

08 a 11 de Outubro de 2018
Instituto Federal Fluminense
Búzios - RJ

ESTUDO DA ECOEFICIÊNCIA DE PROCESSOS DE PRODUÇÃO DE ACRILONITRILA

Danyelle Soares Bastião¹ – danyellesoares@id.uff.br

Igor Nardi Caxiano¹ – igornardi@id.uff.br

Rafael Oliveira dos Santos¹ – ro_santos@id.uff.br

Diego Martinez Prata¹ – pratadiego@gmail.com

¹ Universidade Federal Fluminense, Departamento de Engenharia Química - Niterói, RJ, Brasil

Resumo. A acrilonitrila é um produto de grande importância comercial, sendo utilizada principalmente na fabricação de plásticos e fibras acrílicas. O presente trabalho apresenta um estudo comparativo da ecoeficiência de dois processos de produção de acrilonitrila baseados na amoxidação catalítica do propileno. O processo onde a recuperação do produto da corrente de saída do reator inclui uma etapa de condensação parcial é proposto com o intuito de reduzir principalmente o consumo de água pela planta. Os resultados obtidos com o auxílio da simulação computacional mostraram que a escolha do processo modificado ao invés do processo convencional resulta em uma economia de água em torno de 47 %, que representa uma redução de 300 m³/h na vazão de água utilizada no processo. O ganho total em ecoeficiência obtido é de 75 % quando considerados os ecoindicadores de consumo energético, consumo de água, emissão de CO₂ e geração de efluentes. Isto mostra que modificações que visam sustentabilidade agregam valor ao processo, ambiental e economicamente.

Palavras-chave: Acrilonitrila, Ecoindicadores, Ecoeficiência, Simulação Computacional

1. INTRODUÇÃO

A acrilonitrila é um composto orgânico químico utilizado na fabricação de diversos polímeros e copolímeros como fibras acrílicas (utilizadas na indústria têxtil), plástico ABS (*Acrylonitrile-Butadiene-Styrene* – Acrilonitrila-Butadieno-Estireno) e borracha nitrílica, além de ser um dos componentes presentes em resinas plásticas, tintas e adesivos (American Chemical Society, 1996). Em 2015, a produção de acrilonitrila ultrapassou 6 milhões de toneladas (Qin, 2015) e, segundo Hansora (2013), quase toda essa produção é realizada por meio do processo Sohio, que utiliza como matérias-primas propileno, amônia e oxigênio.

A produção de acrilonitrila por meio do processo Sohio envolve a emissão de gases que devem ser tratados para a remoção de acroleína e nitrilas tóxicas, assim como a produção de

impurezas pesadas que devem ser destruídas ou encaminhadas para aterros sanitários para evitar a contaminação da água e do solo (Dimian e Bildea, 2008). Esses altos riscos ambientais tornam relevantes a análise quantitativa dos impactos associados à produção da acrilonitrila e estudos de possíveis modificações do processo que permitam torná-lo mais ecoeficiente.

Dessa forma, o presente trabalho utiliza dados obtidos por simulação computacional para avaliar comparativamente a ecoeficiência de dois processos de produção de acrilonitrila – o convencional e o modificado com uma etapa de condensação parcial - considerando os ecoindicadores de emissão de CO₂, geração de efluentes, consumo de água e de energia.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Nesta seção, é realizada uma revisão bibliográfica do processo de produção de acrilonitrila estudado no presente trabalho e da planta de utilidades proposta. Apresentam-se ainda breves considerações sobre ecoindicadores e a metodologia do Índice Comparativo de Ecoeficiência.

2.1 Processo de produção de acrilonitrila

No presente trabalho, estudou-se o processo de produção de acrilonitrila a partir de propileno conforme apresentado por Dimian e Bildea (2008). Os autores basearam-se no processo Sohio, bem como em tecnologias empregadas industrialmente na síntese do composto e nos processos de separação associados, com o objetivo de desenvolver uma planta com capacidade de 120.000 t/ano de acrilonitrila para fabricação de polímeros. A Fig. 1 apresenta um fluxograma adaptado do processo.

