eficiência (AEE)

A AEE foi realizada através de uma adaptação do Método BASF apresentado em seus elementos mais essenciais na seção 3.3 deste documento. A variação se deu por conta da formulação do indicador econômico, que foi estruturado nos termos apresentados antes na seção 4.3.2.

Os resultados da ACV foram descritos na forma de gráficos do tipo "impressão digital ambiental" com as categorias de impacto avaliadas. Procedimento semelhante foi aplicado para a correlação entre valores normalizados de cargas ambientais e preços. Esta quantificação visou traduzir em termos quantitativos o grau de afastamento estabelecido entre a Eco-eficiência de um produto e o patamar máximo possível de ser atingido para esse parâmetro.

A análise dos resultados obtidos por essa pesquisa foi conduzida em dois níveis. No primeiro deles, os valores que compõem o Perfil de Impactos Ambientais gerado pela ACV, bem como aqueles gerados da Análise Econômica foram verificados apenas dentro de seus domínios de validade. Essa abordagem buscou identificar os precursores de cada categoria de impacto, apontando as causas principais de efeitos adversos sobre o entorno, proporcionadas pelos sistemas sob verificação.

No segundo nível de análise os valores acumulados de impacto de cada categoria ambiental foram associados gerando um indicador exclusivo dessa dimensão. O indicador da dimensão ambiental foi então associado ao seu correspondente para a dimensão econômica. Para tanto, aplicaram-se procedimentos de normalização a fim de relativizar os resultados. Para condução desse processo, tomou-se por referência o maior valor de cada série. A coordenação dos índices ambiental e econômico praticada de acordo com as orientações do método BASF gerou os indicadores de Eco-eficiência para cada situação.

Os resultados gerados em qualquer dos níveis de análise, fornecem subsídios para uma ampla discussão que observe os efeitos econômico-ambientais de cada coalescente sobre o desempenho técnico da tinta. Espera-se que essas reflexões inspirem adequações, ajustes, e eventuais correções nos ciclos de vida dos coalescentes aqui examinados.

5. BREVE DESCRIÇÃO DOS PROCESSOS DE SÍNTESE DE CA-P E CA-1

A Revisão de Literatura proporcionou uma ideia detalhada sobre o processamento de CA-P. Dentre as fontes consultadas, o conjunto mais completo de dados e informações sobre essa transformação aparece descrito em Li et al (2014). O caso do CA-1 é diferente. Por se tratar de um produto em fase de desenvolvimento sua lógica de manufatura, assim como os parâmetros de processo que a descrevem constituem-se em segredos industriais. Posto o contexto, o conteúdo que se segue faz um breve relato dos processos de obtenção de cada coalescente. Dadas as circunstâncias, a caracterização da síntese do CA-1 terá um tom bastante mais generalista do que aquele adotado no caso do CA-P.

De acordo com Li et al (2014) o processamento do CA-P ocorre em três estágios. O primeiro deles compreende a trimerização do isobutiraldeido sob condições moderadas, em presença de hidróxido de sódio (NaOH) como catalisador. Devido a reações paralelas, são gerados ainda ácido isobutírico, 2,2,4-trimetil-1,3-pentanodiol, além de uma mistura composta por CA-P e TXIB (2,2,4-trimetil-1,3-pentanodiol diisobutirato). A reação deve ser interrompida por adição de ácido clorídrico (HC1) e o sal produzido – cloreto de sódio (NaCl) –, removido por filtração. A massa reacional de orgânicos é submetido à destilação atmosférica para que sejam separadas frações voláteis – ácido isobutírico ($C_4H_8O_2$) e, o excesso de isobutiraldeido, que retorna ao reator via reciclo fechado –, de outras espécies. A seguir ocorre outra destilação, realizada sob vácuo (1,33 kPa) a fim de separar o 2,2,4-trimetil-1,3-pentanodiol do sistema CA-P/TXIB. Essa mistura contém 90,5%$_{m/m}$ CA-P.

A obtenção do CA-1 ocorre a partir da reação entre um éster e um hidrocarboneto cíclico ligado a um grupo hidroxila. Um catalisador e um ácido de cadeia curta, ambos orgânicos, também participam do processo. A síntese do CA-1 não gera perdas materiais ou energia. Em contraste, tal processamento, bem como aqueles que resultam da obtenção de seus ativos, consomem vapor e eletricidade para acionar bombas, misturadores e outros equipamentos periféricos de processo.

6. MODELAGEM DOS PROCESSOS PRODUTIVOS DE CA-P E CA-1

6.1. Modelo do Processo de produção de CA-P

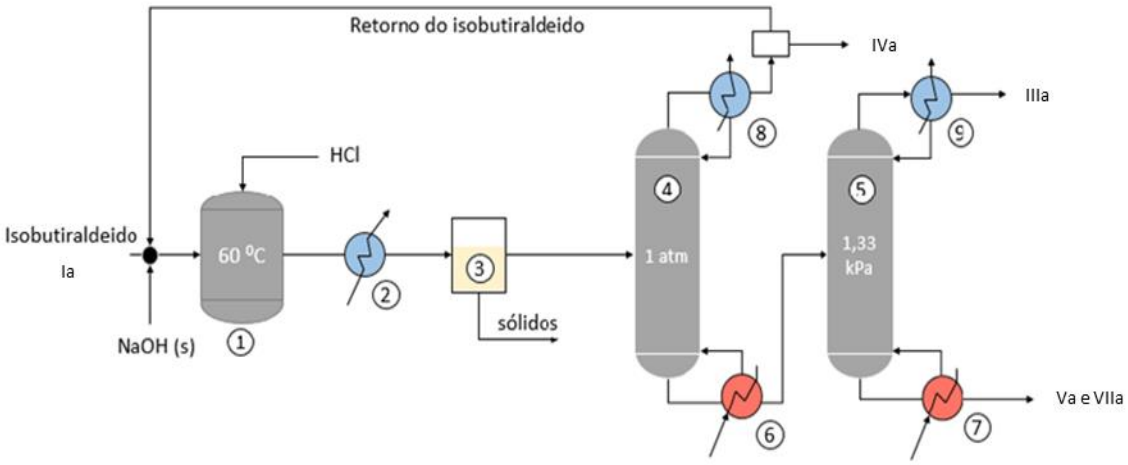
O CA-P é o coalescente líder de mercado. No entanto, ainda que seja obtido a partir de tecnologias consagradas, uma pesquisa realizada junto a literatura não detectou dados que descrevessem o desempenho ambiental daquela lógica a partir de um inventário coeso, estruturado e representativo.

A solução encontrada para contornar tal limitação consistiu em criar um modelo que atendesse as necessidades do estudo. Assim como já fora discutido antes (capítulo 5), Li, et al (2014) apresentam um conjunto de dados e informações consistente da forma como esta transformação ocorre nos dias de hoje. Esses parâmetros e condições foram então simulados pelo programa computacional Aspen Plus v.8.8 de Aspentech® gerando um modelo harmônico, robusto e segundo o qual pudessem ser obtidos consumos e emissões inerentes àquele processo.

Neste desenvolvimento foram projetados dois Sistemas. O Sistema A, especifica a síntese de CA-P até 90,8%$_{m/m}$ e, para tanto as diretrizes propostas por Li, et al (2014) são seguidas rigorosamente. No Sistema B o produto é obtido com pureza de 98,5%$_{m/m}$, que corresponde ao grau mínimo para sua comercialização. Para que tal nível de exigência fosse atingido o processo foi incrementado com relação a concepção original. As adições ocorreram por meio da inclusão de duas torres de destilação.

Muito embora não haja registros na literatura de que o processo se desenvolva, de fato, segundo este arranjo, o uso dessas alternativas é tecnologicamente viável (SWAN, 2005; GALLAGHER, et al 2008). Além disso, o modelo é convergente, dada a intervenção de Aspen Plus, além de ter sido elaborado em um nível de aprofundamento condizente com outros elaborados para representar etapas, subsistemas, e até sistemas que constituem a rota contra a qual o CA-P será comparado. Tais especificidades fizeram com que o processo em questão fosse classificado como ‘arranjo possível’ de obtenção do coalescente padrão, mesmo diante da, já manifesta, ausência de comprovação de tal condição pela literatura.

Figura 7. Representação simplificada da produção de CA-P



Legenda: (1) Reator; (2) Resfriador; (3) Filtro; (4) Coluna de destilação atmosférica; (5) Coluna de destilação a vácuo; (6) e (7) Refervedores; (8) e (9) Condensadores

Fonte: Adaptado de Li, et.al (2014)

Em termos operativos, e para efeito de simulação, o conjunto foi dividido em três estágios: (i) Reação; (ii) Separação de resíduos; e (iii) Purificação do CA-P. A Figura 7 traz um fluxograma simplificado do processo destacando estes estágios. Uma versão mais completa desse arranjo, gerada com Aspen Plus – v 8.8 em virtude da simulação, compõe o Apêndice A1 deste documento. A argumentação realizada a seguir mostra parâmetros, condições de processo e premissas que foram adotados para modelar cada estágio.

6.1.1. Estágio 1: Reação

A síntese de CA-P ocorre em estágio único, e via reação direta de trimerização de isobutiraldeido (C_4H_8O), tendo NaOH como catalisador, conforme já indicado anteriormente na figura 2 da sessão 3.1.3.

Muito embora seja de elevada seletividade em termos de formação de CA-P, o processo gera subprodutos devido a ocorrência de reações em paralelo. A síntese é potencializada pelas condições operacionais do reator. De acordo com Li et.al (2014) as reações paralelas produzem, também a partir de C_4H_8O, o 2,2,4-Trimetil-1,3-pentanodiol, $C_4H_8O_2$ e 2,2,4-trimetil-1,3-pentanodiol diisobutirato (CA-P/TXIB), que compõem respectivamente as correntes (IIIa), (IVa) e (Va + VIIa) da Figura 7. O C_4H_8O é introduzido no sistema via corrente (Ia). O processo ocorre a temperaturas moderadas (50 – 70^0C) e pressão atmosférica. Essas condições se mantêm estáveis com o auxílio de uma camisa de refrigeração em que circula água, instalada devido ao caráter exotérmico das sínteses.

O vaso de reação foi representado por um reator do tipo estequiométrico (RStoic). Para simulação desse equipamento é necessário que sejam especificadas ao menos duas variáveis de operação, e uma reação química. As exigências foram contornadas adotando-se T = 60ºC e P = 1,0 atm, e descrevendo-se as equações Eq. 3 e Eq. 4 mostradas a seguir. Já o processo de extinção da reação – motivado por dosagem de HCl – está descrito pela equação Eq. 5.

$$NaOH_{(s)} \rightarrow NaOH \qquad \text{(Eq.3)}$$

$$3\ C_4H_8O \rightarrow 1\ C_{12}H_{24}O_3\ \text{(CA-P)} \qquad \text{(Eq.4)}$$

$$NaOH + HCl \rightarrow NaCl + H_2O \qquad \text{(Eq.5)}$$

Além dessas condições o (RStoic) precisa ainda que uma das taxas de conversão de reagentes seja especificada. Li, et.al (2014) realizaram experimentos com vistas a testar diferentes concentrações de catalisador, obtendo assim, rendimentos específicos para os possíveis produtos. O produto desses levantamentos está registrado na Tabela 2.

Dentre as possibilidades investigadas aquela correspondente ao Teste n. 4 mostrou a melhor taxa de conversão de C_4H_8O em CA-P (Eq. 4). Note-se que o resultado equivale ao obtido pelo Teste n. 8, sendo, porém, alcançado após 4h de início da reação. Nos casos das demais transformações (Eq. 3 e Eq. 5) admitiu-se que todo o NaOH seria consumido. Essa condição foi assegurada com a adição de HCl em excesso (74 mmol). O (RStoic) trata todas as reações que ocorrem no sistema como estequiométricas. Além disso, impõe que o balanço de átomos esteja fechado.

Tabela 2. Síntese de CA-P utilizando diferentes concentrações de NaOH e tempos de batelada

Teste	n(NaOH)	Tempo	Ia	IIIa	IVa	Va e VIa	VIIa	Rendimento
	mol	h	Rendimento molar em relação Ia (%)					%(wt)
1	0,025	4	84,4	2,1	2,0	9,5	0,0	23,2
2	0,038	4	55,9	3,4	3,3	34,6	0,1	59,3
3	0,050	4	40,4	4,8	4,1	50,0	0,7	72,8
4	0,063	4	17,0	5,9	5,7	71,1	0,3	86,2
5	0,073	4	16,1	9,1	8,8	65,7	0,3	82,1
6	0,064	2	61,4	2,9	2,6	32,9	0,2	58,8
7	0,063	3	41,0	5,0	4,1	49,0	0,9	71,9
8	0,063	5	16,8	6,3	5,7	70,5	0,6	86,4

Fonte: Li, et.al, (2014)

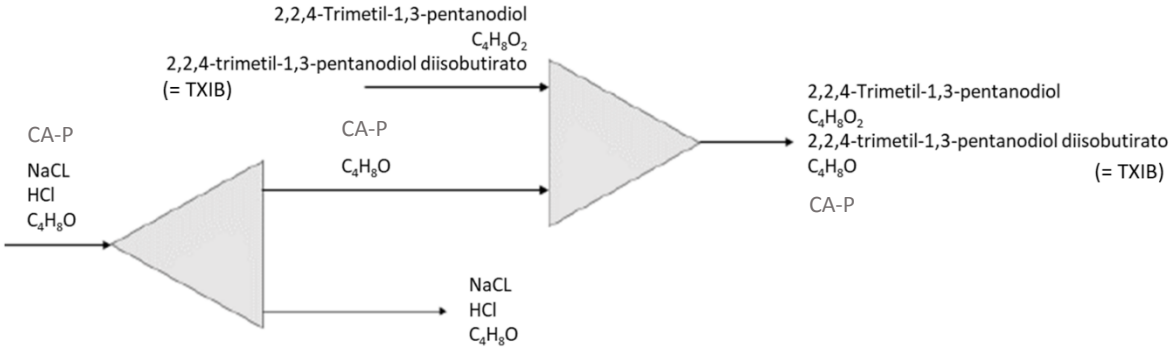
Devido a esses fatores, não foi possível levar em conta reações paralelas, como as que geram os produtos das correntes (IIIa), (IVa) e (VIIa) indicados na figura 7. A tentativa de imposição das reações simultâneas a (RStoic) não foi bem-sucedida por resultar no desbalanceamento atômico da transformação.

6.1.2. Estágio 2: Separação de resíduos

A corrente que deixa o reator é composta pela quantidade residual de C_4H_8O, por coprodutos, NaCl, e pelo excesso de HCl. A separação dessas espécies químicas ocorre por filtração, que para efeito de simulação foi representada por um separador de vazões (*Splitter*). Nesse caso, NaCl e HCl são removidos do sistema juntamente com 10,9%$_{molar}$ de C_4H_8O, que corresponde a uma das frações do reagente não consumido no reator.

Na prática, a outra corrente que deixa o filtro é composta, também, por C_4H_8O, e por coprodutos. A restrição colocada por (RStoic) – de impedir a simulação das reações de formação de subprodutos – levou ao uso de um artifício de simulação. Este consistiu da criação de um misturador fictício (*Mixer*) que unisse a corrente emanada do *Splitter* – (CA-P + C_4H_8O) –, a outra, constituída pela composição dos demais produtos de reação. A Figura 8 ilustra esse arranjo.

Figura 8. Representação do processo de extração de NaCl e do artifício de simulação criado para descrever adequadamente a corrente que alimenta o estágio de purificação de CA-P



Fonte: próprio autor

As quantidades de subprodutos foram determinadas via relações estequiométricas, e tendo em conta rendimentos de processo (Tabela 2), sendo depois apontadas no Aspen Plus. A decisão de criar o artifício de simulação (*Splitter* + *Mixer*) deve-se ao fato de os subprodutos de reação influenciarem as estimativas de consumos de utilidades quentes e frias do estágio seguinte, de purificação de CA-P.

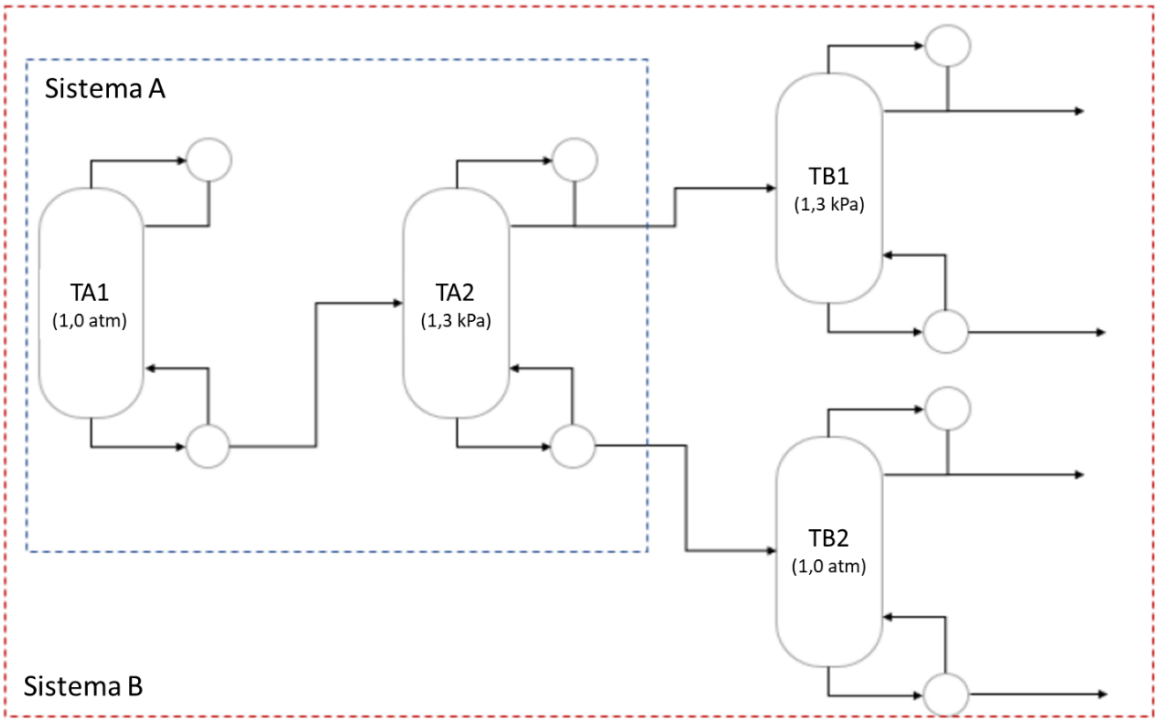
6.1.3. Estágio 3: Purificação do CA-P

A solução encontrada para atender aos dois graus de pureza de CA-P ensaiados no estudo foi conceber um sistema de purificação modular, baseado na associação de torres de destilação. A primeira etapa desse arranjo, denominada de Sistema A, segue as orientações indicadas em Li, et.al (2014) e emprega duas torres de destilação (TA1 e TA2) em série para gerar CA-P a 90,8%$_{wt}$.

