

EXTRACCIÓN DE BENCENO EN EFLUENTES DE LA INDUSTRIA PETROQUÍMICA

BENZENE EXTRACTION FROM PETROCHEMICAL INDUSTRY EFFLUENTS

Sebastián Gómez P.¹

Resumen

Se presentan los cálculos de una simulación en la operación de extracción líquido-líquido de corrientes típicas de la industria petroquímica, compuestas principalmente por heptano y benceno. El solvente seleccionado con base en las propiedades químicas del sistema formado es DMF (di-metil-formamida), estudiando así su topología del equilibrio líquido-líquido con el fin de evaluar la viabilidad de la operación de extracción. Se muestran los cálculos de la simulación mediante la utilización de las estrategias ISR de Tsuboka y Katayama (1976) para evaluar el porcentaje de recuperación de benceno, que posteriormente será la base en la implementación de esta operación en la utilización de corrientes de alto impacto ambiental, evitando así su disposición en la naturaleza. Este proyecto se considera como una propuesta con el fin de disminuir las consecuencias de índole ambiental, causadas por la liberación de sustancias de carácter apolar en la naturaleza, llevándolas a un nivel en el que se pueden aprovechar como materias primas para otros procesos industriales, solventes o aditivos, generando así valor agregado al utilizar sustancias que con una visión poco productiva serían desechados. El porcentaje de recuperación fue del 96,2%, lo suficientemente alto como para considerarse como una propuesta de aplicación industrial.

Palabras clave: Petroquímica, Extracción en fase líquida, Equilibrio líquido-líquido, Benceno.

Abstract

The simulation calculations are presented in the liquid-liquid extraction operation of typical petrochemical industry streams, mainly composed of heptane and benzene. The solvent chosen based on the chemical properties of the system formed is DMF (dimethylformamide), thus studying its liquid-liquid equilibrium topology in order to evaluate the viability of the extraction operation. Simulation calculations are shown using Tsuboka y Katayama (1976) ISR strategies to evaluate the percentage of benzene recovery, which will subsequently be the basis for the implementation of this operation in the use of High environmental impact, thus avoiding its disposition in nature. This project is considered as a proposal in order to reduce the environmental consequences caused by the release of apolar substances in nature, taking them to a level where they can be used as raw materials for other industrial processes, solvents Or additives, thus generating added value by using substances that with an unproductive vision would be discarded. The recovery rate was 96.2%, high enough to be considered as a proposal for industrial application.

Keywords: Petrochemistry, Liquid phase extraction, Liquid-liquid equilibrium, Benzene.

¹ Estudiante de ingeniería química, co-investigador del Semillero Grupo de Investigación en Procesos de Separación no Convencionales, Fundación Universidad de América. Bogotá D. C., Colombia. sebastian.gomez@estudiantes.uamerica.edu.co.

INTRODUCCIÓN

En este documento se evalúa la extracción en fase líquida de benceno, la cual es una sustancia de alto interés industrial como materia prima en procesos reactivos, solvente en sistemas no acuosos, o aditivo en diferentes productos para el uso cotidiano (Ullmann, 1985), desde corrientes típicas de la industria petroquímica ricas en heptano, cuando en los procesos de destilación no se obtienen altos porcentajes de recuperación aun cuando el principio termodinámico en que se basan, diferencia en volatilidades relativas, son altas (Hála, *et al.*, 1968).

No se debe olvidar que el heptano también es de alto interés industrial por su capacidad idónea como solvente no polar, en pinturas, por ejemplo (Ullmann, 1985), por lo que se logra la separación de dos sustancias que individualmente generan valor agregado en los procesos donde se ven involucradas (Turton, *et al.*, 2008). No obstante, una de las principales razones por las cuales se ejecuta este proyecto es que la disposición de estas mezclas heptano-benceno, en algunas industrias, son realizadas en medios acuíferos, afectando notablemente la estabilidad ecosistémica del área donde se encuentran ubicadas estas plantas químicas (Duarte, *et al.*, 2001), por tanto es importante este trabajo con el fin de contribuir a disminución de este impacto mediante su aprovechamiento en otras áreas.