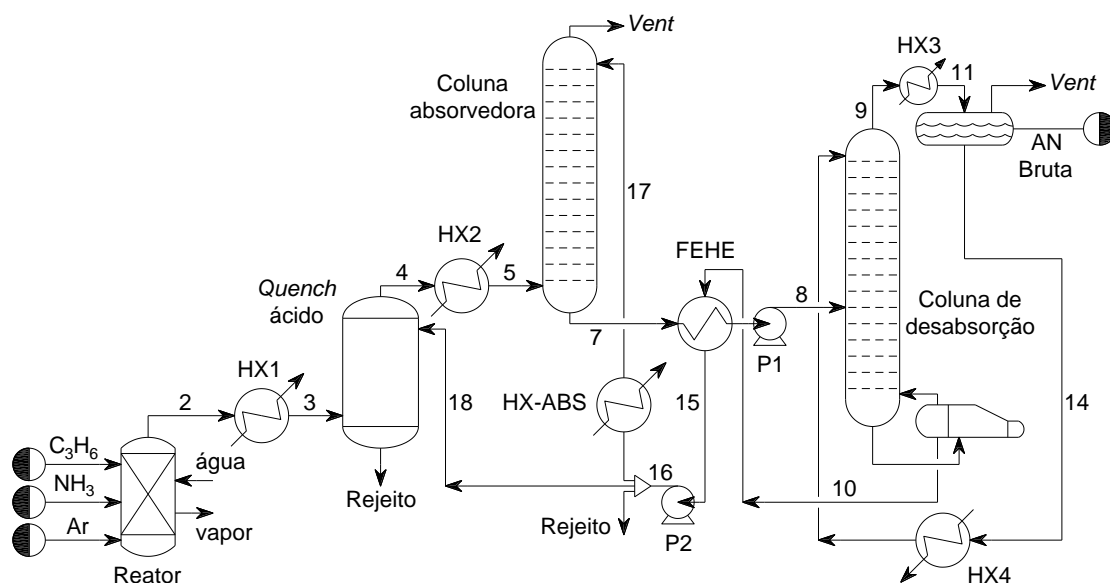


Figura 1- Processo de produção de acrilonitrila descrito por Dimian e Bildea (2008).

A acrilonitrila (AN) é produzida no reator de leito fluidizado em fase gasosa a partir de propileno, amônia e oxigênio por meio da reação de amoxidação do propileno, conforme a Eq. (1). Devido ao caráter exotérmico da reação, o reator é resfriado com água por meio de serpentinas, formando vapor de alta pressão.



A reação ocorre em sítios ativos de catalisadores com propriedades redox, sendo comumente utilizados catalisadores a base de óxidos de molibdênio e antimônio como $\text{Bi}_2\text{O}_3\cdot\text{MoO}_3$. Segundo Dimian e Bildea (2008), a quimissorção da amônia é uma parte fundamental do mecanismo da reação, e sua ausência nos sítios ativos promove reações indesejadas com o oxigênio. Por esses motivos, o oxigênio é introduzido separadamente aos demais reagentes no reator, de maneira transversal ao fluxo principal.

A Tabela 1 apresenta as reações que ocorrem no reator e suas respectivas conversões. A primeira reação corresponde à reação principal de formação de acrilonitrila ($\text{C}_3\text{H}_3\text{N}$), enquanto as demais são reações paralelas indesejadas de formação de acetonitrila ($\text{C}_2\text{H}_3\text{N}$), cianeto de hidrogênio (HCN), CO_2 , acroleína ($\text{C}_3\text{H}_4\text{O}$) e succinonitrila ($\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2$), respectivamente.

Tabela 1- Reações no reator de amoxidação do propileno para produção de acrilonitrila

Reação	Conversão
$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{NH}_3 + 1,5 \text{ O}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_3\text{N} + 3 \text{ H}_2\text{O}$	0,801
$2 \text{ C}_3\text{H}_6 + 3 \text{ NH}_3 + 3 \text{ O}_2 \rightarrow 3 \text{ C}_2\text{H}_3\text{N} + 6 \text{ H}_2\text{O}$	0,021
$\text{C}_3\text{H}_6 + 3 \text{ NH}_3 + 3 \text{ O}_2 \rightarrow 3 \text{ HCN} + 6 \text{ H}_2\text{O}$	0,027
$\text{C}_3\text{H}_6 + 4,5 \text{ O}_2 \rightarrow 3 \text{ CO}_2 + 3 \text{ H}_2\text{O}$	0,107
$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_4\text{O} + \text{H}_2\text{O}$	0,027
$\text{C}_3\text{H}_3\text{N} + \text{HCN} \rightarrow \text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2$	0,005

As alimentações encontram-se a 623,15 K e 222,9 kPa, com vazões molares de 340 kmol/h de propileno, 408 kmol/h de amônia e 646 kmol/h de oxigênio com 2584 kmol/h de nitrogênio. A adição de 30 kmol/h de água na alimentação do reator tem o objetivo de suprimir reações indesejadas como a oxidação da amônia (Licht *et al.*, 2016).