A segunda etapa do processo, o Sistema B, acopla outras duas torres de destilação (TB1 e TB2), agora em paralelo, e respectivamente às correntes de topo e fundo que deixam TA2. Com isso a concentração de CA-P se eleva a 98,5%$_{wt}$ atingindo um nível de especificação suficiente para sua comercialização. A Figura 9 detalha a disposição dos arranjos que perfazem os Sistema A e B.

Os dados reportados por Li, et.al (2014) para efeito de purificação do CA-P não se mostraram suficientes para dar suporte a simulação do Sistema A. Os autores relatam apenas as pressões de operação das colunas (P_{TA1} = 1,0 atm; P_{TA2} = 1,33 kPa), os produtos separados em cada estágio de destilação, além da concentração de CA-P na corrente de fundo de TA2 (90,8%$_{m/m}$). Para preencher as lacunas deixadas por aquela descrição e produzir um modelo consistente, decidiu-se conceber a lógica de simulação que aparece indicada na Figura 9.

Figura 9. Sistema de colunas de destilação e suas pressões de operação

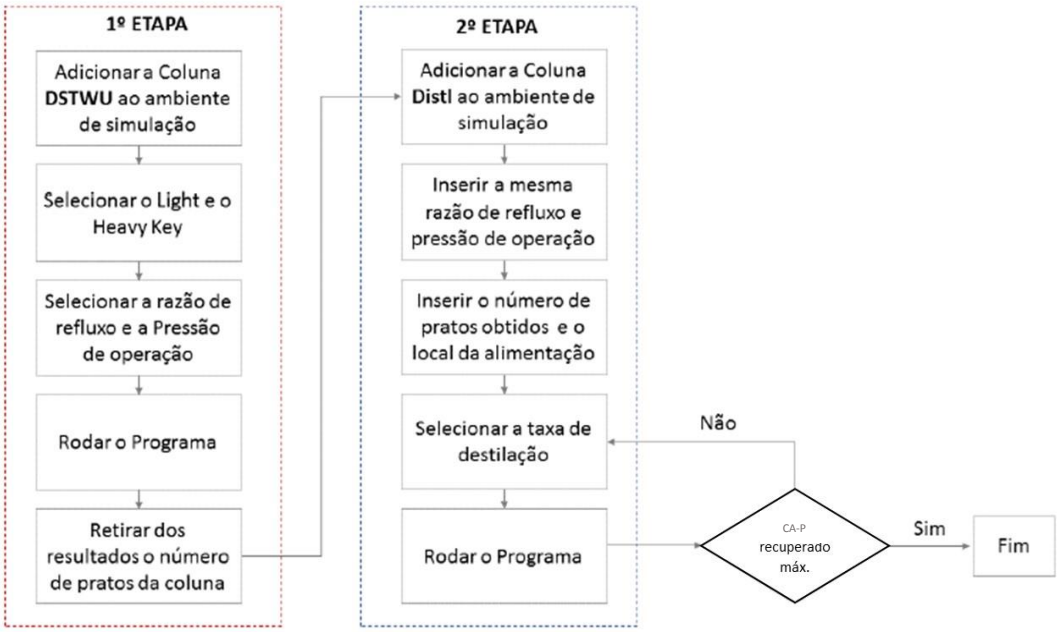


Fonte: próprio autor

A primeira etapa do procedimento consiste da adição de colunas de destilação do tipo (DSTWU) ao ambiente do Aspen Plus. A operacionalização desse módulo se apoia no conceito de *Light and Heavy Keys* (componentes leves e pesados) o qual, se por um lado gera estimativas menos precisas do que as de outras opções disponíveis no software, por outro, requer poucos dados para o dimensionamento do equipamento.

O método de cálculo empregado pela coluna (DSTWU) exige apenas que sejam especificados os componentes a serem recuperados (ou seja, os *Light Key* e *Heavy Key*), e as razões de refluxo do condensador (r_c) e do refervedor (r_{rb}). Para o caso presente optou-se por definir $r_c = r_{rb} = 1,5$ para ambas as torres de destilação. Feito isso foi então possível obter-se os números de pratos teóricos (NUT) para TA1 e TA2.

Figura 10. Esquema da lógica de simulação do estágio de purificação de CA-P para atender às duas condições de análise



Fonte: próprio autor

O atingimento de 98,5%$_{wt}$ de CA-P à saída do Sistema B será possível apenas com a ampliação do arranjo de processo. TB1, que por hipótese opera a vácuo (P = 1,33 kPa) passa a ser alimentada pela corrente de topo de TA2, e busca separar IIIa de CA-P. De sua parte, TB2 recebe a corrente de fundo de TA2 e se ocupa de separar CA-P de TXIB (VIIa). Para tanto, admitiu-se que o processo fosse isobárico com $P_{TB2} = 1,0$ atm.

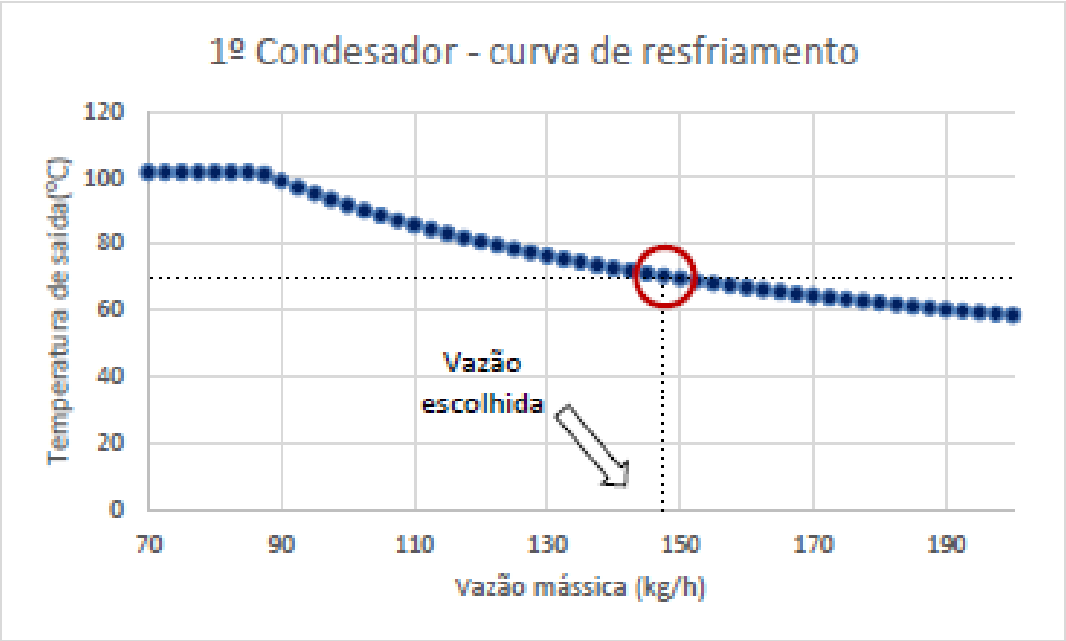
Em termos de simulação, um salto de pureza como aquele a ser atingido por este conjunto sugere o uso de colunas de destilação do tipo (Distl). Mesmo que mais exigente do que (DSTWU) em termos de dados, (Distl) gera resultados precisos e mostra ser mais versátil do que seu congênere. Sua escolha consistiu do passo inicial da segunda etapa da simulação (Figura 10).

O procedimento de cálculo de (Distl) exige que sejam definidos valores para P_{TB1}, P_{TB2}, r_c, r_{rb} e NUT. Como estimativas iniciais de r_c, r_{rb} e NUT foram aplicados os valores obtidos para TA2. No entanto, os refinamentos sucessivos proporcionados pela simulação convergiram para NUT_{TB1} = 14, NUT_{TB2} = 26, nas situações em que $r_c = r_{rb}$ = 2,0 para ambas as colunas de destilação.

6.1.4. Estimativas de consumo de utilidades

Tão logo foram concluídas as simulações do reator, e das unidades de purificação de CA-P foi possível estabelecer as cargas térmicas associadas aos equipamentos de troca de calor que operam como periféricos daquelas unidades, e assim, realizar uma estimativa do consumo global de utilidades. A conduta de cálculo adotada nesta situação consistiu de uma Análise de Sensibilidade, conduzida com auxílio do software Aspen Plus. Variou-se a vazão de cada utilidade com intensidade suficiente para que fosse possível verificar o perfil de comportamento de sua temperatura após ocorrer fornecimento (ou retirada) de calor.

Figura 11. Análise de Sensibilidade para o condensador da 1º coluna destilação

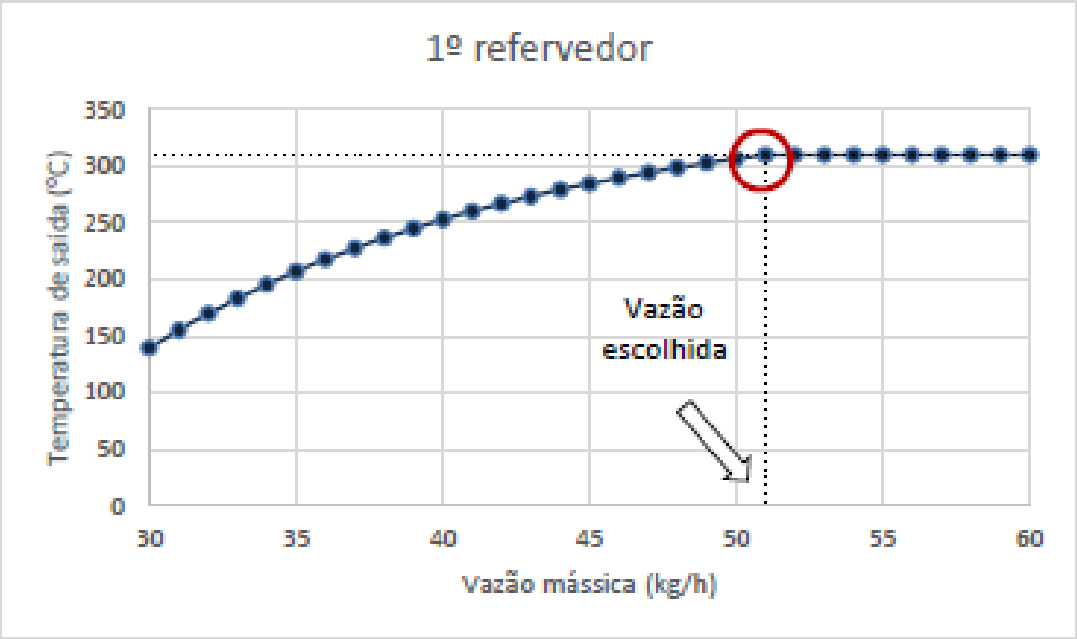


Fonte: próprio autor

O valor selecionado para a vazão da utilidade compreendeu aquele a partir do qual não eram percebidas oscilações de temperatura superiores a 5,0%. Água a T = 25˚C foi selecionada como utilidade fria para o estudo. As temperaturas das correntes de saída dos condensadores foram homogeneizadas em T_c = 70˚C, ao passo que para o reator, este parâmetro foi fixado em T_r = 60˚C (seção 6.1.1). Os resultados dos testes de sensibilidade efetuados para o condensador de TA1 estão indicados a seguir na Figura 11.

Como utilidade quente optou-se por vapor saturado a 10 MPa (T = 310˚C). Além disso, admitiu-se para efeito de estimativa que apenas o calor latente desse fluído seria trocado durante os processos de aquecimento. A Figura 12 apresenta o perfil de variação da função T (^{0}C) = f(Q_{vapor}) para o refervedor instalado no topo de TA1.

Figura 12. Analise de sensibilidade do refervedor da 1º coluna de destilação.



Fonte: próprio autor

Curvas semelhantes às indicadas nas Figuras 11 e 12 foram também construídas para os condensadores e refervedores, e para a camisa de refrigeração do reator. Esses perfis de desempenho encontram-se detalhados nos Apêndices A2 e A3 deste documento. A Tabela 3 registra os valores finais das vazões de utilidades frias e quentes consumidas pelo sistema.

Tabela 3. Consumo em valor mássico das utilidades quentes em frias do processo

Equipamento	Vazão de utilidade (kg/h)	Tipo de utilidade
Condensador 1° coluna	148	Fria
Condensador 2° coluna	285	Fria
Condensador 3° coluna	25,0	Fria
Condensador 4° coluna	92,5	Fria
Reator	170	Fria
Refervedor 1° coluna	51,0	Quente
Refervedor 2° coluna	27,5	Quente
Refervedor 3° coluna	4,00	Quente
Refervedor 4° coluna	16,0	Quente

Fonte: próprio autor

6.2. Modelo do Processo de produção de CA-1

Como já mencionado anteriormente ao longo deste documento, o CA-1 é um coalescente em fase de consolidação junto ao mercado. Por conta disso, seus aspectos tecnológicos e processuais constituem-se em objetos de sigilo industrial. Por outro lado, um estudo como o que se propõe realizar este projeto de Mestrado não pode prescindir de dados de desempenho ambiental para atingir seus objetivos.

A forma encontrada para equilibrar os extremos dessa dicotomia foi descrever em níveis mínimos o processo de produção do ativo, como ocorre ao final do capítulo 5. Por outro lado, fez-se uso de dados primários, obtidos, portanto junto às unidades de produção do produto e de seus intermediários, com vistas a construir um modelo consistente – e ao mesmo tempo harmônico com aquele estabelecido para o CA-P – de seu desempenho ambiental. Esse cuidado também foi observado durante a análise dos resultados obtidos até o momento pelo projeto nas situações em que foi necessário estabelecer uma relação de causa e efeito entre os impactos ambientais quantificados pela ACV e os processos, ou etapas daquela cadeia produtiva.

7. MODELAGEM DO CICLO DE VIDA

7.1. Definição de Objetivo e Escopo

7.1.1. Definição do Objetivo

O objetivo deste estudo de ACV é gerar resultados de desempenho ambiental de duas tintas decorativas, formuladas com ativos diferentes, mas que são capazes de atender a uma função comum. A razão para que as análises sejam conduzidas está em verificar os efeitos ambientais proporcionados pela substituição de um agente de coalescência de uso tradicional no mercado de tintas, por uma molécula concebida com vistas a gerar menores impactos sobre o entorno. O público-alvo a que se destinam esses diagnósticos se compõe de fabricantes e desenvolvedores de tintas, fornecedores de coalescentes, ou de quaisquer outros *stakeholders* que integrem a cadeia de manufatura daquele bem de consumo.

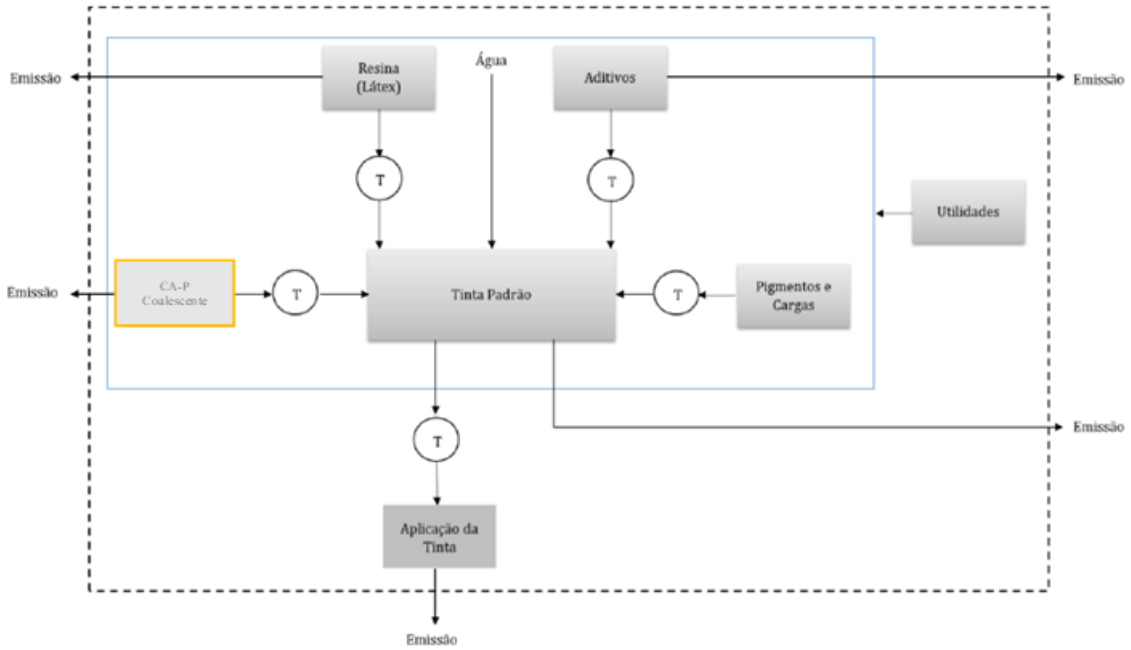
7.1.2. Definição de Escopo

Os objetos de análise considerados pelo estudo são: (i) Tinta decorativa base látex formulada com CA-P; e (ii) Tinta decorativa base látex formulada com CA-1. Doravante esses produtos passarão a ser referidos como ‘Tinta CA-P’, e ‘Tinta CA-1’. Uma vez que a ACV foi aplicada para um escopo do tipo ‘berço-ao-túmulo’ é necessário constituir uma função (comum) para o objeto de análise. No caso presente esta foi estabelecida como sendo: ‘*Proteger uma superfície contra intempéries, evitando seu desgaste*’. Tendo em conta o contexto, a Unidade Funcional passou a ser: ‘*Proteger uma superfície de 50 m^2 contra intempéries, evitando seu desgaste, ao longo de 5 anos*’.

