



ANEXO I.

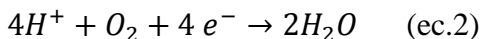
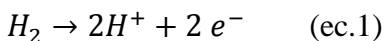
CÁLCULOS REFERIDOS A LA PILA

INDICE

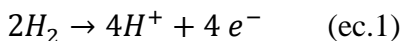
1. REACIONES Y SEMIREACCIONES DE LA PILA.....	2
2. CALCULO DEL HIDRÓGENO NECESARIO.....	2
3. VOLTAJE TEÓRICO Y SEGÚN NERST.....	3
4. CALCULO DE LAS PÉRDIDAS EN LA PILA.....	4
4.1 PERDIDAS POR POLARIZACIÓN ÓHMICA.....	5
4.2 PERDIDAS POR DIFUSIÓN.....	5
4.3 PERDIDAS POR POLARIZACIÓN CATÓDICA.....	6
4.4 PERDIDAS POR POLARIZACIÓN ANÓDICA.....	7
4.5 VOLTAJE REAL DE LA PILA.....	8
5. CALCULO DEL POTENCIAL DE LA PILA.....	9
6. PARÁMETROS CARACTERÍSTICOS DE LA PILA.....	9
6.1 EFICIENCIA ELECTRICA DE LA PILA.....	9
6.2 EFICIENCIA ELÉCTRICA TOTAL.....	10
6.3 EFICIENCIA GLOBAL.....	11

1. REACIONES Y SEMIREACCIONES DE LA PILA

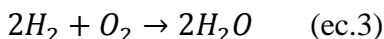
En la pila ocurren dos semireacciones: de oxidación (en el ánodo) y de reducción (en el cátodo) respectivamente [21]:



Para equilibrar la carga, se multiplica por dos la ecuación 1:



Sumando ambas ecuaciones, se obtiene la reacción global de la pila:



2. CALCULO DEL HIDRÓGENO NECESARIO

Conocida la reacción que ocurre en la pila y la potencia que se desea suministrar, se calcula el hidrógeno necesario a través de la entalpía de la reacción.

Para este cálculo y los próximos, se suma una temperatura de pila de 185°C, un número total de celdas de 545 y un área de celda de 45,16 cm².

Para calcular el hidrógeno necesario, se calcula primero la potencia total necesaria que ha de suministrar la pila tal que [3]:

$$P_{tot} = \frac{2 \cdot \Delta H_{H_2O}(\text{gas}) \cdot n^{\circ} \text{celdas} \cdot i \cdot A_{\text{celda}}}{n \cdot F} \quad (\text{ec.4})$$

Dónde:

La entalpía de formación del agua en fase gas es $\Delta H_{H_2O}(\text{gas}) = -241,4 \left[\frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right]$ [31]

El número de celdas es $n^{\circ} \text{celdas} = 545$

i es la densidad de corriente la cual es igual a 0,4975 A/cm²

A_{celda} es el área de cada celda, igual a 45,16 cm²

n es el número de electrones intercambiados en la reacción=4

F es la constante de Faraday = 96500C

Sustituyendo tendremos que:

$$P_{tot} = 15,31 \text{ kW}$$

Dividiendo esta energía total entre la entalpía de la reacción de la pila, tenemos que:

$$\text{moles } H_{2,react} = \frac{15,31 \frac{\text{kJ}}{\text{s}}}{241,6 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}} = 0,2282 \left[\frac{\text{kmol}}{\text{h}} \right]$$

Dado que la conversión fijada es de un 80% habrá que suministrar:

$$\text{moles } H_{2,sum} = \frac{\text{moles } H_{2,react}}{0,8} = 0,2852 \left[\frac{\text{kmol}}{\text{h}} \right]$$

3. VOLTAJE TEÓRICO Y SEGÚN NERST

El potencial teórico de la pila se obtiene gracias a los potenciales de reacción de ambas semireacciones: [32]

$$\varepsilon^0 \left(\frac{H^+}{H_2} \right) = 0 \text{ V} \qquad \varepsilon^0 \left(\frac{O_2}{H_2O} \right) = 1,23 \text{ V}$$

$$\varepsilon^0_{PILA} = \varepsilon^0_{CATODO} - \varepsilon^0_{ANODO} = 1,23 - 0 = 1,23 \text{ V} \quad (\text{ec.5})$$

El potencial teórico de la pila es 1,23 voltios.