Es importante hacer notar que para poder evaluar la separación de estas sustancias, se debe seleccionar un solvente afín con el benceno (o heptano), excluyente uno con otro, esto con el fin de inducir a la inestabilidad termodinámica (Michelsen, 1982) que permite la formación de dos fases líquidas que por métodos mecánicos pueden ser fácilmente separables. (Henley y Seader, 2011) Solventes como el DMF (di-

metil-formamida), furfural o incluso ácidos orgánicos como acético o fórmico, son propuestos para este fin, según García, *et al.* (2009), necesariamente mezclados con agua, ya que le da un carácter anfipático a la mezcla que permite excluir al heptano (principalmente) en una de las fases líquidas.

El fundamento teórico de este trabajo tiene dos componentes principales: el equilibrio bifásico líquido-líquido y el modelo de ecuaciones MESH que sirve para evaluar la eficiencia del proceso de extracción. Este primer punto consiste en, como se dijo anteriormente, formar dos fases líquidas, conocidas como extracto (rica en solvente y soluto) y refinado (rica en diluyente). En este caso el soluto es el benceno y el diluyente el heptano. Para conocer la viabilidad de su separación es necesario conocer la topología termodinámica, es decir, su comportamiento como mezcla cuando son apareados con el solvente. El modelo de ecuaciones MESH lo que permite es solucionar las simulaciones que dan información sobre las cantidades de cada especie involucrada en las fases de refinado y extracto y, comparándolas con la alimentación, evaluar los porcentajes de recuperación, mediante la resolución de los balances de materia, energía, equilibrios de fases y restricciones físicas.

Por otro lado, el grupo de investigación en procesos de separación no convencionales (GPS) busca aplicar trabajos investigativos realizados con anterioridad sobre el estudio teórico-experimental en simulación de procesos químicos, explorando involucrarse en aspectos ambientales, los cuales son de alta aplicación con base en las necesidades modernas de la ingeniería química en el tratamiento de efluentes de diferentes tipos de industrias. En este caso, se enfatiza en la petroquímica, ya que es de las que más se relacionan con el impacto ambiental del día a día, por la misma naturaleza química de

las sustancias involucradas y su efecto en la resiliencia del planeta Tierra. Se debe incluir el hecho de que, para la mezcla escogida, la operación más común en la industria, la destilación, abarca sobrecostos energéticos y bajos porcentajes de recuperación, lo cual se busca solventar con la ejecución de este trabajo.

MÉTODOS

Para la solución de la columna de extracción presentada por Henley y Seader (2011) y mostrada en la Figura 1, se emplea el software Matlab® en la programación de las diferentes funciones para la solución de las ecuaciones MESH de cada uno.

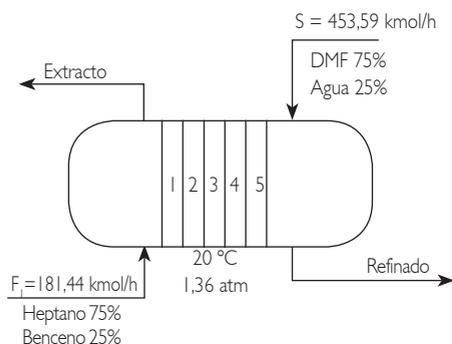


Figura 1. Esquema del problema de extracción a resolver

El modelo termodinámico empleado para los cálculos del equilibrio de fase fue el de NRTL, con parámetros de interacción extraídos de Cohen y Renon (1970). El plano de fases de la Figura 2 fue construido según la metodología de Sánchez, Estupiñán y Salazar (2010) y sirvió para la provisión de los estimados iniciales en el proceso iterativo de la simulación de la columna. El análisis de grados de libertad, fue realizado según la metodología de Sánchez, Arturo y Cárdenas (2010).

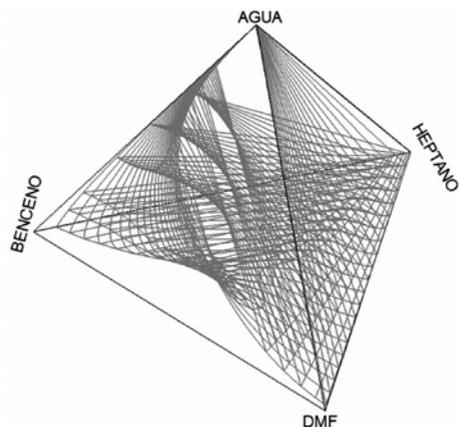


Figura 2. Representación de equilibrio líquido-líquido para el sistema Heptano-Benceno-DMF-Agua.