Dados coletados junto ao fabricante referendam que: (i) cada litro de tinta é suficiente para proteger 18 m^2 de superfície por demão; (ii) são necessárias três demãos de tinta para que se obtenha um acabamento adequado da superfície; (iii) ambos os recobrimentos têm desempenhos técnicos idênticos na etapa de aplicação; (iv) a tinta de base látex apresenta densidade média ρ = 1,30 g/cm^3 a despeito do coalescente usado em sua formulação; e (v) em condições normais de exposição, o tempo médio entre duas aplicações de tinta com vistas à manutenção da superfície é de 5 anos. Tendo em conta essas premissas, o Fluxo de Referência corresponde a 8,30 L (ou 10,8 kg de tinta), sendo comum para ambas as tintas consideradas.

No que se refere à composição dos Sistemas de Produto, uma análise de conteúdo das Figuras 13 e 14 faz perceber que a única diferença entre as cadeias produtivas das Tintas CA-P e CA-1 está nos processamentos dos coalescentes. Tal nível de similaridade é inclusive assegurado por axiomas originais do estudo, indicados na seção 4.3 – itens (ii) e (iii). Da mesma forma, operações locadas a jusante da formulação da tinta – referentes ao seus transporte e aplicação –, são também idênticas (seção 4.3 – item iii). Assim, o Sistema de Produto associado com a Tinta CA-P compreende estágios de: (i) produção de resina (ou látex); (ii) obtenção de pigmentos, cargas, e outros aditivos; (iii) geração de utilidades de processo; (iv) síntese de CA-P; (v) formulação da Tinta CA-P; e, (vi) aplicação desse recobrimento.

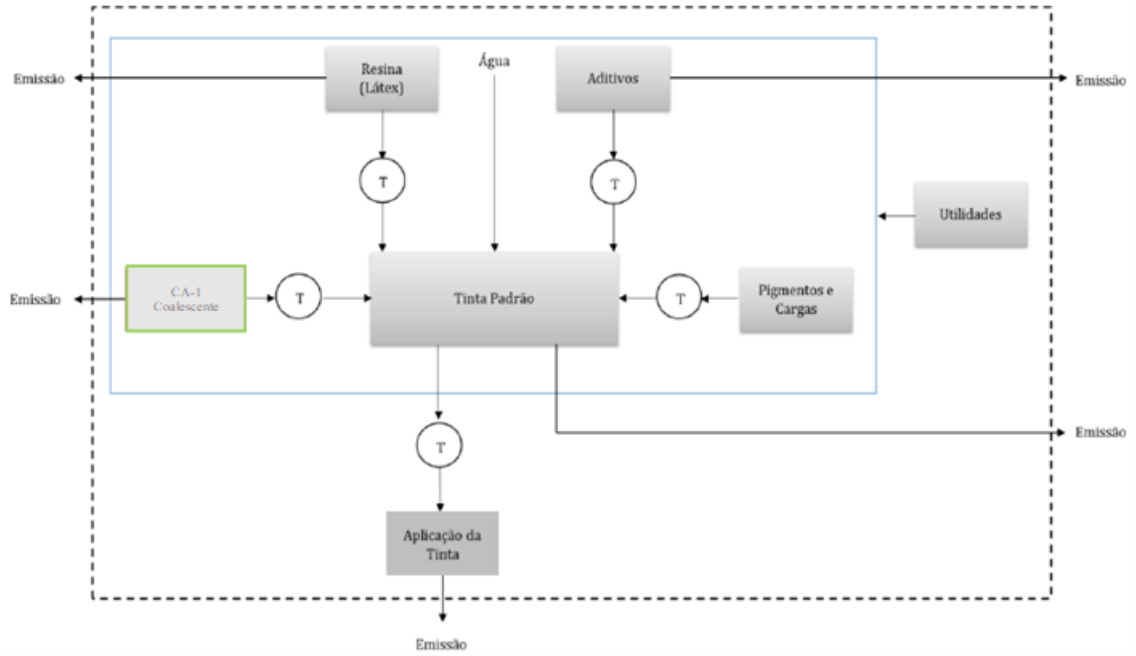
Figura 13. Representação esquemática do Sistema de Produto para Tinta CA-P



Fonte: próprio autor

Seguindo a mesma linha de abordagem, o Sistema de Produto elaborado para a Tinta CA-1 se constitui dos seguintes processos elementares: (i) produção de resina; (ii) obtenção de pigmentos, cargas, e outros aditivos; (iii) geração de utilidades de processo; (iv) síntese de CA-1; (v) formulação da Tinta CA-1; e, (vi) aplicação do recobrimento.

Figura 14. Representação esquemática do Sistema de Produto para Tinta CA-1



Fonte: próprio autor

Nos dois casos, o processo de exclusão de aspectos ambientais seguiu os critérios recomendados pela norma ABNT NBR ISO 14044 (ABNT, 2009b) referentes as contribuições cumulativas mássicas e energéticas. Os patamares de exclusão foram fixados em 2,0% do total de entradas e saída, para quaisquer dos requisitos. Além disso, quando coube foram também observados critérios de relevância ambiental. Todas as situações multifuncionais foram originárias de fontes de dados secundários extraídos da Base de Dados Ecoinvent® versão 3. Quando isso ocorre a conduta regular é fazer uso do procedimento de Alocação usando como critério o valor econômico dos coprodutos gerados.

Quanto ao tipo de dados, aqueles usados para descrever consumos e emissões da síntese do CA-P procederam de fontes secundárias (seção 6.1) pela impossibilidade de se obter informações de fontes primárias por parte da empresa fabricante do coalescente. Já os dados que retratam o perfil ambiental da produção de CA-1 são secundários e primários (seção 6.2) fornecidos pela empresa fabricante do coalescente. Em termos de qualidade, os dados primários foram coletados ao longo do biênio 2015 – 2016. De outra forma, e como já se poderia supor de antemão, a cobertura temporal para dados secundários esteve condicionada ao grau de atualidade dos ICVs disponíveis na Base de Dados Ecoinvent®.

No tocante à cobertura geográfica, considerou-se que a obtenção de CA-1, e dos ativos que o constituem, ocorreriam em Coatzacoalcos no México, e que as sínteses de CA-P e de seus insumos, teriam lugar em Longview - Texas nos Estados Unidos. Já as formulações e aplicações das Tintas CA-P e CA-1 acontecem na cidade de McCarran - Nevada nos Estados Unidos. Os critérios que determinaram essas localidades são de fundo mercadológico.

Por fim, em relação a cobertura tecnológica, a produção de CA-1 segue as práticas e condutas exercitadas pelo fabricante. Pode-se dizer, porém, que estas são consonantes com a descrição do processo que consta do capítulo 5. Em contrapartida, foram sempre adotadas tecnologias médias para retratar padrões operacionais de processos para a obtenção de dados secundários. A exceção a essa conduta ocorreu por conta da obtenção de CA-P, para a qual os aspectos ambientais foram determinados por meio de simulação.

O estudo fez uso de dois métodos de AICV. Desde o primeiro deles, ReCiPe – Midpoint (H) v 1.12 – foram avaliadas as categorias de impacto de Mudanças Climáticas, Toxicidade Humana, Depleção de Água e Depleção Fóssil. Já o método TRACI 2.1 foi usado para aferir o desempenho de ambos os Sistemas de Produto em termos de Formação de Oxidantes Fotoquímicos (FOF), também denominada de *Smog*. A necessidade de se avaliar impactos derivados das aplicações das tintas foi o principal motivador para o uso de TRACI 2.1, dado que o método dispõe de fatores de caracterização para os compostos emitidos durante aquele estágio.

7.2. Análise de Inventário (ICV)

7.2.1. ICV da produção de CA-P

Concluídas as simulações e tendo obtido os valores e condições de consumo de utilidades frias e quentes foi então possível elaborar o ICV do processamento de CA-P. Este conjunto aparece indicado a seguir na Tabela 4 e está expresso em valores relativos para uma unidade (base mássica) de corrente de CA-P produzido. A normalização foi realizada tendo em conta o valor da corrente de maior grau de pureza em CA-P.

Para o Sistema A os valores foram normalizados a partir da corrente de topo de TA2 cuja pureza de CA-P foi estimada em 90,8%$_{m/m}$. Para o Sistema B a normalização ocorreu para uma base de cálculo constituída pela somatória das correntes de fundo de TB1 e de topo de TB2, desde onde emana CA-P 98,5%$_{m/m}$. O incremento no consumo de utilidades decorre da busca por maior concentração de CA-P no Sistema B. Além de aumento de consumo de utilidades houve também maior consumo de matérias-primas nesse caso. Isso ocorre, pois durante a purificação parte do CA-P se perde nas correntes de topo de TB1 e de fundo de TB2. Dessa forma, faz-se necessário consumir mais matéria-prima para que seja produzida uma mesma quantidade de CA-P.

Tabela 4. Consumos estimados de matéria e energia para produção de CA-P tendo em conta os Sistemas A e B – valores relativizados para 1,0 unidade de CA-P

	Sistema A	Sistema B	Variação devido a inclusão de Sistema B (%)
	Entradas de matéria		
Isobutiraldeido	1,152	1,416	(+) 22,8
NaOH	0,037	0,045	(+) 22,8
HCl	0,040	0,049	(+) 22,8
	Entradas de energia		
Vapor (caldeira operada com GN [(*)])	3,014	4,646	(+) 54,1
Água de resfriamento	0,971	1,426	(+) 46,8
	Produtos		
CA-P (100% pureza)	0,908	0,985	(+) 9,40
Vazão mássica da corrente de CA-P	1,000	1,000	–

Legenda: [(*)]: GN: gás natural

Fonte: próprio autor

A fabricação de NaOH foi modelada pelo conceito de tecnologia média. Segundo Kumar (2015) as rotas de processamento de NaOH mais frequentes nos Estados Unidos, são diafragma (64%), mercúrio (11%) e membrana (25%).

O processamento de HCl foi modelado quanto a tecnologia como se o ácido fosse obtido na totalidade dos casos pela reação hidrogênio e o cloro líquido. O vapor que é consumido no Sistema A serve apenas aos refervedores de TA1 e TA2. Esse raciocínio se repete para o Sistema B no tocante aos refervedores de TB1 e TB2.

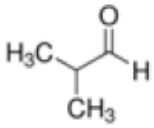
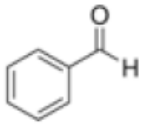
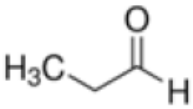
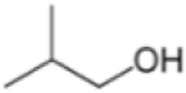
No entanto, deve-se sempre ter em conta que o CA-P a 98,5%$_{m/m}$ será obtido quando o Sistema B operar em sua plenitude; isso implica que para aquele arranjo os consumos de vapor relacionados a TA1 e TA 2 devam também ser computados para efeito de consumos energéticos.

Quanto às utilidades frias o ICV considerou apenas a restituição da água no ciclo (*'make-up'*). Esse montante totalizou 11% do consumo total de água do sistema, e remete à perda total de água da unidade. No sistema A são consideradas as utilidades necessárias para resfriamento do reator, e dos condensadores de TA1 e TA2. Quando a esse valor se somam as demandas hídricas dos condensadores de TB1 e TB2 atinge-se a perda total de água para o Sistema B.

Na Base de Dados Ecoinvent® não está disponível um ICV que traga os aspectos ambientais associados a síntese de isobutiraldeido. No entanto, o Ecoinvent dispõe desses mesmos dados para outras moléculas cujas características e propriedades químicas guardam semelhança como o isobutiraldeido, podendo por isso serem seus substitutos no caso de indisponibilidade comprovada de informações. Na Tabela 5 são listadas essas moléculas, bem como apontados os motivos que as credenciam como sucedâneos potencias daquela matéria-prima do processamento de CA-P.

O benzaldeido e o propanal são compostos orgânicos que integram a mesma classe química que o isobutiraldeido (aldeídos). Além dessa semelhança, o propanal possui certa paridade de geometria com o isobutiraldeido. Outro ponto de confluência entre propanal e isobutiraldeido reside no fato de ambos utilizarem o propeno como principal matéria-prima de síntese. Tais argumentos foram considerados suficientes para que se elegesse o propanal como substituto do isobutiraldeido para efeito de modelagem da produção desse insumo. Deve-se destacar que após o modelo de Sistema de Produto ter sido validado, foram realizadas Análises de Sensibilidade para aferir a magnitude das incertezas que essa decisão acarretou.

Tabela 5. Substituintes potenciais do isobutiraldeido e suas semelhanças com essa molécula para efeito de modelagem

Componete	Molécula	Semelhança
Isobutiraldeido		-
Benzaldeido		Classe
Propanal		Classe e similaridade molecular
Isobutanol		Semelhança processual

Fonte: próprio autor

Como resultado desse processo de avaliação, constatou-se que adotar a produção de propanal como alternativa à de isobutiraldeido teria influência não superior a 2,5% dos impactos gerados nas diferentes categorias em análise, no caso limite em que a dosagem de C_4H_8O fosse em doze vezes mais elevada do que a requerida pelo fluxo de referência e estimada via simulação. Esse resultado apenas referendou a opção que fora efetuada.

Para esse estudo admitiu-se que o CA-P seria produzido em uma planta localizada em Longview. Por isso mesmo, o transporte associado ao isobutiraldeido é nulo, dado que, por meio de outra premissa do estudo, admitiu-se que o ativo seria produzido na mesma planta em que se obtém CA-P.

O fornecedor de NaOH e HCl manufatura tais insumos na unidade localizada em Henderson nos Estados Unidos. A distância entre as duas cidades é de 58,6 km, e a via rodoviária consiste do modal de transporte mais usual para realizar esse deslocamento. Por fim, estimou-se que o transporte do CA-P até a unidade de produção de tinta ocorreria por via ferroviária. Nesse caso, a distância entre o produtor do coalescente tradicional e empresa produtora de tinta atinge 3159 km.

7.2.2. ICV da produção de CA-1

Tal como já fora reportado anteriormente neste documento, o modelo que descreve a síntese de CA-1 foi elaborado a partir de dados primários fornecidos pelo fabricante desta molécula. O ICV gerado a partir dessa ação aparece representado na Tabela 6. As faixas de valores remetem à produção de 1,0 kg de produto. Por questões de confidencialidade, os índices referentes a emissões não podem ser dados a conhecer, muito embora tenham sido incorporados ao modelo que representa o processamento de CA-1. Seus efeitos foram assim considerados para efeito de verificação do desempenho ambiental daquele processo.

Tabela 6. Consumos de matérias-primas e insumos para produção de 1,0 kg CA-1

Insumo	Unidades	Quantidade
	Entradas de matéria	
Hidróxido de Potássio 50%$_{m/m}$	g	1,25 - 3,75
Ácido Acético Glacial	g	1,00 - 4,00
Óxido de Eteno	g	100 - 500
Nitrogênio	g	5,00 - 10,0
Fenol	g	450 - 750
Água de Resfriamento	g	500 - 750
	Entradas de energia	
Vapor	kg	0,25 - 0,60
Energia Elétrica	kWh	0,050 - 0,300
	Produto	
CA-1	kg	1,00

Fonte: próprio autor

O transporte da solução de hidróxido de potássio 50%$_{m/m}$ foi modelado tendo em conta dois fornecedores. O primeiro deles totaliza 8,3% da oferta do álcali, e fornece o insumo por modal rodoviário desde a Cidade do México (MX-DF) até Coatzacoalcos, por cerca de 627 km.

O segundo transporte também ocorre por via rodoviária e corresponde a cerca de 92% do KOH usado na síntese de CA-1. Nesse caso, o ativo é produzido no Tennessee nos Estados Unidos e percorre 3149 km até chegar a Coatzacoalcos.

O transporte de ácido acético glacial foi tratado de forma semelhante. O insumo é produzido no Texas nos Estados Unidos e se desloca por 1836 km em caminhão até chegar a Coatzacoalcos. O fornecimento de óxido de eteno é também proporcionado por dois fornecedores. O primeiro deles, que supre cerca de 70% da demanda está localizado a 2,9 km da planta de processamento de CA-1 também em Coatzacoalcos. O segundo fornecedor, que responde pelo restante da oferta de éster, localiza-se na mesma região, porém, a 3,4 km. Também para esses casos selecionou-se modal rodoviário para os transportes. O Nitrogênio líquido ($N_{2,(l)}$) chega à planta em caminhões após percorrer 15 km. A logística estabelecida para o transporte de fenol (C_6H_5OH) segue o mesmo diapasão: para atender ao processo de obtenção de CA-1 este orgânico cíclico transita 4334 km por via rodoviária.

7.2.3. ICV da geração de eletricidade

As matrizes elétricas de México e Estados Unidos foram obtidas da Base de Dados Ecoinvent® e atualizadas para 2015 a partir de informações publicadas pela Internacional Energy Agency – IEA (IEA, 2015). As Tabelas 7 e 8 trazem valores de Ofertas Internas de Energia Elétrica para ambos os países.