O efluente do reator é resfriado e submetido a um *quench* ácido com solução aquosa de 30 a 40 % de H_2SO_4 na qual remove-se o excesso de NH_3 . A fase vapor resultante é introduzida em uma torre que utiliza água a 278,15 K para absorção da acrilonitrila, sendo os compostos leves, CO_2 e NH_3 removidos em uma corrente gasosa e encaminhados para tratamento.

A corrente líquida que sai da absorvedora é encaminhada a uma coluna de desabsorção, na qual é utilizado como vaso de topo um decantador com reciclo da fase aquosa. A acrilonitrila bruta é obtida na fase orgânica e encaminhada a etapas posteriores de purificação que não são abordadas no presente trabalho. A água obtida no produto de fundo é em parte direcionada a etapas de tratamento para posterior descarte e em parte reutilizada no *quench* ácido e na coluna absorvedora.

2.2 Processo com condensação parcial

Com base em uma tecnologia patenteada por Wu (1980), Dimian e Bildea (2008) sugerem a modificação do processo de produção de acrilonitrila apresentado anteriormente pela introdução de uma etapa de condensação parcial. Nessa configuração, o efluente do reator é resfriado por contato direto no *quench* ácido e parcialmente condensado a 283,15 K, sendo em seguida encaminhado a um decantador trifásico no qual aproximadamente 50% da acrilonitrila é recuperada em fase orgânica e, posteriormente, direcionada para as etapas de purificação juntamente com a acrilonitrila bruta. A fase vapor é comprimida a 450 kPa e resfriada a 293,15 K em um refrigerador a ar e segue à torre de absorção com água, enquanto a fase aquosa é adicionada à fase líquida da absorvedora para recuperação da acrilonitrila. A Fig. 2 apresenta um fluxograma do processo com a modificação descrita.

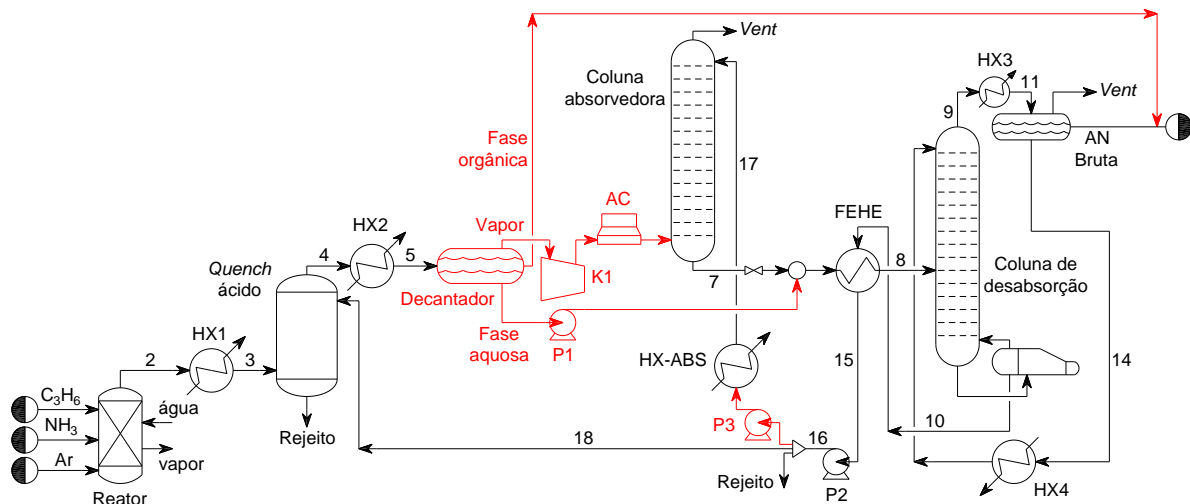


Figura 2- Processo de produção de acrilonitrila modificado com condensação parcial.