Cuando la pila se encuentra a distinta presión o temperatura de 1 bar y 0°C, se necesita aplicar la ecuación de Nerst para calcular el voltaje real:

$$\varepsilon = \varepsilon^0 - \frac{R \cdot T}{n \cdot F} * \ln(Q) \quad (\text{ec.6})$$

Dónde:

ε^0 es el voltaje teórico ya conocido e igual a 1,23V

R es la constante universal de los gases 8,314

T la temperatura a la que se encuentra la pila (185°C)

n es el número de electrones que se intercambian durante la reacción en la pila igual a 4

F es la constante de Faraday conocida e igual a 96500 C

Q es la constante de la reacción

Dado que el único dato que no es conocido es la constante de la reacción, se calcula a continuación:

$$Q = \frac{[H_2O]^2}{[H_2]^2 [O_2]} \quad (\text{ec.7})$$

Las concentraciones tomadas son la media entre la concentración de salida y la de entrada de cada compuesto (calculado con el programa AspenHysys):

$$Q = \frac{[H_2O]^2}{[H_2]^2 [O_2]} = \frac{[0,0028]^2}{[0,0061]^2 [0,0075]} = 73,57$$

Sustituyendo ahora en la ecuación de Nerst, obtenemos el potencial en las condiciones de trabajo:

$$\varepsilon = 1,23 - \frac{8,314 \cdot 458,15}{2 \cdot 96500} * \ln(73,57) = 1,197 \text{ V}$$

4. CALCULO DE LAS PÉRDIDAS EN LA PILA

Además del ajuste con la ecuación de Nerst para las condiciones de trabajo, otras pérdidas dentro de la pila han de ser tenidas en cuenta, de este modo el voltaje real se calcula siguiendo las ecuaciones del artículo de Korsgaard y cols (2008) [33]:

$$V_{real} = V_0 - \eta_{oh} - \eta_{dif} - \eta_{cat} - \eta_{an} \quad (\text{ec.8})$$

Dónde:

- V_0 = voltaje sin pérdidas
- η_{oh} = Polarización óhmica
- η_{dif} = Polarización por difusión
- η_{cat} = Polarización catódica
- η_{an} = Polarización anódica

4.1 PERDIDAS POR POLARIZACIÓN ÓHMICA

La polarización óhmica se debe a la resistencia de la membrana al flujo de iones y la resistencia del electrodo al paso de los electrones. Estas pérdidas son acentuadas si hay presente ácido pirofosfórico, que disminuye la conductividad de la membrana.

El voltaje que se pierde debido a este fenómeno se calcula con la siguiente ecuación:

$$\eta_{oh} = R_{oh} * i \quad (\text{ec. 9})$$

Dónde:

i es la densidad de corriente igual a $0,4975 \text{ A/cm}^2$

R_{oh} la resistencia óhmica, que se calcula tal que:

$$R_{oh} = -1,67 * 10^{-4} * T_{celda} + 0,2289 \quad (\text{ec.9})$$

Como la temperatura de pila es conocida, solo queda sustituir ambas ecuaciones:

$$\begin{aligned} \eta_{oh} &= R_{oh} * i = (-1,67 * 10^{-4} * T_{celda} + 0,2289) * i \\ &= (-1,67 * 10^{-4} * 458,15 + 0,2289) * 0,4975 = 0,07734 \text{ V} \end{aligned}$$

4.2 PERDIDAS POR DIFUSION

Como ya se ha visto, en la pila ocurren dos semireacciones. La reacción en el cátodo es más lenta que la reacción en el ánodo. Debido a ello, se utiliza un exceso de oxígeno (aire) respecto del estequiométrico: en este caso se utiliza el doble que el teórico ($\lambda_{air} = 2$). Por otro lado, al consumirse los reactivos en el cátodo, se crea un gradiente de concentraciones debido entre otras cosas a la difusión de los reactivos y productos a través de la membrana; esto genera unas pérdidas a las que llamamos pérdidas por difusión y se calculan tal que:

$$\eta_{dif} = \frac{R_{dif} * i}{\lambda_{air} - 1} \quad (\text{ec.10})$$

Dónde:

i es densidad de corriente igual a $0,5028 \text{ A/cm}^2$

La relación aire/hidrogeno es conocida $\lambda_{air} = 2$



R_{dif} que se calcula tal que:

$$R_{dif} = 0,4306 - 0,0008203 * T_{celda} \quad (ec.11)$$

Sustituyendo los valores y la ecuación 11 en la ecuación 10:

$$\eta_{dif} = \frac{0,4306 - 8,203 * 10^{-4} * T_{celda} * i}{\lambda_{air} - 1} = \frac{(0,4306 - 8,203 * 10^{-4} * 458) * 0,4975}{2 - 1}$$