Tabela 7. Oferta Interna de Energia Elétrica para o México (ano base: 2015)

Insumo	Quantidade (%)
Hidráulica	9,43
Gás natural	55,8
Derivados de petróleo	16,1
Carvão e derivados	10,8
Nuclear	3,97
Outros	3,90

Fonte: IEA (2015)

Tabela 8. Oferta Interna de Energia Elétrica para os Estados Unidos (ano base: 2015)

Insumo	Quantidade (%)
Hidráulica	6,74
Gás Natural	26,9
Biomassa	1,36
Derivados de petróleo	0,86
Carvão e derivados	37,7
Nuclear	19,1
Eólica	3,94
Fotovoltaica	3,40

Fonte: IEA (2015)

7.2.4. ICV da produção de vapor na síntese de CA-1

A produção de vapor na planta de Coatzacoalcos em que é produzido o CA-1 ocorre a partir da queima de óleo diesel. Cada 1,0 t desse combustível gera 15 t de vapor superaquecido (P = 9,0 kgf/cm^2 e T = 179,4°C). Para efeito de consumo e de geração de aspectos ambientais o processo foi modelo a partir do ICV '*Light fuel oil, burned in boiler 10kW, non-modulating/CH U*' que se encontra disponível na Base de Dados Ecoinvent®. Os parâmetros que foram indicados antes serviram para adaptar aquele conjunto de dados às condições reais em que o processo se desenvolve.

7.2.5. ICV da produção das tintas CA-P e CA-1

As produções das Tintas CA-P e CA-1 foram modeladas com dados fornecidos pelo fabricante. A Tabela 9 descreve a formulação adotada para ambos os produtos em estudo.

Tabela 9. Composição das Tintas CA-P e CA-1 em termos de seus grupos de constituintes

Insumo	Quantidade (% $_{m/m}$)
Água Potável	37,5
Aditivos	5,30
Pigmentos e cargas	25,0
Resina (látex)	31,0
Coalescente	1,20
Total	100

Fonte: próprio autor

O trajeto percorrido pelo CA-P desde Longview até McCarran, onde a Tinta CA-P é formulada perfaz um total de exatos 3159 km. O deslocamento do CA-1 chega a ser ainda mais longo, atingindo 4496 km desde Coatzacoalcos até McCarran. Para ambos os casos se definiu o modal rodoviário como meio de transporte usado nessas operações.

7.2.6. ICV da aplicação das tintas

Para os estágios de aplicação das tintas considerou-se que apenas as emissões de coalescentes causariam impactos ambientais. A caracterização das perdas de CA-1 ocorreu a partir do Fenilglicol. Ensaios laboratoriais realizados em condições idênticas as tratadas neste estudo levam a concluir que 52% do coalescente aplicado seria emitido para a atmosfera. Por outro lado, registros da literatura técnica reportam que as perdas de CA-P após a aplicação da tinta padrão são da ordem de 90% (Eastman, 2011). Neste estudo, a molécula de CA-P foi modelada como sendo o composto 2,2,4-trimetil-1,3-pentanodiol monoisobutirato.

8. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Decidiu-se que a Avaliação de Impacto ocorreria de forma comparativa, usando-se resultados ambientais de CA-P e CA-1. Como a modelagem de CA-P foi realizada em dois níveis, foram estabelecidas duas situações possíveis para confrontação. A primeira delas consiste da comparação entre a tinta CA-1 e a tinta CA-P que utiliza coalescente com 90,8%$_{m/m}$ de pureza cujo modelo – que a partir de agora passa a ser referido como Sistema A – foi gerado a partir de informações publicadas por Li, et.al (2014). A segunda situação de análise compara a tinta CA-1 com CA-P em que o coalescente apresenta 98,5%$_{m/m}$ de pureza (Sistema B). Em qualquer desses casos a avaliação de impactos teve um enfoque do tipo 'berço ao túmulo'.

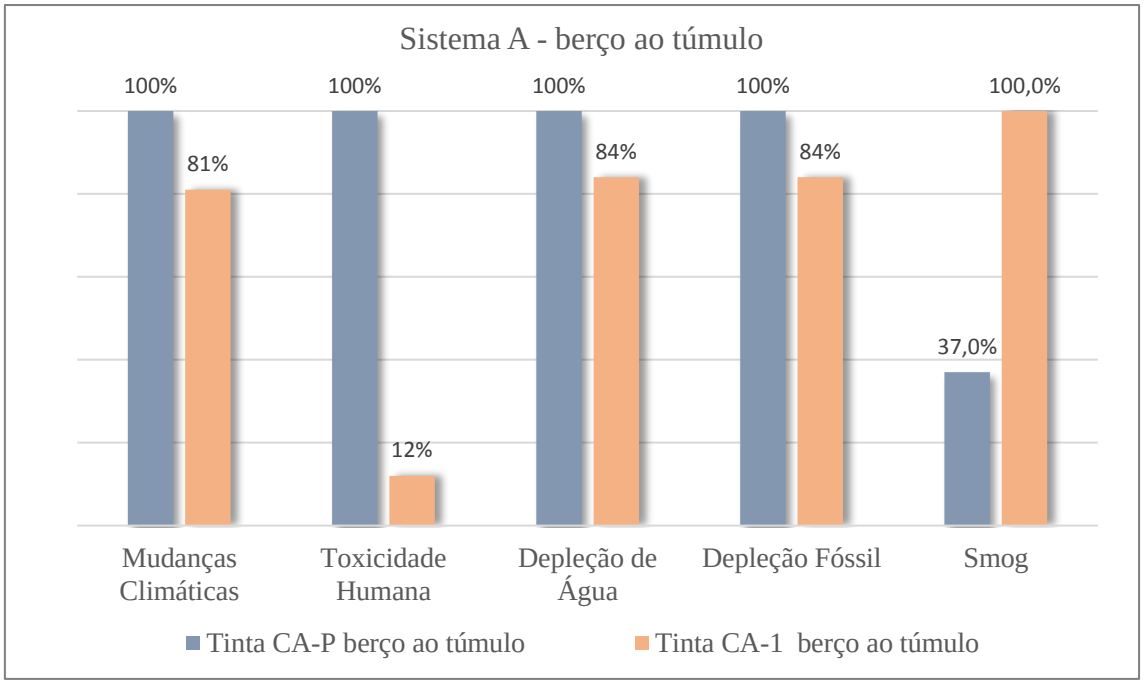
Optou-se também por fazer uma avaliação do impacto em dois níveis. No primeiro nível verificou-se o desempenho ambiental das tintas apenas nos limites de suas cadeias de produção. No segundo nível o impacto foi avaliado por uma abordagem 'do portão ao túmulo'. Essa subdivisão ocorreu a fim de que se pudesse conhecer em mais detalhes os impactos associados a etapa de uso dos produtos que são objetos de estudo.

8.1. Avaliação de Impacto Ambiental – Sistema A

O CA-1 é produzido em Coatzacoalcos e transportado até McCarran onde a tinta é produzida, e aplicada. Já o Sistema A foi modelado para as condições americanas, sendo produzido em Longview para depois seguir a McCarran. A Figura 15 descreve o perfil ambiental normalizado da comparação entre a tinta padrão de mercado e a tinta utilizando CA-1 com abordagem *berço ao túmulo*. Para ambas as tintas, foi considerada a unidade funcional de 50 m² de superfície sobre a qual deve ser aplicada a tinta; nesse contexto, o fluxo de referência para cada estudo correspondeu a 10,8 kg de produto.

Foi possível observar que a tinta que utiliza o coalescente CA-1 tem desempenho superior em quatro das categorias de impacto sob análise; a exceção esteve por conta do Smog. Apesar da emissão de CA-P (90%) ser superior à de CA-1 (52%), o fator de impacto do primeiro coalescente (80,1 g O_{3eq}/kg CA-P) para Smog, é bastante inferior ao de seu congênere (4,49 kg O_{3eq}/kg CA-1). Essa condição justifica o pior desempenho ambiental do CA-1 na referida categoria.

Figura 15. Perfil ambiental da tinta padrão (Sistema A) utilizando CA-1 – berço ao túmulo



Fonte: próprio autor

A Tabela 10 descreve os perfis de desempenho ambiental, em termos absolutos, das duas tintas estudadas pela ACV, para um escopo de aplicação da técnica com extensão 'berço ao túmulo'.

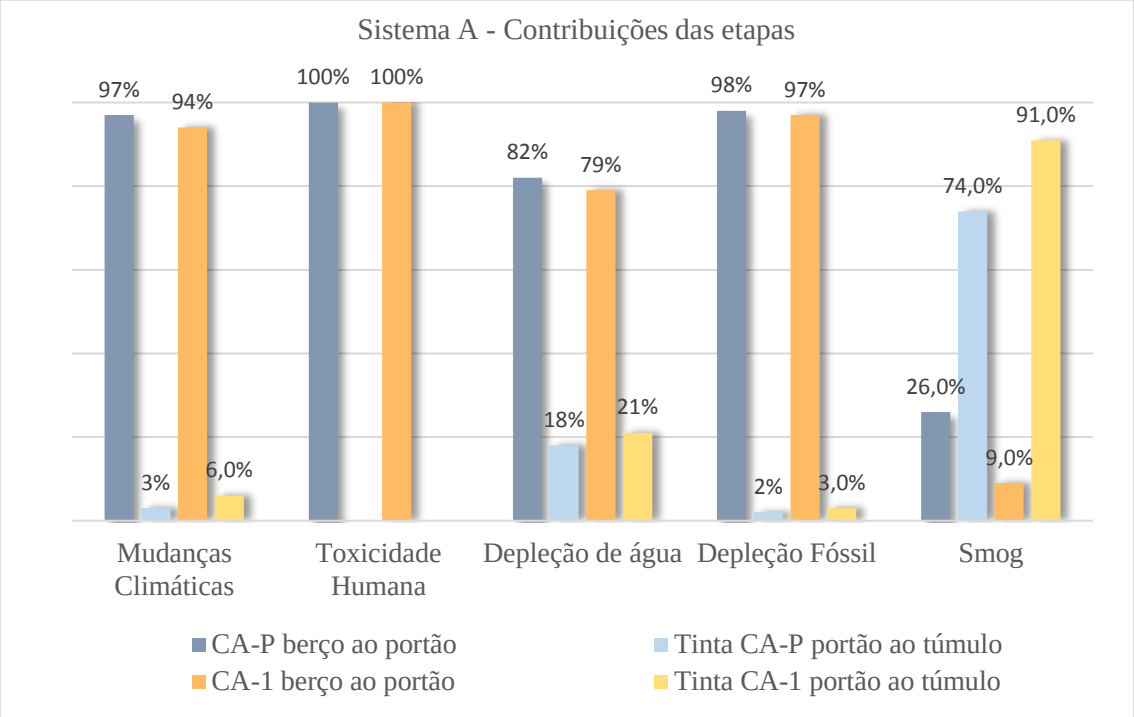
Tabela 10. Perfil ambiental para 10,8 kg da tinta para o Sistema A – abordagem berço ao túmulo

Categoria de impacto	Unidade (por UF)	Superfície pintada/ Tinta CA-P (90.8%)	Superfície pintada/ Tinta CA-1
Mudanças Climáticas	g CO_2 eq	537	434
Toxicidade Humana	g 1,4-DB eq	11,1	13,0
Depleção de água	L	25,0	21,0
Depleção Fóssil	g óleo $_{eq}$	323	272
Smog	g $O_{3\ eq}$	122	332

Fonte: próprio autor

A Figura 16 descreve as contribuições de CA-1 e do Sistema A em cada qual das categorias de impacto analisadas. É possível notar que, em termos de amplitude do ciclo de vida, os aportes foram distribuídos segundo duas perspectivas naquele dispositivo: (i) 'do berço ao portão da planta produtora do coalescente'; e (ii) 'desde este mesmo estágio, até o túmulo'. Percebe-se assim que, a exceção da categoria Smog, o ciclo de manufatura contribuiu sempre de forma mais significante para os impactos ambientais globais da tinta do que sua aplicação.

Figura 16. Contribuição de impacto nas diferentes etapas do ciclo de vida dos coalescentes em suas produções e seus usos em tinta – Sistema A

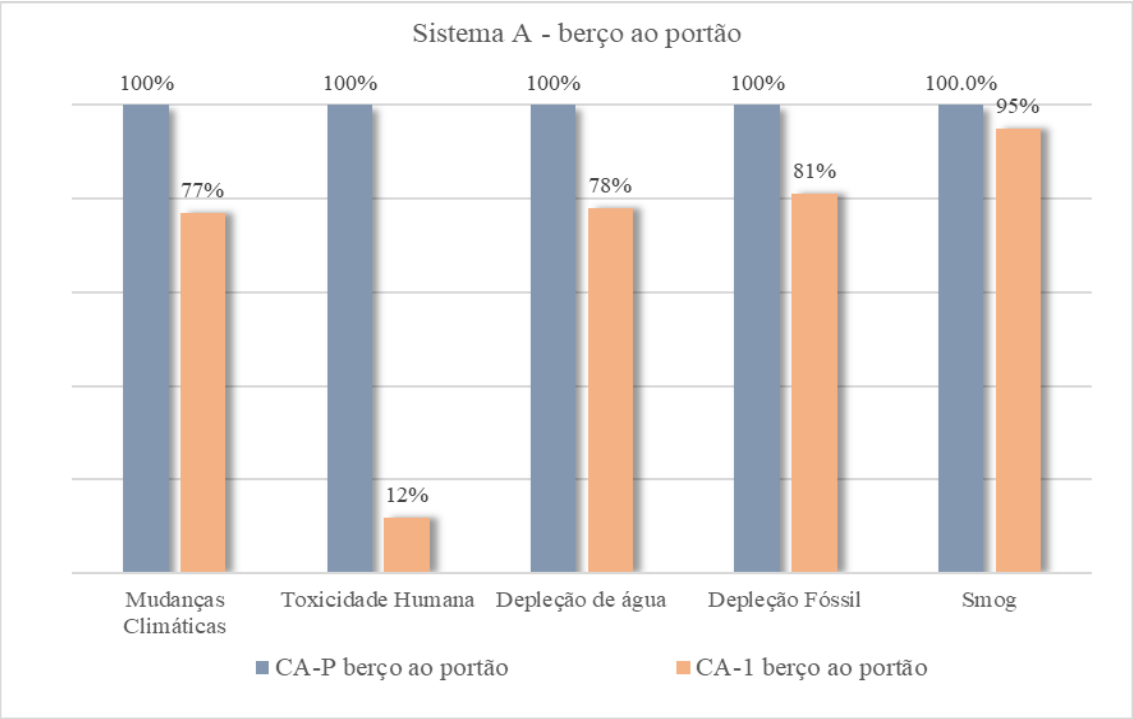


Fonte: próprio autor

O fato de os impactos observados no âmbito da categoria Smog se concentrarem no uso do produto não chega a surpreender. Isso ocorre pois na aplicação da tinta ocorre emissão de parte parcial dos coalescentes. Para a tinta CA-1 a evaporação do coalescente CA-1 é de 52%$_{m/m}$, ao mesmo tempo que para a tinta CA-P são lançados para o ar 90%$_{m/m}$ do coalescente CA-P. Essas emissões representam a parcela majoritária de impactos para a categoria. Apesar de o CA-P apresentar taxa de emissão mais elevada do que CA-1, o fator de caracterização para a categoria de impacto Smog deste último é superior ao do homólogo. Essa diferença, traduziu-se em maior impacto da tinta utilizando CA-1. Esses aspectos serão explorados mais adiante durante o primeiro nível de discussão para Smog.

Quando considerado como fronteira do produto o portão da fábrica produtora do coalescente, o CA-1 possui um desempenho ambiental superior em todas as categorias de impacto. Essa colocação é evidenciada na Figura 17, onde foi mostrado o perfil ambiental do berço ao portão.

Figura 17. Perfil ambiental CA-1 (Sistema A) berço ao portão da fábrica produtora do coalescente



Fonte: próprio autor

O capítulo de Discussão segue desenvolvendo a Análise Ambiental dentro de seus domínios de validade (ver seção 4.4). Essa abordagem identifica os precursores para cada categoria de impacto em que as tintas CA-P e CA-1 são avaliadas e aponta especificidades dos processos que compõem cada ciclo de vida que justifiquem esses efeitos.

8.1.1. Mudanças Climáticas

No que se refere a Mudanças Climáticas houve uma redução de 35% no total de emissões quando há substituição do CA-P pelo CA-1. Para a tinta padrão que utiliza CA-P em sua composição, o maior contribuinte dessa categoria é a produção de eletricidade (31%). Esta se deve ao uso de uma matriz energética (grid EUA) que utiliza carvão e gás natural como fontes de produção de energia térmica.

Além disso, a produção do isobutiraldeido tem um efeito expressivo, onde a queima de gás natural (6,9%) e o uso de combustíveis leves (20%) ambos para a produção de calor para o processo geram emissões significantes de Gases de Efeito Estufa. A queima de gás natural na etapa de produção de CA-P teve uma relevância menos significativa que outros fluxos elementares, sendo a contribuição da queima de 4,3%.

Na tinta que utiliza CA-1 como coalescente, os impactos para essa categoria estão associados à etapa de produção das matérias-primas utilizadas, particularmente o Fenol. Além disso, a manufatura de Benzeno contribui com 27% e a de propileno com outros 12% do impacto total. Note-se que Benzeno e Propileno são ativos essenciais da cadeia produtiva do fenol. A produção etileno – utilizado na síntese do óxido de etileno – gera um aporte de 15% de impacto, e o transporte ferroviário associado ao deslocamento de CA-1 até a fábrica de produção de tinta, são também contribuintes expressivos para essa categoria. Os principais precursores do impacto, em termos de substância, para MC são apresentados na Tabela 11.

Tabela 11. Principais precursores do impacto para Mudanças Climáticas

Substância	Unidade (por UF)	Superfície pintada/ Tinta CA-P (90.8%)	Superfície pintada/ Tinta CA-1
$CO_{2,\ fóssil}$	g $CO_{2\ eq}$	481	381
CH_4	g $CO_{2\ eq}$	37,0	2,00

Fonte: próprio autor

Para a tinta padrão, a etapa de geração de energia a partir de fontes derivadas de carvão que compõem o grid US contribuiu com 21% do total de emissões de $CO_{2,\ fóssil}$; o processo de queima de combustíveis leves para a obtenção de calor usado na produção de isobutiraldeido aporta 20% para o total de emissões de $CO_{2,\ fóssil}$.

Tais emissões tiveram uma redução de 21% no caso em que há substituição do CA-P pela formulação CA-1 devido: (i) ao isobutiraldeido não ser insumo de produção do coalescente CA-1, e (ii) a uma demanda menor de eletricidade que a de CA-P. No caso da tinta CA-1, emissões derivadas da produção de benzeno usado na obtenção do fenol contribuiram com 22% para o total de emissões para MC.