Segundo Wu (1980), a tecnologia apresentada é capaz de aumentar a eficiência de recuperação da acrilonitrila e diminuir o investimento de capital e os custos operacionais do processo devido, principalmente, às menores dimensões requeridas para os equipamentos da etapa de recuperação. A possibilidade de redução dos impactos ambientais por meio desta tecnologia será avaliada quantitativamente pelo cálculo dos ecoindicadores e do Índice Comparativo de Ecoeficiência.

Ressalta-se que as condições de operação do reator, do trocador de calor HX1 e do *quench* ácido mantiveram-se idênticas às do processo convencional. Para contribuir com a redução no consumo de água pela modificação implementada, a pressão de operação da torre absorvedora, igual a 162 kPa no primeiro processo, é aumentada em 288 kPa. A configuração das bombas foi alterada de forma apropriada para atender às novas características do processo.

2.3 Planta de utilidades

Os processos de aquecimento e refrigeração presentes na produção de acrilonitrila tornam necessária uma planta de utilidades auxiliar, capaz de fornecer vapor de aquecimento e água de refrigeração ao processo. De maneira a obter-se resultados mais realistas para o consumo de água e energia na análise da ecoeficiência, a planta de utilidades representada no fluxograma da Fig. 3 foi proposta com base nos sistemas de água de refrigeração e vapor de aquecimento apresentados respectivamente por Turton *et al.* (2012) e Boyd (2011).

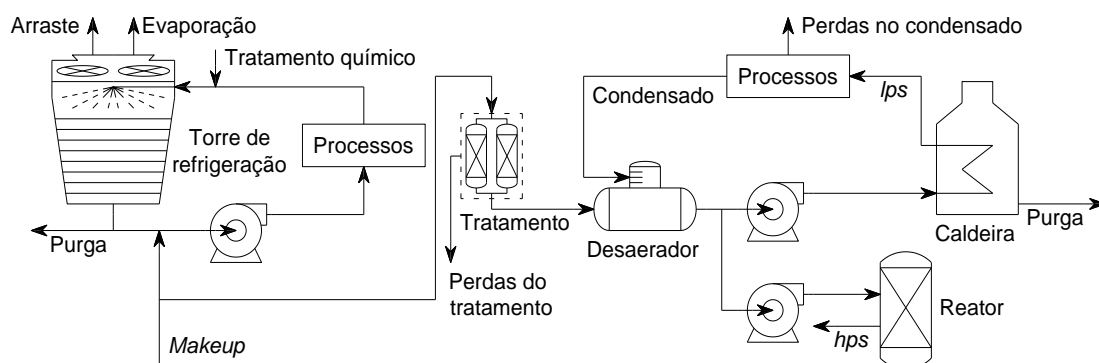


Figura 3- Planta de utilidades para o processo de produção de acrilonitrila.

Considerou-se que a água de refrigeração é inserida nos equipamentos de troca térmica a 303,20 K e sai a 318,15 K (Turton *et al.*, 2012), enquanto a água de *makeup*, inicialmente a 303,15 K e à pressão atmosférica, é aquecida na caldeira para formar vapor de baixa pressão (*lps – low pressure steam*) a 408,15 K e 308 kPa, segundo as heurísticas apresentadas por Seider *et al.* (2009). Ainda segundo os autores, considerou-se que o resfriamento do reator com água gera vapor de alta pressão (*hps – high pressure steam*) a 527,59 K e 4228 kPa.

Devido a perdas associadas ao tratamento e retorno de condensado e às purgas presentes na caldeira e na torre de refrigeração, é necessária uma corrente de *makeup*, que resulta no consumo de água associado à produção de acrilonitrila. O consumo energético dos equipamentos da planta de utilidades também é contabilizado nos ecoindicadores de consumo de energia e emissão de CO₂ do processo.

A Tabela 2 apresenta as heurísticas relacionadas às perdas de água, empregadas na elaboração da planta de utilidades, com as respectivas referências.