El porcentaje de recuperación se calculó como la cantidad extraída de benceno sobre la alimentada del mismo (Henley y Seader, 2011), el método de partición ISR fue empleado para la solución de las ecuaciones de balance de materia y equilibrio de fases válido solo para columnas de extracción en las que se puede considerar operación isotérmica (Tsuboka y Katayama, 1976), empleando el algoritmo de la Figura 3 el cual fue propuesto para este tipo de situaciones físicas.

RESULTADOS

Ejecutando el algoritmo de la Figura 3, el tiempo de iteración fue de 1,098 segundos con 70 iteraciones (RAM de 6 GB y procesador Intel Core i5), las cuales incluyen ambos bucles. Los resultados de la columna son mostrados en la Tabla 1, en la que la fracción de agua es obtenida por restricción de composición, las Figuras 4 y 5, en las cuales el eje derecho es para la fracción de heptano y el izquierdo para el resto de las especies y la Figura 6 en la que el eje derecho es para el flujo de refinado y el izquierdo para extracto. Los valores difieren en un margen menor al 7% respecto a los obtenidos por Henley y Seader (2011), validando el método como confiable cuando

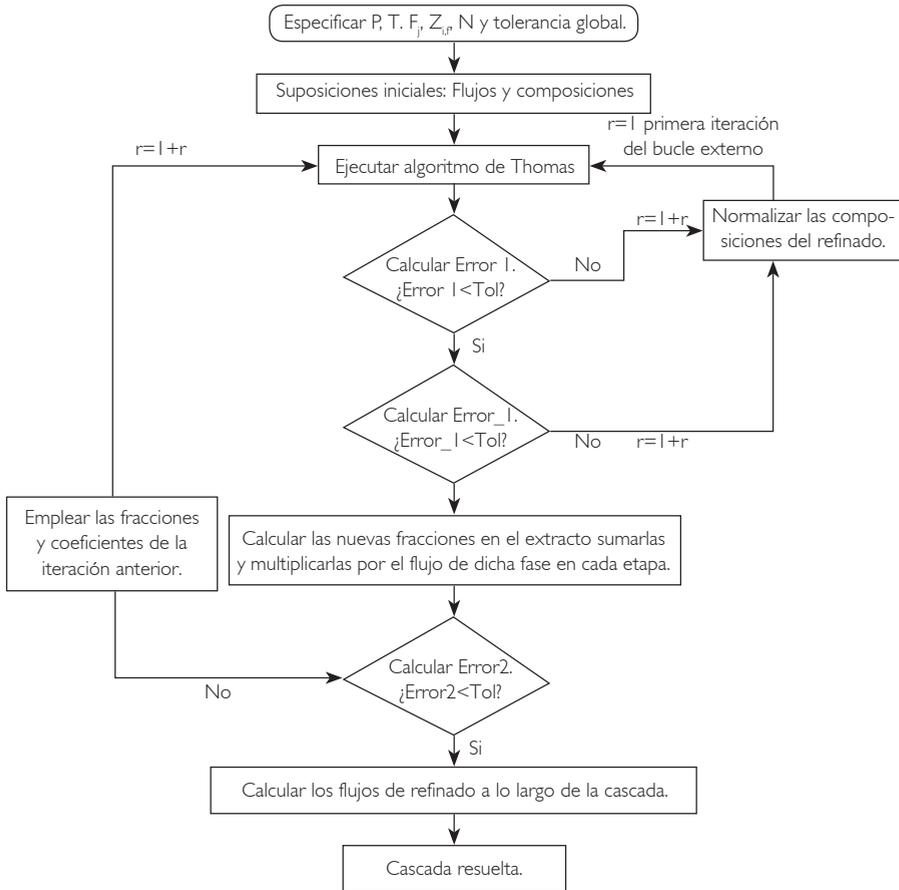


Figura 3. Algoritmo para la simulación de columnas de extracción por el método ISR.

de simular columnas de extracción se trata. Finalmente, el porcentaje de recuperación es calculado mediante la Ecuación 1.

ECUACIÓN 1. Cálculo del porcentaje de recuperación.