8.1.2. Toxicidade Humana

Para a categoria de impacto de Toxicidade Humana o consumo de petróleo bruto e de gás natural detêm as maiores contribuições. Na tinta CA-P o consumo de óleo cru está associado com produção do etileno, matéria-prima do isobutiraldeido. Esse arranjo resulta em uma contribuição para TH de 40%. O gás natural é consumido na síntese de etileno. As características e eficiências de seu processamento (extração do gás bruto, refino e transporte), bem como a quantidade consumida para geração de C_2H_4 resultam em 48% do impacto total para TH.

Para a tinta que faz uso de CA-1, o consumo de petróleo bruto está associado a produção do ativo e, nesse caso, a contribuição para o total de impacto atinge 54%. A matriz energética mexicana (grid MX) faz uso de gás natural e esse consumo corresponde a 17% do impacto da tinta CA-1 para a categoria. Os principais precursores do impacto de Toxicidade Humana, estão indicados na Tabela 12 junto com seus respectivos aportes.

Tabela 12. Principais precursores do impacto para TH

Substância	Unidade (por UF)	Superfície pintada/ Tinta CA-P (90.8%)	Superfície pintada/ Tinta CA-1
Ba (água)	g 1,4-DB $_{eq}$	96,5	9,56
Hg (ar)	g 1,4-DB $_{eq}$	4,00	0,43

Fonte: próprio autor

Emissões de bário (Ba) para a água sofreram redução de 90%. Estas resultam da extração de gás natural associado à obtenção do isobutiraldeido no caso da tinta padrão, e de óleo cru usado na fabricação de diesel e combustíveis usados nos processos de obtenção de ambas as tintas. Em termos de perdas de mercúrio (Hg) percebeu-se um decréscimo de 89% como consequência da redução no consumo desse metal na fabricação de HCl e NaOH, todos eles, ativos associados ao processamento CA-P.

8.1.3. Depleção de Água

Para a tinta padrão a depleção de água está atrelada à produção de isobutiraldeido cuja contribuição para esse impacto é de 71%. Há também para essa formulação de tinta um consumo de água industrial associado a incorporação de água à tinta, e a utilidade fria utilizada na produção do CA-P. Por conta do make-up dessa utilidade a contribuição é de 18% para Depleção de Água.

Na tinta CA-1 a água incorporada ao produto contribui de maneira mais expressiva do que na tinta padrão (21%), apesar da quantidade de água incorporada ao produto ser a mesma. Os principais consumos de água ocorrem ao longo da cadeia produtiva do fenol, quando o recurso é usado como carregador de energia (como vapor). Mais precisamente isso ocorre nas sínteses de Cumeno e Benzeno, e se traduzem em aportes, respectivamente de 16% e 27% para esta categoria

8.1.4. Depleção Fóssil

Nessa categoria de impacto a depleção de gás natural tem um papel expressivo (35%) para tinta padrão. Esse consumo de gás natural está tanto associado ao processo de produção de etileno como a geração de eletricidade nos EUA. Além de gás natural, o óleo pesado tem um aporte de 18% para essa categoria de impacto, devido ao consumo na síntese do CO, um insumo de produção de isobutiraldeido.

Para tinta CA-1 os principais contribuintes de Depleção Fóssil remetem mais uma vez ao processamento de Fenol, nas formas das participações das produções de Cumeno (20%) e Benzeno (36%). O Etileno (produção de óxido de etileno) contribui com outros 24% desse impacto. Os resultados mais expressivos para a categoria constam da Tabela 13.

O consumo de petróleo teve um aumento de 21% devido à produção de benzeno que por sua vez é usado na obtenção do fenol, ativo de processo importante na obtenção do CA-1; esse estágio respondeu pelo consumo de 23% do total de óleo cru e 13% do total de gás natural. Reduções no consumo de gás natural de 82% foram obtidas devido a que não há consumo de isobutiraldeido no caso em que a Tinta CA-1 é aplicada.

Tabela 13. Principais precursores do impacto para DF

Substância	Unidade (por UF)	Superfície pintada/ Tinta CA-P (90.8%)	Superfície pintada/ Tinta CA-1
Óleo cru	g $óleo_{eq}$	135	163
Gás natural	g $óleo_{eq}$	148	26,0

Fonte: Próprio autor

8.1.5. Smog

Essa categoria é dominada pela etapa de aplicação da tinta, onde há emissão dos coalescentes. Na tinta CA-1 a aplicação tem as perdas de Fenilglicol como a contribuição majoritária. Já no caso da tinta padrão a participação associada à emissão de CA-P (2,2,4-trimetil-1,3-pentanodiol monoisobutirato) foi prevalente. Os principais precursores para essa categoria são apresentados na Tabela 14.

Tabela 14. Principais precursores do impacto para Smog

Substância	Unidade (por UF)	Superfície pintada/ Tinta CA-P (90.8%)	Superfície pintada/ Tinta CA-1
2,2,4-trimetil-1,3-pentanodiol monoisobutirato	g O_3 eq	89,9	–
NO_x	g O_3 eq	25,4	28,1
Fenilglicol	g O_3 eq	–	302

Fonte: próprio autor

As perdas de 3-hidroxi-2,2,4-trimetilpentil-1-isobutirato e 2-fenoxietanol ocorrem durante a aplicação das tintas padrão e com CA-1, respectivamente. No primeiro caso a etapa contribuiu com 76% para o total de emissões de 3-hidroxi-2,2,4-trimetilpentil-1-isobutirato. Por outro lado, no caso da aplicação da Tinta CA-1 a etapa de aplicação teve uma contribuição de 91% para o total de emissões de 2-fenoxietanol. Os lançamentos de NOx tiveram um acréscimo de 11% devido ao transporte do fenol.

8.2. Avaliação de Impacto Ambiental – Sistema B

O Sistema B contempla as mesmas condições para a Tinta CA-1. O destaque nesse caso ocorre por conta da tinta padrão que utiliza CA-P com 98,5%$_{m/m}$ de pureza. Com o aumento de concentração, houve incremento no consumo de utilidades e matérias-primas. As Tabela 15 e Figura 18 descrevem o perfil ambiental do Sistema B. Nesse cenário as conclusões gerais são as mesmas observadas para o Sistema A. Assim, a tinta utilizando coalescente CA-1 possui desempenho ambiental superior a sua homóloga em Mudanças Climáticas, Toxicidade Humana, Depleção de água e Depleção Fóssil. A tinta padrão de mercado mostrou-se menos impactante apenas em termos de formação de Smog.

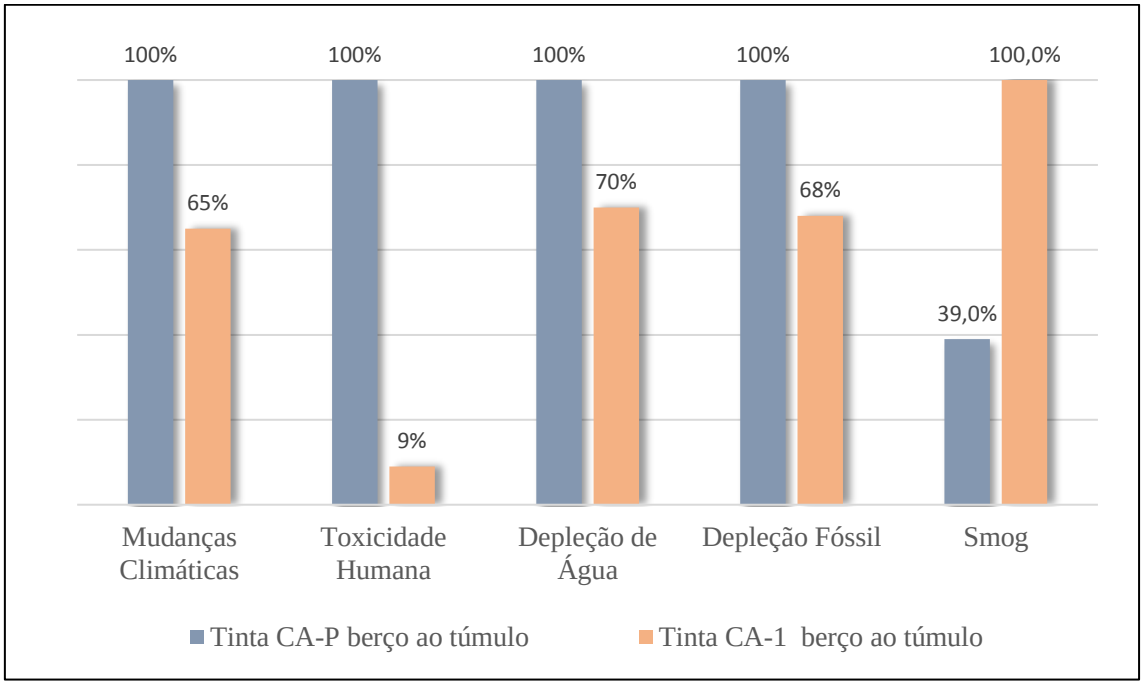
O aumento do grau pureza do coalescente que integra a formulação da tinta CA-P – de 90,8% para 98,5% – tornou os impactos sobre MC, TH, DA, e DF associados ao bem de consumo ainda mais elevados. Essa constatação apenas ratifica a prevalência da tinta CA-1 sobre sua concorrente. No caso da formação de Smog o Sistema B também mostra agravamento do impacto em relação ao obtido pelo Sistema A; no entanto, mesmo com esse acréscimo a Tinta CA-1 segue tendo o pior desempenho da série nessa categoria.

Tabela 15. Perfil ambiental para 10,8 kg da tinta para o Sistema B – abordagem berço ao túmulo

Categoria de impacto	Unidade (por UF)	Superfície pintada/ Tinta CA-P (98,5%)	Superfície pintada/ Tinta CA-1
Mudanças Climáticas	g $CO_{2\ eq}$	664	434
Toxicidade Humana	g 1,4-DB $_{eq}$	137	13,0
Depleção de Água	L	30,0	21,0
Depleção Fóssil	g óleo $_{eq}$	399	272
Smog	g $O_{3\ eq}$	128	332

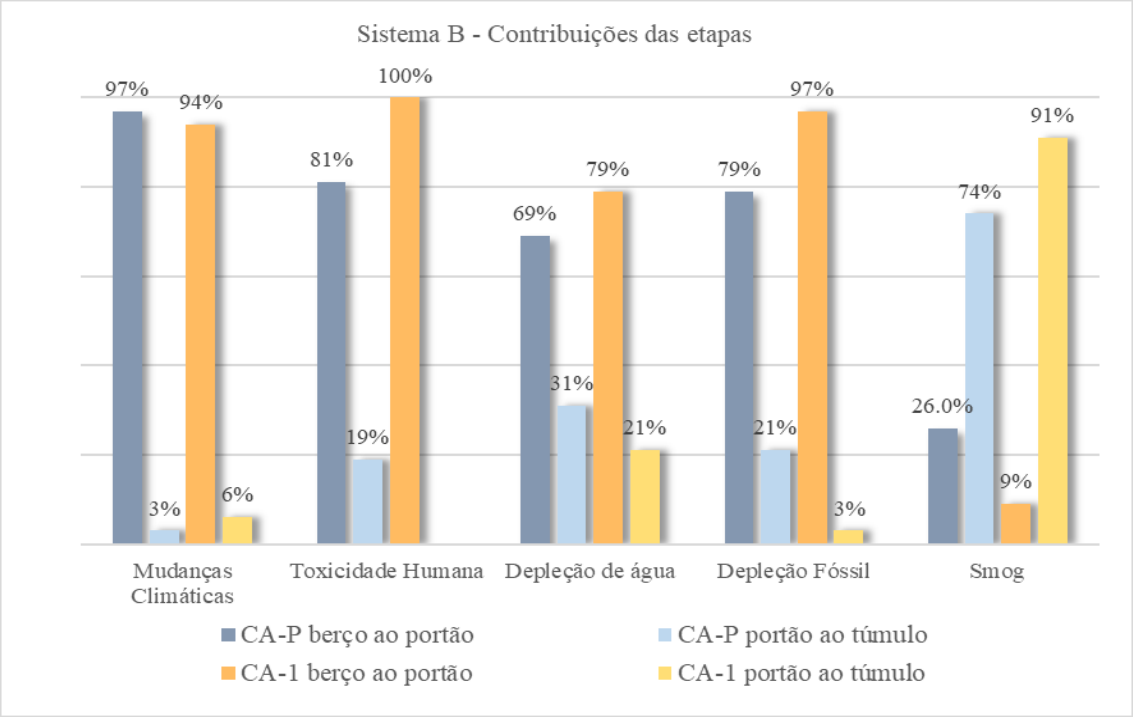
Fonte: próprio autor

Figura 18. Perfil ambiental da tinta padrão (Sistema B) utilizando CA-1 – berço ao tumulo



Fonte: próprio autor

Figura 19. Contribuição de impacto nas diferentes etapas do ciclo de vida dos coalescentes em suas produções e seus usos em tinta – Sistema B



Fonte: próprio autor

De modo análogo ao que ocorreu antes com o Sistema A foram avaliadas também as contribuições das tintas CA-1 e CA-P para duas diferentes etapas do ciclo de vida. A Figura 19 descreve esses resultados. Segundo esse enfoque o comportando do sistema B é bastante semelhante ao observado para o Sistema A. A cadeia de manufatura acumula as principais contribuições para todas as categorias de impacto avaliadas, exceto a formação de Smog. Esse comportamento era também esperado uma vez que o aumento de pureza do coalescente é conseguido mediante incremento de consumos e utilidade, tal como está indicado na Tabela 4 (seção 7.2.1).

O coalescente CA-1 é fruto de uma ação de DfE cujo objetivo principal era gerar uma molécula com menor potencial de formação de Smog do que aquela que constitui o coalescente CA-P. Essa empreitada foi bem-sucedida apenas de maneira parcial, uma vez que, de fato, a taxa de emissão de CA-1 por ocasião da aplicação da tinta ($52\%_{m/m}$) é inferior àquela demonstrada por CA-P ($90\%_{m/m}$). Por outro lado, o fator de impacto da molécula aqui representada como CA-1 é significativamente mais elevado que o de sua congênere em CA-P. A composição desses efeitos não é suficiente para fazer com que o coalescente CA-1 prevaleça sobre CA-P na categoria de impacto que, justamente serviu de motivação para sua concepção e desenvolvimento.

Assim, ao invés de seguir com as demais etapas do método de trabalho, e avaliar o desempenho econômico desses produtos, para depois tomar ações no sentido de estimar suas Eco-eficiências, optou-se por tomar outro caminho. Este compreendeu dar início a outro ciclo de desenvolvimento que resultasse na criação de uma molécula com impactos mais baixos que os do coalescente CA-P quanto a formação de Smog, sem, no entanto, comprometer os desempenhos atingidos para as demais categorias. Os resultados dessa evolução aparecem descritos em maiores detalhes nos Capítulos 9 e 10 deste documento.

9. PROPOSTA DE COALESCENTE ALTERNATIVO

9.1. Desenvolvimento do coalescente CA-2

O desenvolvimento do coalescente alternativo levou em conta a obtenção de um produto que pudesse atender aos requisitos técnicos requeridos por um coalescente (vide seção 3.1.), assim como requisitos ambientais e econômicos. De modo particular, este deveria preencher a lacuna deixada pelo coalescente CA-1 em termos de formação de Smog, sem importar em acréscimo nas demais dimensões ambientais, e demonstrando custos competitivos que o credenciassem ao uso em formulações de tintas decorativas.

O projeto do coalescente alternativo levou em conta conceitos de DfE, e assim, a variável ambiental foi incorporada a esse desenvolvimento sob a forma de ações voltadas a redução de consumo de recursos naturais e emissões. Em termos práticos, tais iniciativas se manifestaram a partir de: (i) incremento de eficiência energética da manufatura do bem de produção; e (ii) de reaproveitamento de matérias-primas. A seção seguinte traz outros detalhes sobre a síntese deste coalescente, que a partir desse momento passa a denominar-se CA-2.

9.2. Breve descrição do processo de síntese de CA-2

A obtenção do CA-2 decorre da reação entre um ácido dicarboxílico de fonte sintética e um álcool ramificado de fonte natural, da qual se origina um Éster de Álcool Ramificado. Catalisadores e um ácido também participam do processo. A síntese do CA-2 não gera perdas materiais ou energia. Em contraste, tal processamento, bem como aqueles que resultam da obtenção de seus ativos, consomem utilidades nas formas de vapor e energia elétrica, para acionamento de bombas, misturadores e outros equipamentos periféricos de processo.

9.3. Modelo do processo de produção de CA-2

Tal como se deu com CA-1, a proposta do coalescente CA-2 consiste também de um desenvolvimento em termos de lógica de manufatura. Por conta disso, parâmetros e condições de processo que descrevem o arranjo são tratados sob sigilo industrial.

Assim, a caracterização da síntese do CA-2 ocorre de forma generalista e algo semelhante àquela adotada para CA-1. Ainda que CA-2 seja um coalescente em fase de consolidação no mercado, usou-se de dados primários, obtidos, junto à unidade que processa o produto e parte de seus intermediários para sua modelagem. Essa ação foi realizada com vistas a construir um modelo consistente, e ao mesmo tempo harmônico com aquele estabelecido para CA-P. Esse cuidado também foi observado durante a análise dos resultados obtidos pelo projeto, nas situações em que foi necessário estabelecer uma relação de causa e efeito entre os impactos ambientais quantificados pela ACV e os processos, etapas, subsistemas e até sistemas que compõem aquela cadeia produtiva.

9.4. Modelo do Ciclo de Vida do coalescente CA-2

9.4.1. Definição de objetivo e escopo

9.4.1.1. Definição do Objetivo

O objetivo deste estudo de ACV foi gerar resultados de desempenho ambiental de uma tinta decorativa cuja formulação incorporasse o coalescente CA-2. Por premissa, a inclusão desse ativo na composição da tinta não deveria alterar, em qualquer medida, o desempenho técnico do produto final. O propósito a que a ACV se destina é fornecer subsídios a verificação da efetividade ambiental do coalescente CA-2, a qual dá suporte, a um processo gerencial amplo que culminará com a colocação (ou não) do produto no mercado. Note-se que, com isso, a ACV exercita um de seus propósitos originais: de dar respaldo ao projeto de novos produtos, e mais especificamente neste caso, de uma ação de DfE.