Tabela 2- Heurísticas para perdas de água na planta de utilidades

Processo	Perda	Referência
Arraste (torre de refrigeração)	0,2 %	Walas (1990)
Evaporação (torre de refrigeração)	2,68 %	Walas (1990)
Perdas do tratamento (água aquecida e tratada)	1 %	Turton <i>et al.</i> (2012)
Perdas no condensado	20 %	Boyd (2011)
Purga na torre	3 %	Walas (1990)
Purga na caldeira	1 %	Seneviratne (2007)

2.4 Ecoindicadores e Índice Comparativo de Ecoeficiência

Os ecoindicadores são ferramentas utilizadas para determinar quantitativamente a ecoeficiência de empreendimentos industriais e, desta maneira, associar os impactos ambientais com o desempenho econômico (Müller *et al.*, 2015). A maneira mais comumente utilizada para expressar um ecoindicador é através da razão entre uma variável ambiental (tal como consumo de água ou emissão de CO₂) e uma variável econômica, para a qual normalmente utiliza-se a taxa de produção (UNCTAD, 2004). Desta maneira, quanto menor a razão, melhor o resultado.

Devido à ampla variedade de impactos ambientais presentes em processos industriais, o cálculo de apenas um ecoindicador não é suficiente para corretamente avaliar a ecoeficiência. Diante da necessidade de comparar-se quantitativamente diferentes processos industriais do ponto de vista da sustentabilidade, a metodologia do Índice Comparativo de Ecoeficiência ou ICE foi proposta por Pereira *et al.* (2018), e baseia-se na construção de gráficos de radar com os valores normalizados de diversos ecoindicadores. O cálculo da área de cada gráfico permite, por sua vez, determinar qual processo estudado apresenta maior ecoeficiência.

3. METODOLOGIA

Nesta seção apresenta-se a metodologia utilizada para o cálculo dos ecoindicadores de consumo energético, emissão de CO₂, consumo de água e geração de efluentes através da simulação das plantas de produção de acrilonitrila com e sem condensação parcial com base na descrição dos respectivos processos apresentada por Dimian e Bildea (2008). O Índice Comparativo de Ecoeficiência é calculado utilizando-se os ecoindicadores citados.

3.1 Simulação computacional

As simulações computacionais foram realizadas no *software* UniSim Design Suite R390.1 no estado estacionário. A planta de produção de acrilonitrila foi especificada com base nas condições operacionais, composição das correntes de processo e especificações dos equipamentos apresentadas no trabalho de Dimian e Bildea (2008), utilizando-se o modelo termodinâmico UNIQUAC-RK. A planta de utilidades, por sua vez, foi especificada por meio das heurísticas apresentadas na seção 2.3, utilizando-se o modelo termodinâmico UNIQUAC.

3.2 Ecoindicadores e Índice Comparativo de Ecoeficiência

A Tabela 3 apresenta as expressões para o cálculo dos ecoindicadores de consumo de energia, emissão de CO₂, consumo de água e geração de efluentes, escolhidos para a análise da ecoeficiência do processo de produção de acrilonitrila.

Tabela 3- Expressões para o cálculo dos ecoindicadores

Ecoindicador	Expressão	Unidade
Consumo de energia	$EI_E = \frac{\text{Energia}_{\text{elétrica}} + \text{Energia}_{\text{combustão}}}{\text{Taxa de recuperação de AN}}$	GJ/t _{AN}
Emissão de CO ₂	$EI_{CO_2} = \frac{\text{Emissões (combustão + indiretas)}}{\text{Taxa de recuperação de AN}}$	t _{CO₂} /t _{AN}
Consumo de água	$EI_{H_2O} = \frac{\text{Makeup} - \text{Vapor}_{\text{exportado}}}{\text{Taxa de recuperação de AN}}$	m ³ _{H₂O} /t _{AN}
Geração de efluentes	$EI_{ef} = \frac{\text{Purga}_{(\text{refrigeração+caldeira})} + \text{Perdas}_{(\text{processos+rejeitos})}}{\text{Taxa de recuperação de AN}}$	m ³ _{ef} /t _{AN}

A variável econômica escolhida foi a taxa de produção, que corresponde à vazão mássica de acrilonitrila na corrente bruta encaminhada para purificação. As vazões volumétricas consideradas no consumo de água e geração de efluentes foram obtidas pelas simulações. Para o consumo de energia elétrica, considerou-se que as bombas e compressores operam com 75 % de eficiência. O consumo de energia por combustão é proveniente da caldeira, na qual considerou-se a queima de gás natural a uma eficiência de 80 % (Seider *et al.*, 2009). As emissões de CO₂ por combustão foram calculadas utilizando-se o fator de conversão para o gás natural de 0,0561 t_{CO₂}/GJ (IPCC, 2006), enquanto para as emissões indiretas por consumo de energia elétrica utilizou-se o fator de 0,0258 t_{CO₂}/GJ (MCTIC, 2018).