Las pérdidas por difusión son 0,02783 V.

4.3 PERDIDAS POR POLARIZACIÓN CATÓDICA

Para romper la barrera necesaria para que haya flujo en el cátodo, se debe superar la energía de activación. La polarización catódica aumenta con la densidad de corriente, así como cuando controla la cinética de superficie de electrodo. Las pérdidas de este fenómeno son calculadas tal que:

$$\eta_{cat} = \frac{T_{celda} * R}{n * \alpha_{catodo} * F} * \ln\left(\frac{i_0 + i}{i_0}\right) \quad (ec.12)$$

Dónde:

T_{celda} es conocida e igual a 458,15K

R es la constante universal de los gases ideales e igual a 8,314 J/ (K*mol)

n es el número de electrones intercambiados en la reacción (=4)

α_{catodo} es el coeficiente de transferencia de carga y se calcula tal que:

$$\alpha_{catodo} = T_{celda} * 2,761 * 10^{-3} - 0,9453 = 0,3196 \quad (ec. 13)$$

F es la constante de Faraday ($F=96500$ C/mol)

i_0 es la densidad de corriente de intercambio y se calcula tal que:

$$i_0 = 33300 * e^{-0,04368 * T_{celda}} = 33300 * e^{-0,04368 * 458,15} = 6,782 * 10^{-5} \quad (ec.14)$$

i es la densidad de corriente igual a 0,4975 A/cm²

Sustituyendo todos estos datos en la ecuación 12:

$$\eta_{cat} = \frac{458,15 \cdot 8,314}{4 \cdot 0,3196 \cdot 96500} * \ln \left(\frac{6,782 \cdot 10^{-5} + 0,4975}{6,782 \cdot 10^{-5}} \right) = 0,2754 \text{ V}$$

4.4 PERDIDAS POR POLARIZACIÓN ANÓDICA

La polarización anódica tiene dos causas principales: la primera por envenenamiento del monóxido de carbono que afecta a la adsorción de H₂ en los centros activos y la segunda por el apantallamiento que se produce cuando ya se ha adsorbido una cantidad bastante grande de hidrógeno, lo que provoca que se reduzca el número de centros activos. Como en este caso la reacción no produce CO, la primera causa no se tendrá en cuenta. Se calcula tal que:

$$\eta_{an} = \frac{T_{celda} \cdot R}{\alpha_{anodo} \cdot F} * \sinh^{-1} \left(\frac{i}{2 \cdot k_{eh} \cdot \theta_{H_2}} \right) \quad (\text{ec.15})$$

Dónde:

T_{celda} es conocida e igual a 458,15K

R es la constante universal de los gases ideales e igual a 8,314 J/ (K* mol)

α_{anodo} es el coeficiente de transferencia de carga y su valor es igual al de α_{catodo}

F es la constante de Faraday ($F=96500 \text{ C/mol}$)

i es la densidad de corriente igual a 0,4975 A/cm²

k_{eh} es un parámetro que se calcula tal que:

$$k_{eh} = 25607 * e^{-\frac{34777}{R \cdot T}} = 0,02781 \quad (\text{ec.16})$$

Por último θ_{H_2} representa la fracción de centros activos en el ánodo ocupados por hidrógeno (en tanto por uno).