9.4.1.2. Definição de Escopo

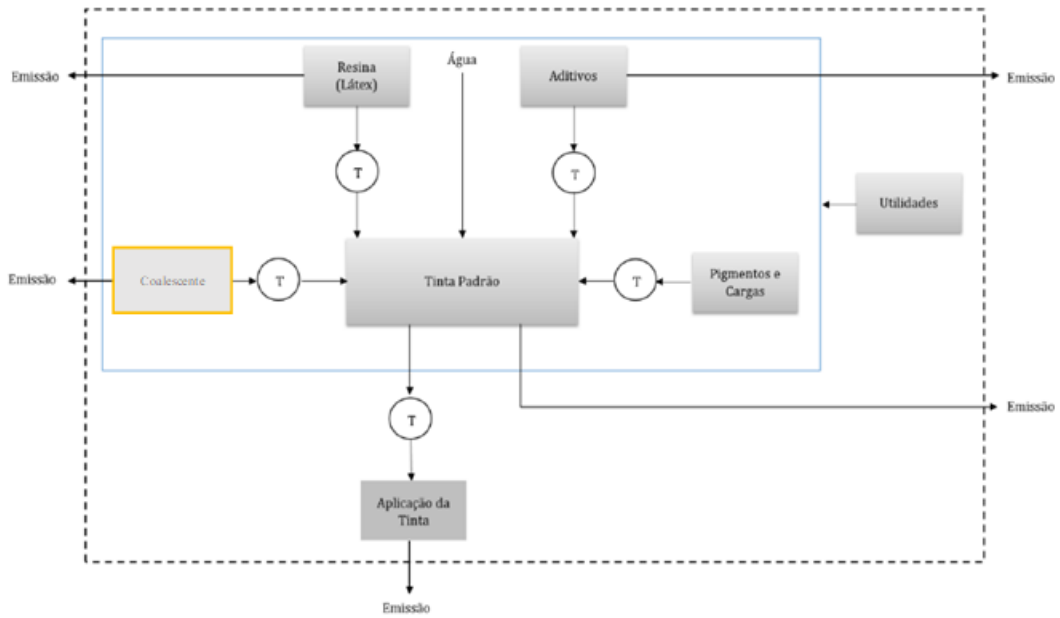
Os objetos de análise considerados pelo estudo são: (i) Tinta decorativa base látex formulada com CA-P; (ii) Tinta decorativa base látex formulada com CA-1, e (iii) Tinta decorativa base látex formulada com CA-2.

A função (comum) a todos esses bens de consumo foi, mais uma vez: '*Proteger uma superfície contra intempéries, evitando seu desgaste*'. Tendo em conta o contexto, a Unidade Funcional que a quantifica, foi definida como sendo: '*Proteger uma superfície de 50 m^2 contra intempéries, evitando seu desgaste, ao longo de 5 anos*'.

Tal como descrito na sessão 7.1.2, dados coletados junto ao fabricante permitiram estabelecer as seguintes premissas: (i) cada litro de tinta é suficiente para proteger 18 m^2 de superfície por demão; (ii) são necessárias três demãos de tinta para que se obtenha um acabamento adequado da superfície; (iii) ambos os recobrimentos têm desempenhos técnicos idênticos na etapa de aplicação; (iv) a tinta de base látex apresenta densidade média ρ = 1,30 g/cm^3 a despeito do coalescente usado em sua formulação; e (v) em condições normais de exposição, o tempo médio entre duas aplicações de tinta com vistas à manutenção da superfície é de 5 anos. Diante desses requisitos, o Fluxo de Referência determinado para a análise foi de 8,30 L (ou 10,8 kg) de tinta.

No que se refere a composição dos Sistemas de Produto, a única diferença entre as cadeias produtivas das tintas CA-P, CA-1 e CA-2 reside na síntese dos coalescentes (Figura 20).

Figura 20. Representação esquemática do Sistema de Produto para Tinta CA-P, CA-1 e CA-2



Fonte: próprio autor

O processo de exclusão de aspectos ambientais seguiu os critérios recomendados pela norma ABNT ISO 14044 (ABNT, 2009b) referentes as contribuições cumulativas mássicas e energéticas. Os dados que retratam o perfil ambiental da produção de CA-2 são primários (seção 9.2). Em termos de qualidade, os dados primários foram coletados para o biênio 2018 – 2019. A cobertura temporal estabelecida para dados secundários foi condicionada ao grau de atualidade dos ICVs disponíveis na Base de Dados Ecoinvent®. A cobertura geográfica, considerou-se que a obtenção de CA-2, e os processamentos dos ativos que o constituem, ocorreriam em Guadalajara e Cidade do México no México, no município de Mauá no Brasil e Anqing na China. A formulação e a aplicação da Tintas CA-2 acontecem em McCarran nos Estados Unidos tal como ocorre com as Tintas CA-P e CA-1.

Quanto a cobertura tecnológica, a produção de CA-2 segue as práticas e condutas exercitadas pelo fabricante de acordo com a descrição do processo que consta na sessão 9.2. O estudo fez uso de dois métodos de AICV. Pelo método ReCiPe – Midpoint (H) v 1.12 – foram avaliadas as categorias de impacto de Mudanças Climáticas, Toxicidade Humana, Depleção de Água e Depleção Fóssil enquanto que o método TRACI 2.1 foi usado para aferir o desempenho do coalescente no Sistema de Produto para a avaliação da categoria de impacto Smog. Mais uma vez, a necessidade de se avaliar impactos derivados das aplicações das tintas foi o principal motivador para o uso de TRACI 2.1.

9.4.2. Análise de Inventário

9.4.2.1. ICV da produção de CA-2

O modelo que descreve a síntese de CA-2 foi elaborado a partir de dados primários fornecidos pelo fabricante desta molécula. O ICV que deriva dessa ação está representado na Tabela 16. As faixas de valores remetem a produção de 1,0 kg de produto. Por questões de confidencialidade, os valores referentes a emissões para o ambiente não foram dados a conhecer. No entanto, esses mesmos valores foram incorporados ao modelo criado para verificar o desempenho ambiental daquele processo.

Tabela 16. Consumos de matérias-primas e insumos para produção de 1,0 kg CA-2

Insumo	Unidades	Quantidade
	Entradas de matéria	
Oxiácido de Fósforo	g	1,0 – 4,0
Ácido Dicarboxílico	g	300 – 500
Álcool Ramificado	g	700 – 900
Silicato de Magnésio	g	10,0 – 19,0
Ácido Sulfônico Orgânico	g	1,00 – 3,00
Água de Resfriamento	g	1,00 – 2,00
	Entradas de energia	
Vapor	kg	100 – 150
Energia Elétrica	kWh	0,10 - 0,50
	Produto	
CA-2	kg	1,00

Fonte: próprio autor

As etapas de transportes do Oxiácido de Fósforo e do Ácido Sulfônico Orgânico foram modeladas a partir de um fornecedor que distribui esses ativos por via rodoviário desde a Cidade do México até Guadalajara, por cerca de 547 km. O Silicato de Magnésio procede do Texas e chega até a planta de Guadalajara ao percorrer por via marítima 1421 km, e outros 1208 km de caminhão.

O fornecedor de Ácido Dicarboxílico encontra-se localizado em Anqing na China. Para este caso definiu-se um arranjo composto de modal marítimo, a partir do qual o ativo percorre 13132 km, e modal rodoviário, com 324 km de extensão. O Álcool Ramificado encontra-se em Mauá no Brasil e cumpre um itinerário semelhante para chegar à planta produtora do coalescente: por via marítima percorrendo 10043 km e depois, acumula outros 1225 km de deslocamento rodoviário.

9.4.2.2. ICVs da geração de eletricidade e vapor para síntese de CA-2

As matrizes elétricas de México e Estados Unidos foram obtidas da Base de Dados Ecoinvent® e atualizadas para 2015 a partir de informações publicadas pela Internacional Energy Agency – IEA (IEA, 2015) (seção 7.2.3.) O processamento de CA-2 segue para essa utilidade, o mesmo diapasão em termos de composição de grids que já fora descrito para as sínteses de CA-P e CA-1. A planta de Guadalajara gera vapor a partir de queima de gás natural. Modelou-se essa produção tendo por premissa a disponibilidade de uma caldeira específica apenas para suprimento do ciclo de manufatura de CA-2.

9.4.2.3. ICVs da produção e da aplicação de tinta com coalescente CA-2

A produção da tinta CA-2 foi modelada de forma semelhante ao que ocorrera antes com as tintas CA-P e CA-1. Ou seja, a partir de dados disponibilizados pelo fabricante do coalescente e tal como está indicado na Tabela 9 (seção 7.2.5). O deslocamento do CA-2 se dá por 3114 km desde Guadalajara até McCarran. Para este caso definiu-se o modal rodoviário como meio de deslocamento.

Da mesma forma que para as análises anteriores, admitiu-se para este caso que a aplicação da tinta CA-2 traria apenas emissões do coalescente. Dentro desse contexto, as perdas de CA-2 foram descritas pela própria molécula de Éster de Álcool Ramificado. Ensaios laboratoriais realizados em condições idênticas as tratadas neste estudo levaram a concluir que $50\%_{m/m}$ do coalescente aplicado juntamente com a tinta decorativa acabaria sendo emitido para a atmosfera.

10. ANÁLISE DE RESULTADOS

10.1 Desempenho Ambiental do CA-2

A avaliação de desempenho ambiental do CA-2 considerou a comparação entre as tintas padrão utilizando CA-P com 98,5%$_{m/m}$ (Sistema B), CA-1 e CA-2. com enfoque do 'berço ao túmulo'. Optou-se também por fazer uma avaliação do impacto em dois níveis. No primeiro deles verificou-se o desempenho ambiental dos coalescentes em suas cadeias de produção. No segundo nível o impacto foi avaliado por uma abordagem 'do portão ao túmulo' verificando-se o desempenho ambiental das tintas com os diferentes coalescentes. Essa subdivisão foi feita a fim de conhecer o impacto associado a etapa de uso dos produtos que são objetos de estudo.

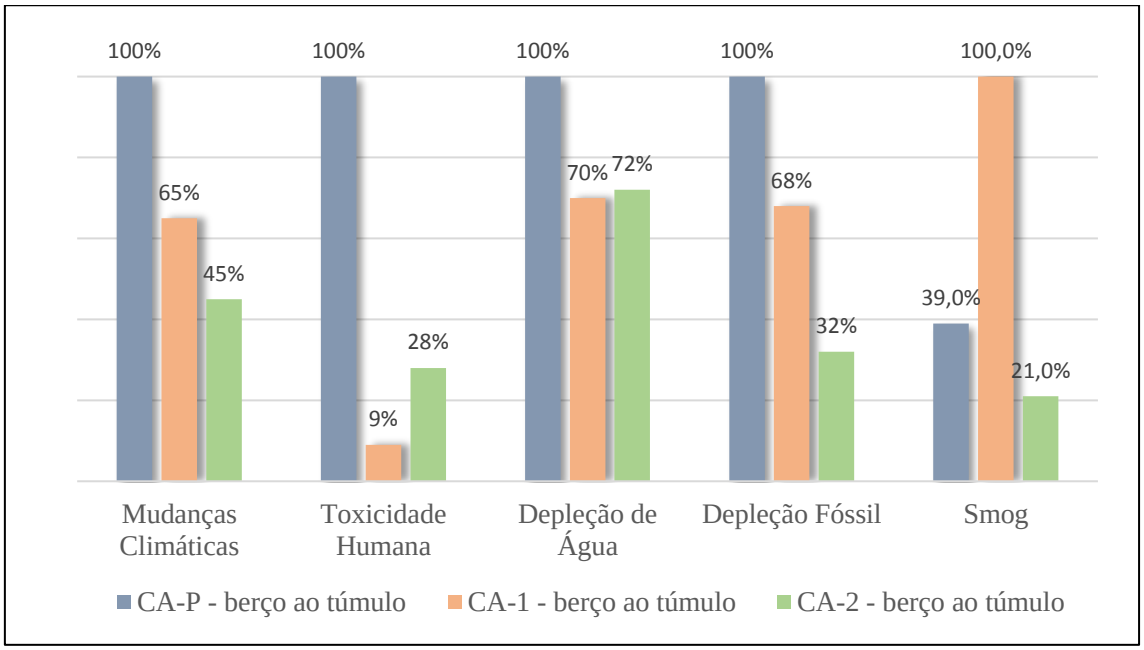
A Tabela 17 e a Figura 21 descrevem os perfis ambiental das diferentes tintas em termos absoluto e relativo. A partir desses resultados foi possível perceber que a tinta em que utiliza o coalescente CA-2 tem desempenho superior às demais em todas as categorias de impacto. Essa constatação ratifica as condutas, estratégias e decisões tomadas durante a atual etapa do processo de DfE. Especificamente quanto a formação de Smog, deve-se argumentar que a taxa de emissão de CA-2 (50%$_{m/m}$) é inferior à de CA-P (90%$_{m/m}$) e está em patamar semelhante àquela determinada para CA-1 (52%$_{m/m}$). No entanto, o fator de impacto dessa molécula para a referida categoria de impacto é o mais baixo de toda a série, atingindo o limite de 60,0 g O_{3eq}/kg, ao passo que aquela calculado para CA-P chega a 80,1 g O_{3eq}/kg enquanto o estimado para CA-1 corresponde a 4,49 kg O_{3eq}/kg.

Tabela 17. Perfil ambiental para 10,8 kg de diferentes tintas – abordagem berço ao túmulo

Categoria de impacto	Unidade (por UF)	Superfície pintada/ Tinta CA-P (98,5%)	Superfície pintada/ Tinta CA-1	Superfície pintada/ Tinta CA-2
Mudanças Climáticas	g $CO_{2\ eq}$	664	434	299
Toxicidade Humana	g 1,4-DB $_{eq}$	137	13,0	39,0
Depleção de água	L	30,0	21,0	22,0
Depleção Fóssil	g óleo $_{eq}$	399	272	128
Smog	g $O_{3\ eq}$	128	332	69,0

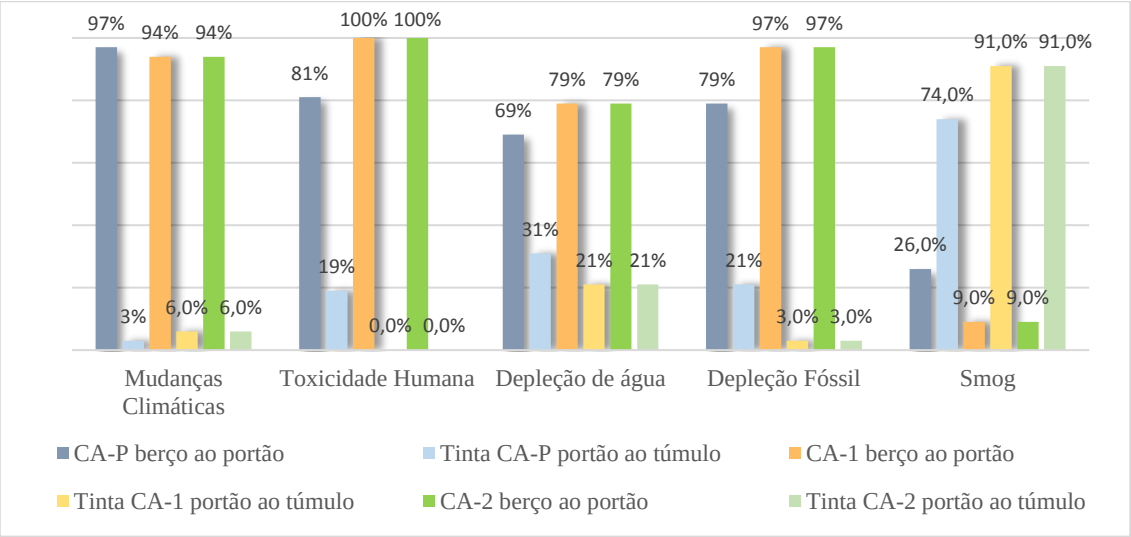
Fonte: próprio autor

Figura 21. Perfil ambiental dos diferentes coalescentes em seus usos em tintas – berço ao túmulo



Fonte: próprio autor

Figura 22. Contribuição de impacto por etapas do ciclo de vida dos coalescentes em suas produções e seus usos em tinta



Fonte: próprio autor

De modo análogo ao que ocorreu para as análises anteriores foram verificadas as contribuições das tintas CA-P, CA-1 e CA-2 para as distintas etapas do ciclo de vida. Os registros feitos pela Figura 22 apontam que, também para CA-2 a cadeia de produção acumula as contribuições mais para todas as categorias de impacto, com exceção da formação de Smog.

Ao repetir a análise dentro dos domínios de validade do sistema, percebeu-se que em termos de Mudanças Climáticas, a tinta contendo CA-2 apresentou redução de 55% e 31% no de impacto quando comparada a CA-P e CA-1 respectivamente. Naquele caso, a principal contribuição para a categoria (21%) se relaciona ao vapor consumido durante a síntese do Álcool Ramificado, um processamento realizado no município de Mauá (BR).

Ainda com relação a MC percebeu-se um fenômeno interessante. Um dos focos de impacto relacionados ao coalescente CA-2 ocorre sob a forma de CO_2, emanado do processamento de etanol, mais especificamente durante a digestão da glicose presente no melaço por leveduras (a fermentação alcoólica), e da queima de biomassa (bagaço) para geração de calor e eletricidade para o processo. Destaque-se, porém, que essas emissões se dão na forma de CO_2 biogênico ($CO_{2,b}$), cujo carbono compunha originalmente o tecido estrutural da cana-de-açúcar. O composto foi fixado desde a atmosfera também na forma de CO_2, por meio de ação fotossintética. O balanço entre a fixação (ou sequestro) de CO_2 do ar pela cana-de-açúcar e a emissão de $CO_{2,b}$ é amplamente superavitário em termos de retirada de CO_2 do ambiente. No caso do coalescente CA-2 esse benefício se manifesta a partir do consumo de óleo fúsel, um subproduto também derivado da produção de etanol de cana, que integra a formulação daquele aditivo para tinta decorativa.