4. RESULTADOS

Nas próximas seções, são apresentados os resultados da simulação computacional das plantas de produção de acrilonitrila, os valores obtidos para os ecoindicadores avaliados no presente estudo e, por fim, o cálculo do ICE correspondente.

4.1 Simulação computacional

A Tabela 4 traz os resultados obtidos por simulação comparados aos dados disponibilizados por Dimian e Bildea (2008) para correntes do processo sem a etapa de

condensação parcial. Nota-se pela Tabela 4 que a simulação no UniSim foi satisfatória, uma vez que se obtiveram resultados próximos aos apresentados pelos autores, sendo os maiores desvios relativos observados em componentes com fluxos molares muito baixos.

Deve-se salientar que alguns dos pequenos desvios observados devem-se ao artigo de referência desconsiderar a formação de succinonitrila a partir da acrilonitrila e HCN (conforme apresentado na última reação da Tabela 1), além de os autores terem utilizado o *software* Aspen Plus na simulação computacional, enquanto no presente trabalho utiliza-se o UniSim.

Tabela 4- Resultados da simulação computacional do processo convencional

	Corrente 5			Corrente 7			AN Bruta		
	D&B	UniSim	Desvio (%)	D&B	UniSim	Desvio (%)	D&B	UniSim	Desvio (%)
Fluxo molar (kmol/h)									
C ₃ H ₆	5,78	5,78	-	4,6E-3	2,3E-2	-400,0	1,1E-3	1,1E-3	-
O ₂	26,35	26,18	0,6	4,9E-3	2,0E-2	-314,9	1,8E-4	1,8E-4	-
N ₂	2584	2584	-	0,252	1,017	-303,1	5,5E-3	5,5E-3	-
NH ₃	-	-	-	-	-	-	-	-	-
CO ₂	109,14	109,15	0,0	0,54	0,50	7,5	0,277	0,277	-
HCN	27,54	26,18	4,9	27,54	26,16	5,0	26,93	26,15	2,9
Acrilonitrila	272	271	0,5	271,0	271,1	-0,1	271,0	271,0	-
Acroleína	9,18	9,18	-	9,04	9,14	-1,1	9,03	9,03	-
Acetonitrila	10,71	10,74	-0,2	10,71	12,38	-15,6	10,45	10,45	-
H ₂ O	993,47	993,55	0,0	10999	10929	0,6	49,4	49,4	-
Succinonitrila	-	1,36	-	-	15,96	-	-	-	-
Total	4038	4037	2,5E-2	11318	11265	0,5	367,1	366,3	0,2
T (K)	303,15	303,15	-	301,15	297,20	1,3	303,15	303,15	-
P (kPa)	172,3	172,3	-	162,1	162,1	-	152,0	152,0	-

A simulação do processo com condensador parcial foi realizada conforme descrito pelos autores de referência, objetivando a obtenção da mesma corrente de recuperação de acrilonitrila do processo convencional.

Para esse processo, os resultados obtidos para a corrente de acrilonitrila bruta permitiram observar que divergências dos valores apresentados por Dimian e Bildea (2008) ocorrem apenas na vazão molar de HCN, obtido na corrente de AN a 26,01 kmol/h, e na presença de pequena quantidade de succinonitrila ($1,28 \cdot 10^{-4}$ kmol/h), o que se deve novamente ao fato da formação desse composto ser desconsiderada pelos autores.

Para reduzir as diferenças intrínsecas entre os *softwares* utilizados, a simulação em UniSim utilizou para ambos os processos um separador de componentes para a realização do *quench* da saída do reator.

4.2 Ecoindicadores e Índice Comparativo de Ecoeficiência

Os ecoindicadores considerados foram obtidos conforme as expressões apresentadas na Tabela 3, onde a vazão de acrilonitrila recuperada corresponde à variável econômica e as variáveis ambientais foram obtidas pelas simulações dos processos estudados.

Os resultados evidenciaram a característica de elevado consumo de água na produção, o que faz com que a torre de refrigeração da planta de utilidades seja responsável por 19 % e 6 %

do consumo energético e emissões de CO₂ provenientes de fontes indiretas para os processos convencional (processo 1) e com condensação parcial (processo 2), respectivamente.