Esto se calcula con la siguiente ecuación:

$$\rho \frac{d}{dt} \theta_{H_2} = k_{fh} * x_{H_2} * p * (1 - \theta_{H_2}) - b_{fh} * k_{fh} * \theta_{H_2} - i = 0 \quad (\text{ec.17})$$

Dónde:

p es la presión de trabajo, la presión atmosférica

x_{H_2} es la fracción molar media de hidrógeno: $x_{H_2} = \frac{0,1640+0,0351}{2} = 0,0996$

k_{fh} y b_{fh} son parámetros fácilmente calculables:

$$k_{fh} = 2,743 * 10^{24} * e^{-\frac{189900}{R*T}} = 611,7 \quad (\text{ec.18})$$

$$b_{fh} = 2,038 * 10^6 * e^{-\frac{47904}{R*T}} = 7,037 \quad (\text{ec.19})$$

Sustituyendo todos estos valores en la ecuación e iterando la densidad de corriente, obtenemos que $\theta_{H_2} = 0,1348$

Ya se tienen todos los valores para calcular la polarización anódica:

$$\eta_{an} = \frac{T_{celda} * R}{\alpha_{anodo} * F} * \sinh^{-1} \left(\frac{i}{2 * k_{eh} * \theta_{H_2}} \right) = \frac{458 * 8,314}{0,3192 * F} * \sinh^{-1} \left(\frac{0,4975}{2 * 0,02781 * 0,1348} \right) = 1,882 * 10^{-6}$$

4.5 VOLTAJE REAL DE LA PILA

Conocidas las pérdidas y el voltaje inicial, se calcula el voltaje total a través de la ecuación 7:

$$V_{real} = V_0 - \eta_{oh} - \eta_{dif} - \eta_{cat} - \eta_{cat} = 1,197 - 0,07734 - 0,02783 - 0,2754 - 1,882 * 10^{-6} = 0,8168 \text{ V}$$

El voltaje real de la pila es igual a 0,8168 V.

5 CALCULO DEL POTENCIAL DE LA PILA

La densidad de corriente es de 0,4975 A/cm² y el área de cada celda de la pila es de 45,16 cm², por tanto:

$$I_{total} = i * Area = 0,49758 \frac{A}{cm^2} * 45,16 cm^2 = 22,47 A \quad (ec.20)$$

Dado que la potencia eléctrica que se quiere obtener es 10 kW, se calcula el voltaje total:

$$V_{total} = \frac{P_{elec}}{I_{total}} = \frac{10000 W}{22,47 A} = 445,04 V \quad (ec.21)$$

Otra forma de calcular el voltaje total es multiplicándolo por el número de celda, así se comprueba que los cálculos son correctos:

$$V_{total} = 545 celdas * 0,8168 \frac{V}{celda} \approx 445,1 V \quad (ec.22)$$

6 PARÁMETROS CARACTERÍSTICOS DE LA PILA

Para calcular estos parámetros se ha supuesto un flujo molar de GLP de 0,15 kmol/h. Esta elección se explica a continuación en el ANEXO III: ELECCIÓN DEL FLUJO DE GLP [34, 35].

6.1 EFICIENCIA ELECTRICA DE LA PILA

La eficiencia eléctrica es la relación entre la potencia eléctrica obtenida y el flujo de hidrógeno de entrada a la pila, teniendo en cuenta su poder calorífico.

$$\eta_{pila} = \frac{potencia}{n_{H_2} * \Delta H_{f,H_2}} \quad (ec.23)$$

donde:

La potencia generada es 10kW

El flujo de hidrogeno es 0,2852 kmol/h

La entalpia de reacción es de 241600 $\frac{kJ}{kmol}$

Sustituyendo se tiene que:

$$\eta_{pila} = \frac{\text{potencia}}{n_{H_2} * \Delta H_{f,H_2}} = \frac{10 \frac{kJ}{s} * 3600 \frac{s}{h}}{0,2852 \frac{kmol}{h} * 241600 \frac{kJ}{kmol}} = 0,5225$$

La pila tiene una eficiencia eléctrica del 52,25%. Aunque es una eficiencia bastante alta, puede explicarse fácilmente debido a la ausencia de CO, que disminuye el rendimiento.