A maior parte das quantificações de impactos na forma de Mudanças Climáticas não leva em conta essas componentes. Isso porque, invariavelmente o CO_2 sequestrado será devolvido para o ambiente em prazo inferior àquele necessário para que sua ausência no ambiente se reverta em redução de Aquecimento Global. No entanto, no caso presente as taxas de fixação e emissão de $CO_{2,b}$ foram consideradas, pois diferentemente do que ocorre com outros produtos, o carbono proveniente da cana-de-açúcar fica imobilizado na estrutura ao coalescente CA-2, sendo uma parte deste retida por ocasião da aplicação da tinta. Já a outra parcela é lançada de fato no ambiente, mas nesse caso, o carbono se apresenta em uma forma estruturada que o impede de atuar com precursor de Mudanças Climáticas.

Ao realizar a ‘compensação’ do CO_2 de origem renovável para todas as tintas, foi possível notar que aquela constituída pelo coalescente CA-2 apresentou reduções de impactos de 45% e 31%, respectivamente com relação a suas homólogas CA-P e CA-1. Vale destacar que os coalescentes que integram as formulações daqueles produtos são em sua totalidade de procedência fóssil, para os quais os benefícios da compensação de CO_2 costumam ser apenas marginais. A Tabela 18 descreve os principais precursores de MC associados a tinta CA-2.

Tabela 18. Principais precursores do impacto para Mudanças Climáticas

Substância	Unidade (por UF)	Superfície pintada/ Tinta CA-P (98,5%)	Superfície pintada/ Tinta CA-1	Superfície pintada/ Tinta CA-2
$CO_{2,\ fóssil}$	g CO_{2eq}	595	381	287
CH_4	g CO_{2eq}	66,9	2,00	11,7

Fonte: próprio autor

No que se referente a Toxicidade Humana, a tinta que contém o coalescente CA-2 mostrou uma redução de 90% dos impactos quando comparada ao desempenho de CA-P. No entanto, ao ser confrontada com CA-1 percebeu-se um aumento de 9,0% no total de impactos. A perda de defensivos agrícolas usados para o cultivo da cana-de-açúcar foi responsável por 28% dos impactos da tinta CA-2. A esse se seguem emissões de bário (Ba) e de Arsênio (As), procedentes de extração de gás natural bruto, cujas contribuições para TH remontam 21% e 18%, respectivamente.

Tabela 19. Principais precursores do impacto para TH

Substância	Unidade (por UF)	Superfície pintada/ Tinta CA-P (98,5%)	Superfície pintada/ Tinta CA-1	Superfície pintada/ Tinta CA-2
Ba (água)	g 1,4-DB eq	118,5	9,56	8,22
Hg (ar)	g 1,4-DB eq	4,89	0,43	0,95
Defensivos	g 1,4-DB eq	–	–	11,1
Arsênio	g 1,4-DB eq	–	–	7,28

Fonte: próprio autor

A Depleção de Água para tinta com CA-2 está atrelada diretamente a manufatura de Ácido Dicarboxílico. Essa etapa da cadeia produtiva do coalescente CA-2 gera uma contribuição para a categoria de 44%. De qualquer forma, percebeu-se uma redução de 27% nos impactos de Depleção de Água na tinta CA-2 em comparação ao desempenho manifestado por CA-P. Já com relação a CA-1 pode-se considerar haver equivalência de desempenhos.

Quanto a Depleção Fóssil a tinta CA-2 apresentou redução de 68% de impactos em relação a sua congênere produzida com CA-P. Os principais aportes associados com a tinta CA-2 encontram-se na cadeia produtiva do Ácido Dicarboxílico. Tal como ocorre com as tintas CA-P e CA-1, as contribuições majoritárias para a categoria remetem aos consumos de óleo cru e gás natural, cujos produtos derivados (diesel, óleo combustível leve e pesado, e gás natural refinado) servem para geração de energia e a movimentação de máquinas e veículos. A Tabela 20 ilustra as taxas de depleção desses recursos naturais.

Tabela 20. Principais precursores do impacto para DF

Substância	Unidade (por UF)	Superfície pintada/ Tinta CA-P (98,5%)	Superfície pintada/ Tinta CA-1	Superfície pintada/ Tinta CA-2
Óleo cru	g óleo $_{eq}$	164	163	86,0
Gás, natural	g óleo $_{eq}$	185	92,6	29,0

Fonte: próprio autor

Assim como já se havia adiantado, notou-se uma redução expressiva (~ 46%) nos aportes de impacto referente a tinta com o CA-2 comparado ao CA-P para a formação de Smog. Se comparada a tinta CA-1, o ganho imposto por aquela formulada a partir de CA-2 foi de 79%. As perdas do Éster de Álcool Ramificado compreendem a fonte majoritária de impactos para a categoria da tinta CA-2. De qualquer forma, os principais precursores de impacto para esta categoria gerados do ciclo de vida de cada tinta, foram relacionados na Tabela 21.

Tabela 21. Principais precursores do impacto para Smog

Substância	Unidade (por UF)	Superfície pintada/ Tinta CA-P (98,5%)	Superfície pintada/ Tinta CA-1	Superfície pintada/ Tinta CA-2
2,2,4-trimetil-1,3-pentanodiol monoisobutirato	g O_{3eq}	**89,9**	–	–
Fenildiglicol	g O_{3eq}	–	302	–
Éster de Álcool Ramificado	g O_{3eq}	–	–	**40,0**
NOx	g O_{3eq}	29,9	28,1	28,7

Fonte: próprio autor

10.2 Análise Econômica

Tal como já se havia adiantado por ocasião da descrição do método adotado por esta pesquisa (seção 4.3.2), a Avaliação Econômica dos coalescentes esteve baseada em indicadores de preço de mercado. As informações para o coalescente CA-P foram obtidas através do canal comercial de empresas do segmento de tintas. Nos casos dos coalescentes CA-1 e CA-2, foram também realizadas estimativas por parte de seu fabricante dado que esses bens de produção ainda não se encontram estabelecidos no mercado. Dada a variação de preços, foram adotados valores mínimos e máximos dessa variável para cada coalescente. Dessa estruturação surgiram dois cenários: C1: com preços mínimos; e C2: com preços máximos, concebidos para que se pudesse verificar o grau de influência da variação desses parâmetros sobre os resultados de Eco-eficiência.

A Tabela 22 traz valores de preço máximos e mínimos de cada coalescente tanto em valores absolutos, como na forma de participação relativa no contexto da formulação da tinta decorativa.

Tabela 22. Indicadores de preços dos coalescentes CA-P, CA-1 e CA-2

Coalescente	Preço mínimo do coalescente (US$/kg)	Preço mínimo do coalescente (US$/kg), contribuição de 1,2%$_{m/m}$ na formulação da tinta (10,8 kg / FR)	Premissa do preço mínimo do coalescente	Preço máximo do coalescente (US$/kg)	Preço máximo do coalescente (US$/kg), contribuição de 1,2%$_{m/m}$ na formulação da tinta (10,8 kg / FR)	Premissa do preço máximo do coalescente
CA-P	1,80	0,23	Padrão mínimo de mercado	1,98	0,26	10% superior ao padrão mínimo de mercado
CA-1	1,62	0,21	10% menor que o Padrão mínimo de mercado	1,98	0,26	10% superior ao padrão mínimo de mercado
CA-2	1,71	0,22	5% menor que o Padrão mínimo de mercado	1,98	0,26	10% superior ao Padrão mínimo de mercado

A normalização dos indicadores econômicos ocorreu atribuindo-se valor unitário para CA-P, definido como coalescente de referência. Dessa forma, os demais valores para CA-1 e CA-2 foram ajustadas em função desse resultado. Esses parâmetros estão descritos na Tabela 23.

Tabela 23: Normalização dos indicadores de preços dos coalescentes CA-P, CA-1 e CA-2

Coalescente	Preço mínimo do coalescente (US$/kg)	Normalização preço mínimo coalescente	Preço máximo do coalescente (US$/kg)	Normalização preço máximo coalescente
CA-P	1,80	1,00	1,98	1,10
CA-1	1,62	0,90	1,98	1,10
CA-2	1,71	0,95	1,98	1,10

Fonte: próprio autor

10.3. Análise de Eco-eficiência

A Análise de Eco-eficiência se desenvolveu a partir dos valores normalizados dos indicadores ambientais e econômicos. Os impactos ambientais foram normalizados tendo por critério que maior valores de impacto para cada categoria receberia valor unitário. Os demais resultados seriam corrigidos a partir dessa referência. A Tabela 24 apresenta tais resultados, bem como os predecessores desde onde os mesmos foram determinados.

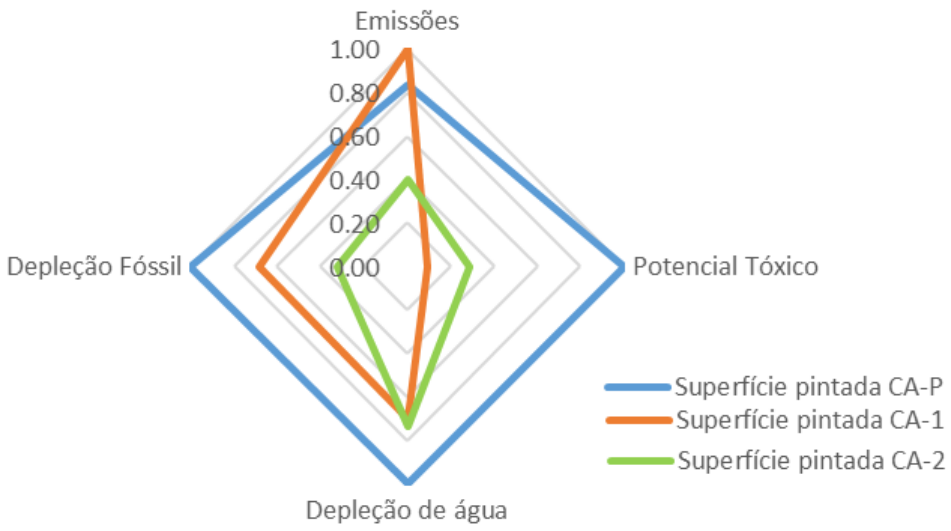
Tabela 24. Indicadores ambientais dos coalescentes CA-P, CA-1 e CA-2

Categoria de impacto	Unidade (por UF)	Superfície pintada/ Tinta CA-P (98,5%)	Normalização CA-P	Superfície pintada/ Tinta CA-1	Normalização CA-1	Superfície pintada/ Tinta CA-2	Normalização CA-2
Mudanças Climáticas	g CO_2 eq	664	1,00	434	0,65	299	0,45
Toxicidade Humana	g1,4-DB eq	137,0	1,00	13,0	0,09	39,0	0,28
Depleção de água	L	30,0	1,00	21,0	0,70	22,0	0,73
Depleção Fóssil	g oil eq	399	1,00	272	0,68	128	0,32
Smog	g O_3 eq	128	0,39	332	1,00	69	0,21

Fonte: próprio autor

Os resultados da Tabela 24 permitiram com que se construísse a impressão digital ambiental dos coalescentes. Para tanto, foram consideradas na subcategoria de Emissões o resultado normalizado da somatória de impactos de Mudanças Climática e formação de Smog. Para representar o Potencial Tóxico usou-se valores normalizados de Toxicidade Humana. A impressão digital ambiental dos coalescentes para as respectivas superfícies pintadas encontra-se na Figura 23.

Figura 23. Impressão digital ambiental dos coalescentes CA-P, CA-1 e CA-2



Fonte: próprio autor

Olhando com atenção para aqueles resultados será possível notar que a superfície pintada com tinta CA-2 possui a menor área do diagrama, condição que apenas refere a prevalência ambiental desse bem de consumo sobre seus homólogos CA-P e CA-1. Por outro lado, o desempenho da superfície recoberta com tinta CA-P circunscreve os demais, mostrando ser este, o pior resultado conjugado de toda a série analisada.

Os resultados da Análise Econômica (Tabela 23) foram normalizados usando-se preços máximos e mínimos dos coalescentes e tomando como se esses contribuissem em 1,2%$_{m/m}$ para composição de 10,8 kg de tinta; ou seja, o Fluxo de Referência definido para cada produto analisado (seção 9.4.1.2).

Tabela 25. Análise de Eco-eficiência dos coalescentes CA-P, CA-1 e CA-2

Normalização da dimensão Ambiental			
Categoria de impacto	CA-P	CA-1	CA-2
Mudanças Climáticas	1,00	0,65	0,45
Toxicidade Humana	1,00	0,09	0,28
Depleção de água	1,00	0,70	0,73
Depleção Fóssil	1,00	0,68	0,32
Smog	1,00	2,59	0,54
Indicador único	1,00	0,08	0,02
Normalização da dimensão Econômica			
	CA-P	CA-1	CA-2
Normalização: preço mínimo coalescente (C1)	1,00	0,90	0,95
Normalização: preço máximo coalescente (C2)	1,10	1,10	1,10

Fonte: próprio autor

Os dados referentes ao desempenho ambiental de cada situação em análise foram normalizados atribuindo-se o valor unitário para os impactos gerados por CA-P, que foi considerado mais uma vez como referência para a análise. Os demais valores (associados a CA-1 e CA-2) foram então corrigidos para esta referência.

A seguir, efetuou-se uma combinação de valores de cada categoria de impacto, por meio de sua produtória, com o intuito de que obtivesse um valor individual de impacto. Os valores resultantes dessas transformações algébricas estão indicados na Tabela 25. A partir dos dados ambientais e econômicos normalizados elaborou-se então o diagrama de Eco-eficiência para os coalescentes CA-P, CA-1 e CA-2, para os cenários C1 e C2 tal como aparece registrado na Figura 24.

Figura 24. Diagrama de avaliação de eco-eficiência coalescentes CA-P, CA-1 e CA-2.

Fonte: próprio autor

Segundo a lógica do Método BASF quanto mais próximo o desempenho do objeto de análise estiver da coordenada (0,0) melhor será sua Eco-eficiência. Dessa identifica-se uma equivalência de resultados entre CA-2 e CA-1 quando seus índices de Eco-eficiência são determinados para o cenário C1 de desempenho econômico. No outro extremo da escala encontra-se CA-P com Eco-eficiência determinada para C2. Além disso, CA-2 aparenta ter resultados acumulados menos influenciáveis pelas oscilações de preço do coalescente. Esses perfis vêm apenas confirmar uma tendência manifestada desde o início do ciclo de análises: de que as práticas de DfE resultam em desempenhos coletivos superiores aos projetos que são realizados sem que a dimensão ambiental seja observada.

11. CONCLUSÕES

A realização do presente estudo confluiu para as seguintes conclusões:

- Os resultados gerados pelo estudo de ACV mostram que o coalescente CA-2 possui desempenho ambiental superior ao coalescente tradicional de mercado CA-P em todas as categorias de impacto estudas de Mudança Climáticas (MC), Toxicidade Humana (TH), Depleção de água (DA) e Depleção Fóssil (DF) e Smog, superando a lacuna deixada pelo CA-1 nesta última categoria;

- Os impactos ambientais de qualquer dos coalescentes se localizam em sua grande maioria nas etapas que antecedem o transporte do coalescente a fábrica produtora de tinta, ou seja, do berço ao portão. Essa afirmação foi uma realidade para todas as categorias de impacto, exceto para a formação de Smog, que é fortemente influenciada pela etapa de uso do produto onde ocorrem exatamente emissões dos coalescentes;

- O estudo de ACV fez perceber que os desempenhos ambientais do coalescente CA-P para os casos dos Sistemas A e B são equivalentes. É importante ressaltar, porém, um aumento não proporcional de impacto em quase todas as categorias analisadas devido ao aumento de CA-P desde 90,8%$_{m/m}$ para 98,5%$_{m/m}$;

- A avaliação de Eco-eficiência demonstrou que o coalescente CA-2 tem melhores resultados coletivos que seus concorrentes CA-P e CA-1. De maneira específica, o coalescente CA-P quando exposto ao cenário econômico C2 apresenta a menor Eco-eficiência de toda a série, enquanto o desempenho coletivo de CA-2 para C1 acumula os melhores resultados do conjunto;

- Muito embora CA-1 e CA-2 apresentem Eco-eficiências próximas quando estas são medidas para o cenário econômico C1, o coalescente CA-2 foi capaz de reunir um conjunto mais harmônico de resultados;

- Este trabalho permitiu conciliar funções de produto com aspectos relacionados à Sustentabilidade favorecendo a criação de produtos Eco-eficientes, mantendo a competitividade, e permitindo que futuramente sejam atingidos novos mercados, sensíveis a importância da variável ambiental para seu cotidiano.