A Tabela 5 apresenta os resultados para o cálculo do consumo de água. O reator gera cerca de 80 m³/h de vapor de alta pressão que é exportado pelo processo. Os resultados evidenciam a relevância da alteração do processo pelo uso da etapa de condensação parcial, que resulta na redução de 47 % do consumo de água.

Tabela 5- Resumo do cálculo do ecoindicador de consumo de água

	Consumo de água (m ³ /h)	
	Processo 1	Processo 2
Makeup para geração de vapor	133,4	104,2
Makeup para o sistema de refrigeração	580,1	309,4
Vapor exportado	79,7	79,7
Total	633,8	333,9
Acrilonitrila recuperada (t_{AN}/h)	14,38	14,37
Ecoindicador de consumo de água (m³/t_{AN})	44,0	23,2

A introdução da etapa de condensação parcial no processo também foi capaz de reduzir consideravelmente o consumo de energia, emissões de CO₂ e geração de efluentes, como pode ser observado pelos valores dos ecoindicadores correspondentes apresentados na Tabela 6, que traz ainda os respectivos valores normalizados de cada indicador considerado.

Tabela 6- Ecoindicadores calculados e valores normalizados

Categoria	Ecoindicador		Valor normalizado	
	Processo 1	Processo 2	Processo 1	Processo 2
Consumo de energia (GJ/t _{AN})	56,8	26,3	1,00	0,46
Emissão de CO ₂ (tCO ₂ /t _{AN})	3,2	1,4	1,00	0,46
Consumo de água (m ³ /t _{AN})	44,0	23,2	1,00	0,53
Geração de Efluentes (m ³ /t _{AN})	25,4	14,0	1,00	0,55

O ganho total em ecoeficiência pelo processo com condensador em relação ao convencional pode ser calculado pela metodologia do ICE, com base no gráfico de radar apresentado na Fig. 4.

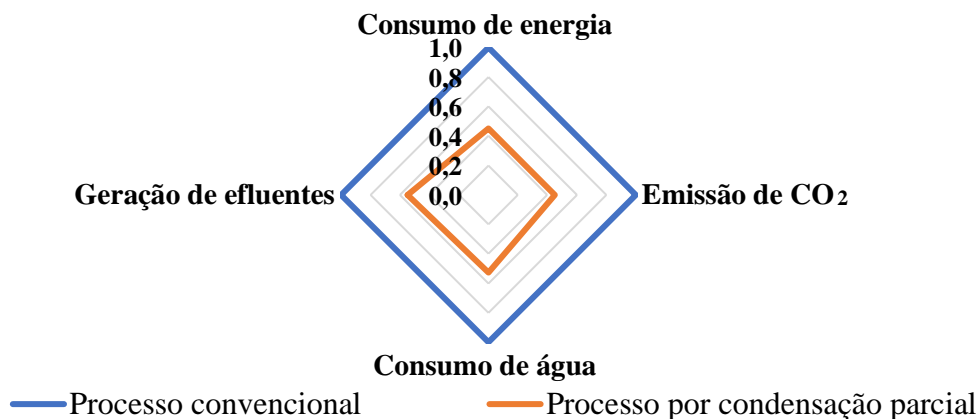


Figura 4- Gráfico de radar para o Índice Comparativo de Ecoeficiência.

Os cálculos apresentaram um ganho total de 75 %, o que mostra que o processo de produção e recuperação da acrilonitrila tem uma maior eficiência ambiental com relação aos ecoindicadores estudados quando baseado na condensação parcial da corrente de saída do reator que no método convencional. Como fica evidente pelos resultados apresentados, isso se deve principalmente à considerável redução do consumo de água pela planta.

5. CONCLUSÕES

O estudo do processo de produção e recuperação de acrilonitrila evidencia o elevado consumo de água devido às etapas de aquecimento e refrigeração. Os resultados obtidos por simulação computacional mostraram que esse elevado consumo de água reflete em outros aspectos ambientais como o consumo de energia por fontes de emissão indireta de CO₂, pelo qual a torre de refrigeração da planta de utilidades é responsável por cerca de 19 % e 6 % nos processos convencional e com condensação parcial, respectivamente.

O presente trabalho permitiu verificar que a modificação do processo convencional pela implementação de uma etapa de condensação parcial é uma alternativa válida para a redução do consumo de água do sistema. Além disso, essa implementação permite um aumento de 75 % na ecoeficiência do processo com relação aos ecoindicadores de consumo de água e energia, emissão de CO₂ e geração de efluentes, resultando em um melhor desempenho ambiental e econômico, visando sustentabilidade e agregando valor ao processo.