6.2 EFICIENCIA ELÉCTRICA TOTAL

Es importante conocer también el rendimiento eléctrico total del CHP. Este se calcula tomando la relación entre la potencia eléctrica y el flujo de entrada de ciclohexano y GLP, así como su entalpía (dada por HYSYS):

$$\eta_{TOT} = \frac{\text{potencia}}{n_{C_6H_{12}} * \Delta H_{C_6H_{12}} + n_{GLP} * \Delta H_{GLP}} \quad (\text{ec.24})$$

Dónde:

La potencia generada es 10kW

El flujo de ciclohexano es de 0,076 kmol/h

La entalpía de formación del ciclohexano gas es de 156000 $\frac{kJ}{kmol}$

El flujo de GLP es de 0,15 kmol/h

La entalpía de formación del GLP es de 113400 $\frac{kJ}{kmol}$

$$\eta_{TOT} = \frac{10 \frac{kJ}{s} * 3600 \frac{s}{h}}{0,076 \frac{kmol}{h} * 156000 \frac{kJ}{kmol} + 0,15 \frac{kmol}{h} * 113400 \frac{kJ}{kmol}} = 0,1247$$

La eficiencia eléctrica total es de un 12,47 %

6.3 EFICIENCIA GLOBAL

Sin embargo, este rendimiento solo tiene en cuenta la potencia generada. Para hacer un cálculo más realista, se añade el calor al numerador, ya que este también es aprovechado para generar ACS:

$$\eta_{GLOBAL} = \frac{\text{potencia} + \text{calor}}{n_{C_6H_{12}} * \Delta H_{C_6H_{12}} + n_{GLP} * \Delta H_{GLP}} \quad (\text{ec.25})$$

Dónde:

La potencia generada es 10kW

El flujo de ciclohexano es de 0,076 kmol/h

La entalpia de formación del ciclohexano gas es de $156000 \frac{kJ}{kmol}$

El flujo de GLP es de 0,15 kmol/h

La entalpia de formación del GLP es de $113400 \frac{kJ}{kmol}$

El calor generado no es conocido pero se calcula con HYSYS:

Para calcular el calor que se emite, se multiplican los moles de ACS generados por la diferencia de entalpias de agua de entrada (20°C) hasta la salida (60°C):

$$\text{calor} = n_{ACS} * (H_{60^{\circ}C} - H_{20^{\circ}C}) = 57,48 \frac{kmol}{h} * 3111 \frac{kJ}{kmol} = 178900 \frac{kJ}{h} \quad (\text{ec.26})$$

Sustituyendo todos los datos anteriores se tiene que:

$$\eta_{GLOBAL} = \frac{10 \frac{kJ}{s} * 3600 \frac{s}{h} + 178900 \frac{kJ}{h}}{0,076 \frac{kmol}{h} * 156000 + 0,15 * 113400} = 0,7443$$

El rendimiento global es de 74,43%



ANEXO II:

CALCULO DE LA CINETICA PARA EL REACTOR DE FLUJO PISTÓN

Para la deshidrogenación del ciclohexano se utiliza un reactor de flujo pistón. Esto da más veracidad a los resultados ya que se hace un estudio más específico de la cinética.

Para introducir dicha cinética, se toma la ecuación [36]:

$$r_C = \frac{-k_C(K_P * \frac{p_C}{p_{H_2}^3} - p_B)}{1 + K_B * K_P * \frac{p_C}{p_{H_2}^3}} \quad (\text{ec.1})$$

Dónde:

p_C , p_{H_2} y p_B son las presiones parciales del ciclohexano, el hidrógeno y el benceno respectivamente

k es la constante cinética y se calcula tal que:

$$k_C = 0,221 \exp\left(-\frac{4270}{T}\right) \quad (\text{ec.2})$$

K_B es la constante de adsorción y se calcula tal que:

$$K_B = 2.03 * 10^{-10} \exp\left(\frac{6270}{T}\right) \quad (\text{ec.3})$$

K_P es la constante de equilibrio y se calcula tal que:

$$K_P = 4.89 * 10^{35} \exp\left(\frac{3190}{T}\right) \quad (\text{ec.4})$$

Para introducirse en el reactor de flujo pistón para HYSYS, la ecuación ha de tener esta forma:

$$r = k * f(\text{basis}) - k' * f'(\text{basis}) \quad (\text{ec.5})$$

$$k = A * \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) * T^b \quad (\text{ec.6})$$

$$k' = A' * \exp\left(-\frac{E'}{RT}\right) * T^{b'} \quad (\text{ec.7})$$

Asumiendo que el 1 del denominador es despreciable, se hacen los siguientes cálculos para que la cinética sea compatible con HYSYS:

$$r_c = \frac{-k_c * K_P * \frac{p_C}{p_{H_2^3}}}{K_B * K_P * \frac{p_C}{p_{H_2^3}}} + \frac{k_c * p_B}{K_B * K_P * \frac{p_C}{p_{H_2^3}}} = \frac{-k_c}{K_B} + \frac{k_c}{K_B * K_P} * \frac{p_B}{\frac{p_C}{p_{H_2^3}}}$$