12. TRABALHOS FUTUROS

Muito embora o tema tenha sido explorado com algum grau de aprofundamento, a introdução da variável ambiental na concepção e no desenvolvimento de coalescentes é ainda uma prática pouco frequente. Assim, algumas vertentes relacionadas à essa temática merecem ser exploradas com rigor científico, sob a forma de trabalhos futuros derivados dessa pesquisa. São elas:

a) Avaliar os desempenhos ambiental e econômico de um coalescente derivado de CA-2 que utilize como insumo de produção Ácido Carboxílico obtido de fonte renovável;

b) Propor, implementar e verificar a efetividade ambiental de ações que se revertam em melhoria do desempenho de Toxicidade Humana obtido para o coalescente CA-2; e,

c) Realizar Análises de Sensibilidade a fim de testar os efeitos gerados por: (i) diferentes condições de operação de equipamentos; (ii) taxas de adição de compostos químicos, e (iii) variantes logísticas sobre o desempenho ambiental da CA-2. Além dos ganhos imediatos que podem proporcionar, a verificação pretende reduzir, ou até minimizar, o caráter determinístico dos modelos construídos para esta análise, e por conseguinte, dos resultados que dela derivam;

d) Avaliar o efeito da mudança do combustível diesel por gás natural extraído no México ou outras localidades para a geração de vapor em Coatzacoalcos.

e) Identificar a distância máxima para a obtenção da matéria-prima fenol na qual se estabeleça ganhos ambientais em função da distância atual.

f) Por fim, em um projeto mais arrojado, pode-se ainda construir uma rede neural com o objetivo de relacionar, sempre de forma consiste, condições de processo, consumos de matéria-prima, insumos e utilidades, e emissões derivadas destes, como o objetivo de identificar com precisão, os parâmetros que, efetivamente resultam nos impactos ambientais que foram estimados pela presente iniciativa.

g) Por fim, em um projeto mais arrojado, pode-se ainda construir uma rede neural com o objetivo de relacionar, sempre de forma consiste, condições de processo, consumos de matéria-prima, insumos e utilidades, e emissões derivadas destes, como o objetivo de identificar com precisão, os parâmetros que, efetivamente resultam nos impactos ambientais que foram estimados pela presente iniciativa.

13. REFERÊNCIAS

1. ABNT. Associação Brasileira de Normas Técnicas. ABNT NBR ISO 14040:2009, Gestão Ambiental – Avaliação do ciclo de vida – Princípios e estrutura, 2009a.

2. ABNT. Associação Brasileira de Normas Técnicas. ABNT NBR ISO 14044:2009, Gestão ambiental – Avaliação do ciclo de vida – Requisitos e orientações, 2009b.

3. BAUMANN, H.; TILLMAN, A.M. **The hitch hikers' guide to LCA: an orientation in life cycle assessment methodology and application**. Studentlitteratur, 2004.

4. BRASIL. Ministério do Meio Ambiente. Conselho Nacional do Meio Ambiente. Resolução Nº 357, de 17 de março de 2011. Publicação DOU nº 53, de 18 de março de 2005, pp. 58-63.

5. BRASIL. Ministério do Meio Ambiente. Conselho Nacional do Meio Ambiente. Resolução Nº 430, de 13 de maio de 2011. Publicação DOU nº 92, 2011, p. 89.

6. CHERUBINI, E.; RIBEIRO, P. T. **Diálogos setoriais Brasil e União Europeia: desafios e soluções para o fortalecimento da ACV no Brasil**. Brasília: Instituto Brasileiro de Informação em Ciência e Tecnologia (Ibict), 2015, 188 p.

7. DEHAN V, et al. High-performance water-based barrier coatings for the corrosion protection of structural steel. **Steel Construction – Design and Research**. 10(3). pp. 255-259. 2017.

8. EPA - UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. Tool for the Reduction and Assessment of Chemical and other Environmental Impacts (TRACI). 2012.

9. Eastman Chemical Company. **Standing the test of time** – Eastman EA^{TM} ester alcohol – The premier coalescent. 2011. Available from: *https://www.eastman.com/Literature_Center/M/M329.pdf*.

10. FAZENDA, J.M.R., Tintas & Vernizes – **Ciência e Tecnologia**. 3ª. Ed. São Paulo: Abrafati, 2009.

11. MUNIZ, V. C. F. **Análise da fundamentação da avaliação do ciclo de vida consequencial**. 2012. 73p. Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2012.

12. FRISCHKNECHT, R.; JUNGBLUTH, N.; ALTHAUS, H.J.; DOKA, G.; DONES, R.; HISCHIER, R.; HELLWEG, S.; HUMBERT, S.; MARGNI, M.; NEMECEK, T.; SPIELMANN, M. 2007. Implementation of Life Cycle Impact Assessment Methods: Data v2.0. ecoinvent report No. 3, Swiss centre for Life Cycle Inventories, Dübendorf, Switzerland.

13. GALLAGHER, M., DALTON, P., SITVARIN, L., & PRETI, G. Sensory and analytical evaluations of paints with and without texanol. **Environment Science & Technology**, 42. pp 243–248. 2008.

14. GRIPP, V. S. **Análise ambiental, energética e econômica de arranjo processual para reúso de água em refinaria de petróleo.** 2014. 166 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2014.

15. GUINÉE, J.B.; GORRÉE, M.; HEIJUNGS, R.; HUPPES, G.; KLEIJN, R.; KONING, A. DE; OERS, L. van; Wegener Sleeswijk, A.; Suh, S.; Udo de Haes, H.A.; BRUIJN, H. DE; DUIN, R. VAN; HUIJBREGTS, M.A.J. 2002. **Handbook on life cycle assessment. Operational guide to the ISO standards**. Part III: Scientific background. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 692 pp.

16. HUIJBREGTS, M.A.J.; BREEDVELD L.; HUPPES, G.; De KONING, A.; Van OERS, L.; SUH, S. 2003. **Normalization figures for environmental life cycle assessment**: The Netherlands (1997/1998), Western Europe (1995) and the World (1990 and 1995). Journal of Cleaner Production 11 (7): 737-748.

17. HUIJBREGTS, M.A.J.; STEINMANN, Z.N.; ELSHOUT, P.M.F.; STAM, G.; VERONES, F.; VIEIRA, M.D.M.; Van ZELM, R. 2017. ReCiPe2016 v1.1. **A harmonized life cycle impact assessment method at midpoint and endpoint level**. Report I: Characterization. Department of Environmental Science, Radbound University Nijmegen.

18. IEA. International Energy Agency. IEA. 2015. **Energy Balances of OECD Countries 2015**, OECD Publishing. https://doi.org/10.1787/energy_bal_oecd-2015-en.

19. LI, Y., LUO, C., QIAN, C., CHEN, X. Trimerization of aldehydes with one α-hydrogen catalyzed by sodium hydroxide. **Chemical Papers.** 68(3) pp. 422-426, 2014.

20. LIMA, A. M. F. **Avaliação do Ciclo de Vida no Brasil: inserção e perspectivas.** 2007. 116 p. Dissertação (Mestrado em Gerenciamento e Tecnologias Ambientais no Processo Produtivo) – Escola Politécnica, Universidade Federal da Bahia, Salvador, 2007.

21. OLIVEIRA, M. P.; SILVA, C. R. Synthesis of latexes with low concentration of volatile organic compounds (VOCs): effect of reduction techniques of VOCs on the properties of latexes and paints - **Polímeros** 24 (4). São Carlos, 2014.

22. PASSUELO, A. C. B. Aplicação da Avaliação do Ciclo de Vida em Embalagens Descartáveis para Frutas: Estudo de Caso. Dissertação de Mestrado - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2007.

23. RIBEIRO, P. H. **Contribuição ao banco de dados brasileiro para apoio à avaliação do ciclo de vida: fertilizantes nitrogenados**. 2009. 375 p. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2009.

24. SANTOS, C. **Prevenção à Poluição Industrial: Identificação de Oportunidades, Análise dos Benefícios e Barreiras**. 2005. 304 p. Tese (Doutorado em Engenharia Ambiental) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2005.

25. SANTOS J. P., et.al; **Patent** US9926430B2 - Green coalescent agent composition containing mixtures of monoesters and diesters, 2018.

26. SCHROEDER, et.al - Effect of a coalescing aid on the earliest stages of polymer diffusion in poly(butyl acrylate-co-methyl methacrylate) latex films; **Polymer** Elsevier; journal homepage: *www.elsevier.com/locate/polymer*, 2011.

27. SILVA, A. L. R. **Desenvolvimento de fatores de normalização de impactos ambientais regionais para Avaliação de Ciclo de Vida de produtos no Estado de São Paulo**. 2010. 168 p. Tese (Doutorado em Engenharia Ambiental) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2010.

28. SILVA, G. A.; KULAY, L. Avaliação do Ciclo de Vida. In: VILELA JR., A.; DEMAJOROVIC, J. (Org.). **Modelos e ferramentas de Gestão Ambiental**: desafios e perspectivas para as organizações. 1ª Ed. São Paulo: Editora Senac São Paulo, pp. 313-336. 2006

29. SOUZA, C.C.; BARBASTEFANO, R.G.; TEIXEIRA, R.C. Life cycle assessment research in Brazil: characteristics, interdisciplinarity and applications. **International Journal of Life Cycle Assessment**, on-line first, 2016.

30. STIEBEROVA B, et al. Application of ZnO Nanoparticles in a Self-cleaning Coating on a Metal Panel: An Assessment of Environmental Benefits. ACS **Sustainable Chemistry & Engineering**, 5 (3). pp 2493-2500. 2017.

31. STEWARD P.A.; HEARNA J.; WILKINSON M.C. - An overview of polymer latex film formation and properties. **Advances in Colloid & Interface Science**, 2000.

32. SWAN, P. An introduction to coalescing aids and Eastman film forming technologies. In **Proceedings of the 36th International Conference on Coatings**

Technology, May 23–25, 2005 (pp. 265–278). Pardubice: Czech Republic. Univerzitat Pardubice. 2005.

33. SUGAWARA, E.T. **Comparação dos desempenhos ambientais do B5 etílico de soja e do óleo diesel, por meio da Avaliação do Ciclo de Vida (ACV)**. 240p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2012

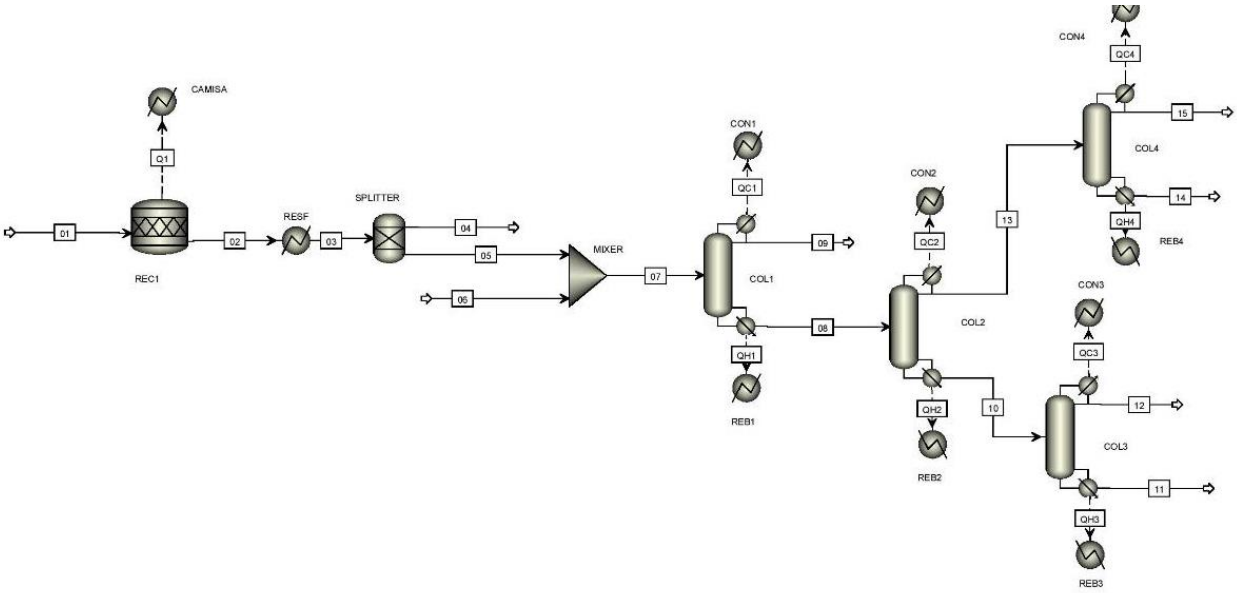
34. TAYLOR J. W., et.al; **Patent** US20180002563A1Acid-containing polymers as coalescing agents for latexes, 2018.

35. UPADHYAYULA V.K.K., et al. Screening-Level Life Cycle Assessment of Graphene-Poly(etherimide) Coatings Protecting Unalloyed Steel from Severe Atmospheric Corrosion. ACS **Sustainable Chemistry & Engineering**, 5 (3). pp 2656-2667. 2017.

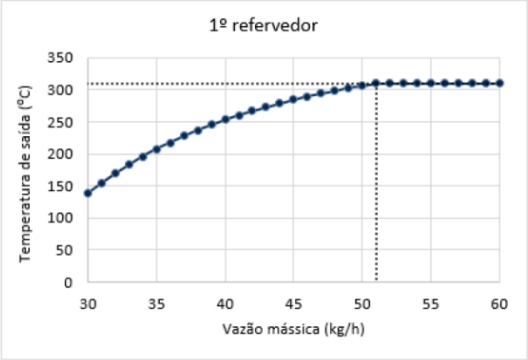
36. WIGGER H., STEINFELDT M., BIANCHIN, A. Environmental benefits of coatings based on nano-tungsten-carbide cobalt ceramics. **Journal of Cleaner Production**. 148. pp. 212-222. 2017.

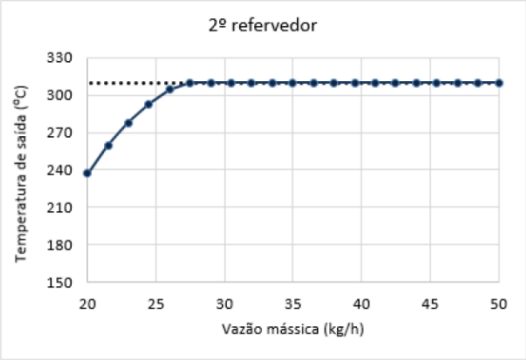
APÊNDICES

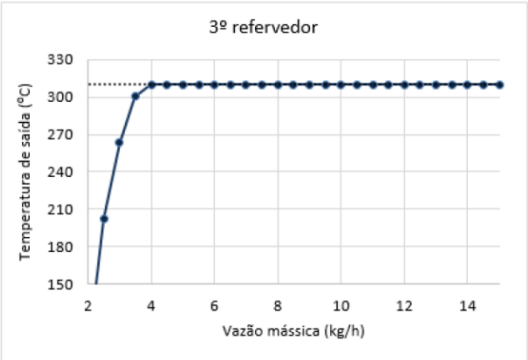
Apêndice A1 – Fluxograma geral do processo de produção de CA-P gerado a partir de simulação no software computacional Aspen Plus - Aspentech®

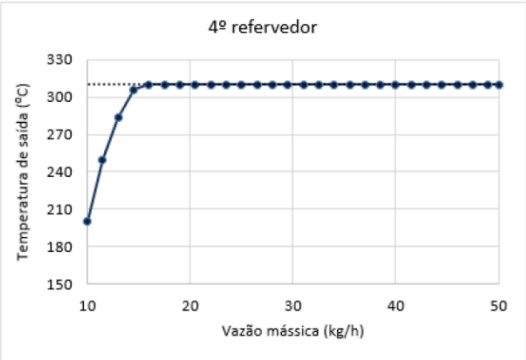
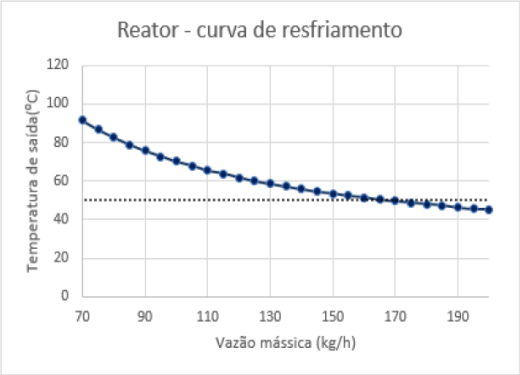
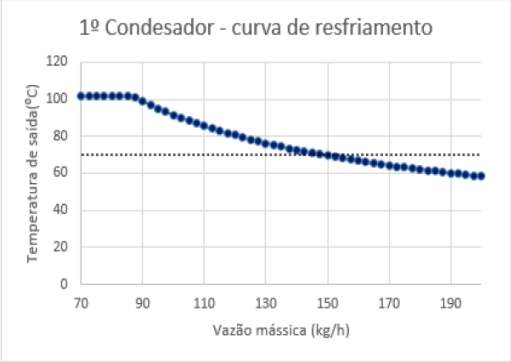
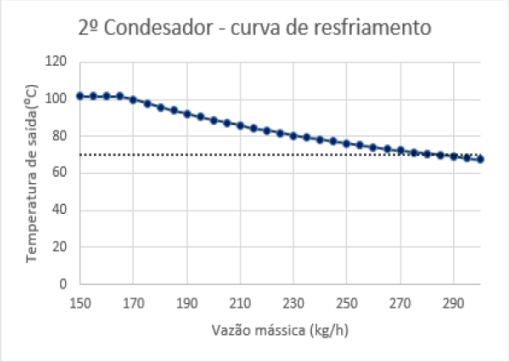
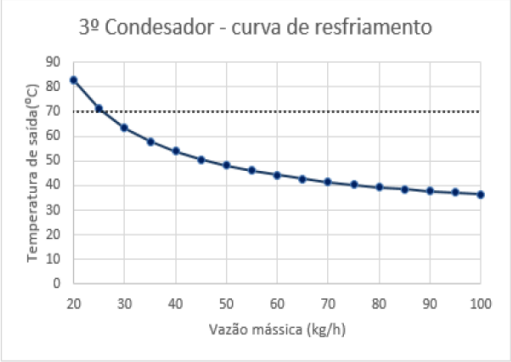
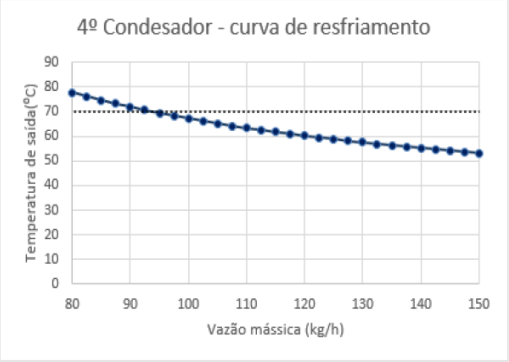


Apêndice A2 - Curvas de Temperatura vs. Vazão mássica para os Refervedores de TA2, TB1 e TB2









Apêndice A3 – Curvas de Temperatura vs. Vazão mássica para os Condensadores de TA2, TB1 e TB2, e para a camisa de refrigeração do Reator de processo