REFERÊNCIAS

- American Chemical Society (1996), *“The Sohio Acrylonitrile Process”*, American Chemical Society, Washington. Disponível em: <www.acs.org/content/acs/en/education/whatischemistry/landmarks/acrylonitrile.html>. Acesso em: 16 ago. 2018.
- Boyd, B. (2011), *“Guidelines for Estimating Unmetered Industrial Water Use”*. Department of Energy, Washington, D.C.
- Dimian, A.C.; Bildea, C.S. (2008), *“Chemical Process Design: Computer-Aided Case Studies”*, 1 ed., Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim.
- Hansora, D. (2013), *“Industrial manufacturing process of Acrylonitrile”*, LAP Lambert Academic Publishing, Saarbrücken.
- IPCC – Intergovernmental Panel on Climate Change (2006), *“2006 IPCC Guidelines for National Greenhouse Inventories”*, 1 ed., IGES, Japão.
- Licht, R.B.; Vogt, D.; Bell, A.T. (2016), The mechanism and kinetics of propene ammoxidation over α -bismuth molybdate. *Journal of Catalysis*, 339, 228-241.
- MCTIC – Ministério da Ciência, Tecnologia, Inovações e Comunicações (2018), *“Fator médio – Inventários corporativos”*. Disponível em: <http://www.mctic.gov.br/mctic/opencms/ciencia/SEPED/clima/textogeral/emissao_corporativos.html>. Acesso em: 16 ago. 2018.
- Müller, K.; Holmes, A.; Deurer, M.; Clothier, B.E. (2015), Eco-efficiency as a sustainability measure for kiwifruit production in New Zealand. *Journal of Cleaner Production*, 105, 333-342.
- Pereira, C.P.; Prata, D.M.; Santos, L.S.; Monteiro, L.C.P. (2018), Development of Eco-efficiency Comparison Index Through Eco-Indicators for Industrial Applications. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 35, 63-84.
- Qin, M.Y. (2015), *“Acrylonitrile – World Market Overview”*. Disponível em: <http://www.orbichem.com/userfiles/apic%202015/apic2015_yang_qin.pdf>. Acesso em: 16 ago. 2018.
- Seider, W.D.; Seader, J.D.; Lewin, D.R.; Widagdo, S. (2009), *“Product and Process Design Principles – Synthesis, Analysis, And Evaluation”*, 3 ed., John Wiley & Sons, Inc., U.S.
- Seneviratne, M. (2007), *“A Practical Approach to Water Conservation for Commercial and Industrial Facilities”*, 1 ed., Elsevier Science, Massachusetts.
- Turton, R.; Bailie, R.; Whiting, W.B.; Shaeiwitz, J.A.; Bhattacharyya, D. (2012), *“Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes”*, 4 ed., Prentice Hall, New Jersey.
- UNCTAD – United Nations Conference on Trade and Development (2004), *“A Manual for the Preparers and Users of Eco-efficiency Indicators”*, United Nations, New York.

Walas, S.M. (1990), “*Chemical Process Equipment – Selection and Design*”, 1 ed., Butterworth-Heinemann, Massachusetts.

Wu, H.C. (1980), “*Recovery of acrylonitrile or methacrylonitrile by condensation*”, US Patent 4234510.

ECO-EFFICIENCY STUDIES IN ACRYLONITRILE PRODUCTION PROCESSES

Abstract. *Acrylonitrile is a product of great industrial relevance, being mainly applicable in the manufacture of plastics and acrylic fibers. The present work presents a study on the eco-efficiency of two acrylonitrile production processes by propene ammoxidation. The process in which the acrylonitrile is recovered from the reactor effluent by partial condensation is proposed mainly to reduce water consumption in the plant. Results obtained via computer simulation showed that using the modified instead of the conventional one was able to reduce water consumption by 47 %, which corresponds to a reduction of 300 m³/h in the total water used. Eco-efficiency is increased by 75 % when considering the water and energy consumption, CO₂ emissions and wastewater generation eco-indicators. This shows that modifications aiming sustainability can environmentally and economically add value to the process.*

Keywords: *Acrylonitrile, Eco-indicators, Eco-efficiency, Computer Simulation*