Para poner la velocidad de reacción en la misma base que HYSYS, se despeja el -1 de la derecha:

$$-r_c = \frac{k_c * K_P * \frac{p_C}{p_{H_2^3}}}{K_B * K_P * \frac{p_C}{p_{H_2^3}}} - \frac{k_c * p_B}{K_B * K_P * \frac{p_C}{p_{H_2^3}}} = \frac{k_c}{K_B} - \frac{k_c}{K_B * K_P} * \frac{p_B}{\frac{p_C}{p_{H_2^3}}}$$

Por tanto:

$$r = k * f(basis) - k' * f'(basis) = \frac{k_c}{K_B} - \frac{k_c}{K_B * K_P} * \frac{p_B}{\frac{p_C}{p_{H_2^3}}}$$

De aquí se extraen las siguientes conclusiones:

$$k = A * \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) * T^b = \frac{k_c}{K_B}$$

$$k' = A' * \exp\left(-\frac{E'}{RT}\right) * T^{b'} = \frac{-k_c}{K_B * K_P}$$

$$f(basis) = 1$$

$$f'(basis) = \frac{p_B}{\frac{p_C}{p_{H_2^3}}}$$

Las constantes para la reacción pueden ser ahora calculadas:

No hay variación con la temperatura ni en la reacción directa ni en la inversa, es por esto que:

$$T^b = T^{b'} = 1 \quad \text{por tanto } b = b' = 0$$

Se sustituyen ahora los valores ya conocidos:

a. Para la reacción directa

$$k = A * \exp\left(-\frac{E}{8,314 * T}\right) = \frac{0,221 \exp\left(-\frac{4270}{T}\right)}{2,03 * 10^{-10} \exp\left(\frac{6270}{T}\right)} = 1,088 * 10^9 * e^{\frac{-10540}{T}}$$

De aquí se extrae directamente A e indirectamente E:

$$A = 1,088 * 10^9 \left[\frac{\text{mol}}{\text{m}^3 * \text{Pa} * \text{s}} \right] = 3,9168 * 10^9 \left[\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3 * \text{Pa} * \text{h}} \right]$$

$$\frac{-10540}{T} = \frac{-E}{R * T} \text{ despejando } E \text{ tenemos que: } E = 10540 * 8,314 = 87629,56 \left[\frac{\text{kJ}}{\text{kmol}} \right]$$

b. Para la reacción inversa

$$k' = A' * \exp\left(-\frac{E'}{RT}\right) = \frac{1,088 * 10^9 * e^{\frac{-10540}{T}}}{4,89 * 10^{35} * e^{\frac{3190}{T}}} = 2,225 * 10^{-27} * e^{\frac{-13730}{T}}$$

De aquí se extrae directamente A' e indirectamente E':

$$A' = 2,225 * 10^{-27} \left[\frac{\text{mol}}{\text{m}^3 * \text{Pa} * \text{s}} \right] = 8,010 * 10^{-27} \left[\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3 * \text{Pa} * \text{h}} \right]$$

$$\frac{-13730}{T} = \frac{-E'}{R * T} \text{ despejando } E' \text{ tenemos que: } E' = 137130 * 8,314 = 114150 \left[\frac{\text{kJ}}{\text{kmol}} \right]$$

Figura 1. Constantes para la cinética en Hysys.

Forward Reaction		Reverse Reaction	
A	3,9168e+009	A'	8,0100e-027
E	87630	E'	1,1415e+005
b	0,00000	b'	0,00000

Para calcular los órdenes de ambas reacciones se tiene que:

$$f(basis) = 1 = \frac{p_B^0 * p_{H_2}^0}{p_C^0}$$

$$f'(basis) = \frac{p_B}{p_C} = \frac{p_B * p_{H_2}^3}{p_C}$$

Figura 2. Ordenes de reaccion en HYSYS.