Tabla 1. Resultados del ejemplo de extracción de benceno de heptano. (1) Heptano (2) Benceno (3) DMF.

j	Extracto			Refinado			Ej (kmol/h)	Rj (kmol/h)
	(1)	(2)	(3)	(1)	(2)	(3)		
1	0,0269	0,0864	0,6620	0,7630	0,1610	0,0752	504,92	177,59
2	0,0226	0,0520	0,6970	0,8340	0,1010	0,0646	501,07	159,86
3	0,0204	0,0305	0,7140	0,8840	0,0608	0,0549	483,34	149,23
4	0,0194	0,0161	0,7250	0,9190	0,0325	0,0480	472,71	142,93
5	0,0179	0,0063	0,7320	0,9420	0,0131	0,0446	466,41	130,12

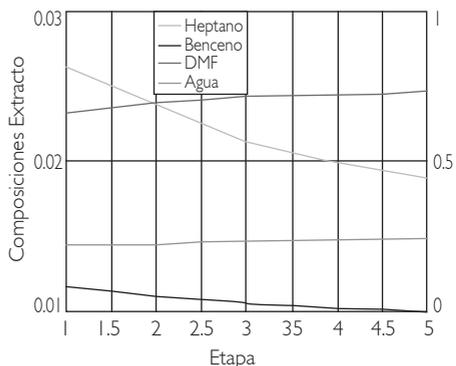


Figura 4. Perfil de composiciones para el extracto.

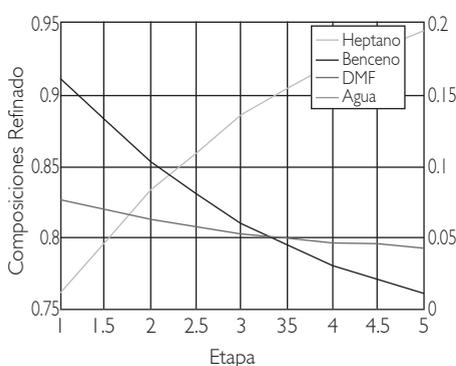


Figura 5. Perfil de composiciones para el refinado.

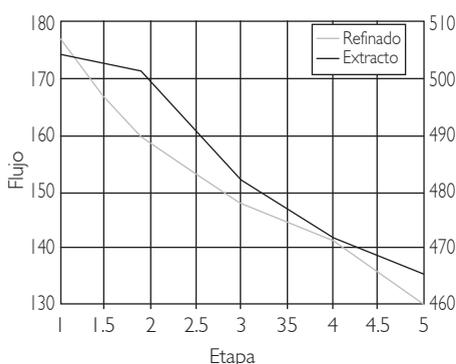


Figura 6. Perfil de flujos.

DISCUSIÓN Y RESULTADOS

Con base en los resultados obtenidos, se observa que es posible recuperar la mayor parte del benceno contenido en la alimentación, es decir que la operación puede ser hipotéticamente, un éxito. Por otro lado, no se debe olvidar que este método solo es aplicable a columnas isotérmicas. No obstante, esta aproximación es válida incluso en industrias reales (Tsuboka y Katayama, 1976; Perry y Green, 1999). El método es viable para la simulación de columnas de extracción en fase líquida con el modelo de ecuaciones MESH bajo la condición de equilibrio y totalmente aisladas. Sin embargo, cuando se trata de la ingeniería de detalle, este método falla con base en las suposiciones presentadas por Tsuboka y Katayama (1976) y Henley y Seader (2011), ya que el modelamiento del equilibrio es aproximado y tiende a generarse incertidumbre cuando de hacer correcciones por no idealidad se trata.

La convergencia del método es rápida y muestra resultados confiables a la hora de tener un primer acercamiento al diseño conceptual de una columna de extracción líquido-líquido. Es importante precisar que para la simulación de problemas de transferencia de masa, Matlab® ofrece versatilidad y facilidad en el manejo de los sistemas matriciales, en este caso, para la ejecución del algoritmo de Thomas (Burden y Faires, 2010) de la Figura 1. No obstante, se debe hacer énfasis en que este software no solo aplica para este tipo de problemas de ingeniería química, otras áreas como el diseño de reactores u optimización de procesos también pueden ser estudiadas por medio de Matlab®.

En cuanto al ámbito ambiental, aunque no es tratado con mucho detalle en este documento, el porcentaje de recuperación indica que puede ser disminuido el impacto

negativo en el ecosistema límite con las industrias en las que se manejan estos efluentes, ya que se puede separar y utilizar en otras aplicaciones. Sin embargo, como la composición de benceno aun no supera el 90% en alguna corriente, es necesaria otra serie de operaciones, como la destilación, para lograr este margen. Por tanto se considera esto como solo una propuesta que además depende de si una empresa estuviese dispuesta a hacer este tipo de inversión.

CONCLUSIONES

La recuperación de benceno de corrientes típicas de la industria petroquímica fue investigada mediante extracción en fase líquida con líquidos iónicos acuosos como mezclas de DMF y agua. El estudio del equilibrio líquido-líquido del sistema cuaternario fue estudiado con el fin de proporcionar un diseño conceptual que permitió la recuperación del 96,2% del benceno en fase extracto, como primera propuesta, debido a los bajos porcentajes de recuperación por destilación. La propuesta es viable desde el punto de vista computacional, ya que estos casos sencillos pueden ser fácilmente simulados y permiten abrir una brecha entre la reutilización de residuos aprovechables con su lesiva disposición a medios acuíferos, disminuyendo el impacto ambiental que este tipo de sustancias genera. Finalmente, este documento solo presenta una propuesta que dependerá de la gestión de proyectos de alguna empresa que la quiera incluir dentro de sus actividades, ya que inicialmente no se contempló su implementación debido a los costos asociados de una operación de separación adicional.

AGRADECIMIENTOS

Al Grupo de Investigación en Procesos de Separación no Convencionales; a profesores

y estudiantes, pues, con su gran apoyo, el desarrollo de este proyecto fue posible.

BIBLIOGRAFÍA

- Ullmann, F. (1985). *Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry*. VCH Verlagsgesellschaft. VCH Publishers.
- Hála, E., I. Wichterle, J. Polak, and T. Boublik. *Vapor-Liquid Equilibrium Data at Normal Pressures*, Pergamon, Oxford, p. 308 (1968).
- Turton, R., Bailie, R. C., Whiting, W. B., y Shaeiwitz, J. A. (2008). *Analysis, synthesis and design of chemical processes*. Pearson Education.
- Duarte-Davidson, R., Courage, C., Rushton, L., y Levy, L. (2001). Benzene in the environment: an assessment of the potential risks to the health of the population. *Occupational and environmental medicine*, 58(1), 2-13.
- Michelsen, M. L. (1982). The isothermal flash problem. Part I. Stability. *Fluid phase equilibria*, 9(1), 1-19.
- Perry, R. H., y Green, D. W. (1999). *Perry's chemical engineers' handbook*. McGraw-Hill Professional.
- Burden, R. y Faires, J. (2010). *Numerical Analysis* (9th ed). United States of America: Brooks/Cole Cengage Learning.
- Fontalvo, J. y Gómez, M. (2008) *Análisis y diseño de operaciones de separación con Aplicaciones En Matlab®* (1ra ed). Bogotá D.C, Colombia: Universidad Nacional de Colombia.
- Kontogeorgis, G. y Folas, G. (2010). *Thermodynamic Models for Industrial*

- applications: from classical and advanced mixing rules to association theories* (1ra ed). United Kingdom: John Wiley y Sons Ltd.
- Poling, B., Prausnitz, J. y O'Connell, J. (2011). *The Properties of Gases and Liquids* (5th ed). USA: McGraw-Hill.
- Seader, J. y Henley, E. (2011). *Separation Process Principles*. USA: John Wiley y Sons.
- Sánchez, C., Arturo, J. y Cárdenas, A. (2009). Algoritmo Etapa a Etapa para la simulación de cascadas de extracción en fase líquida aplicando el modelo de equilibrio. *Revista EIA*, 12 (1), 39-58.
- Sánchez, C., Cárdenas, A. y Arturo, J. (2010). Algoritmo Etapa a Etapa para la simulación de cascadas de extracción en fase líquida. *Revista de Investigación*, Universidad de América, 3 (1), 7-19.
- Sánchez, C., Estupiñan, L. y Salazar, M. (2010). Herramientas para la caracterización termodinámica de sistemas ternarios en destilación. *Revista EIA*, 13(1), 77-91.
- Treybal, R. (1951). *Liquid Extraction* (1ra ed). USA: McGraw-Hill, Book Company.
- Tsuboka, T. y Katayama, T. (1976) General design algorithm based on pseudo-equilibrium concept for multistage multicomponent liquid-liquid separations processes. *Journal of Chemical Engineering of Japan*, 9 (1): 40-45.
- Walas, S. (1985). *Phase Equilibria in Chemical Engineering* (1ra ed). USA: Butterworth Publishers.