Stoichiometry and Rate Info				
Component	Mole Wt.	Stoich Coeff	Fwd Order	Rev Order
Cyclohexane	84,160	-1,000	0,00	-1,00
Benzene	78,110	1,000	0,00	1,00
Hydrogen	2,016	3,000	0,00	3,00
Add Comp				

ANEXO III:

CALCULO DEL FLUJO MOLAR ÓPTIMO DE GLP

El GLP es el combustible utilizado para el reactor de combustión, encargado de aportar la energía necesaria para llevar a cabo la deshidrogenación.

Sin embargo, no solo es usado para la deshidrogenación, sino también en los intercambiadores de calor para precalentar corrientes y después para producir agua caliente sanitaria.

Para una temperatura fija de 185°C se varía el flujo de GLP observando los cambios que se producen en los diferentes rendimientos: Pila, Eléctrico y Global.

Se observa que el rendimiento de pila no varía, y es igual a un 52,25%.

Sin embargo, tanto el rendimiento eléctrico como el global varían con el flujo de GLP, a continuación se muestra una tabla con diferentes valores:

Tabla 1. Valores del rendimiento para distintos flujos de GLP

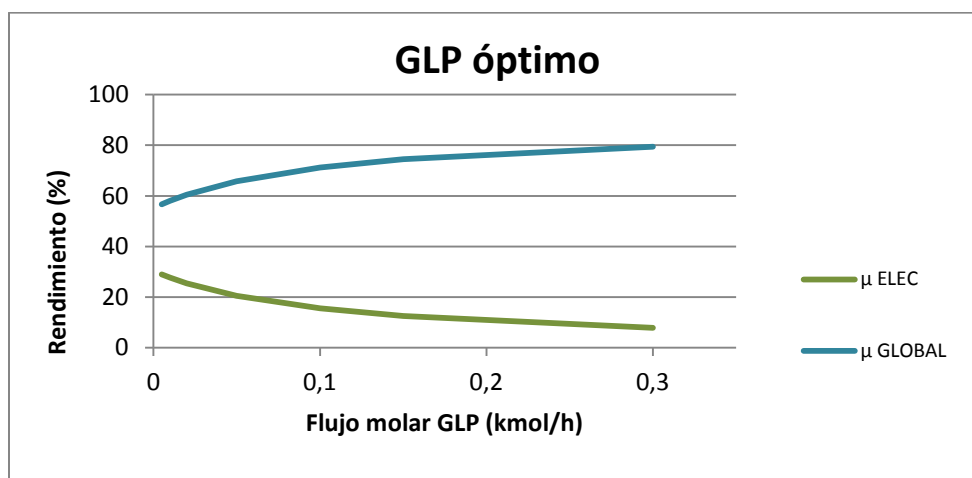
Flujo GLP (kmol/h)	μ ELEC (%)	μ GLOBAL (%)
0,003	-	-
0,005	28,97	56,63
0,01	27,7	58
0,02	25,48	60,4
0,05	20,54	65,73
0,1	15,52	71,14
0,15	12,47	74,43
0,2	10,42	76,64
0,3	7,85	79,42
0,5	5,25	82,2

Se puede observar como disminuye la eficiencia eléctrica según aumenta el número de moles de GLP, y como aumenta la global conforme aumenta el GLP. Es por esto que se busca un flujo para el cual ambas eficiencias sean óptimas y viables.

Como está explicado en la MEMORIA: APARTADO 2: FUNDAMENTOS TEÓRICOS. SISTEMAS CHP, en un micro-CHP convencional, alrededor del 70-80% de la energía producida es calor, entre el 10-25% electricidad y en torno al 5-15% se pierde en la combustión[18].

Tanto el flujo de 0,1 como el de 0,15 y 0,2 se encuentran dentro de estos rangos; debido a ello, se selecciona un flujo molar de 0,15 kmol/h ya que es el valor intermedio.

Figura 1. Variación de los rendimientos característicos con el flujo de GLP



Esta selección está hecha para este caso general de un sistema micro CHP. Dependiendo de las necesidades que se desee abastecer, mayor o menor cantidad de combustible será necesaria. Es decir, si el objetivo del sistema fuese producir agua caliente sanitaria frente y una pequeña potencia eléctrica, se podría elegir un flujo de ciclohexano mayor que haga que aumente el rendimiento global, mientras que si el uso principal es suministrar corriente eléctrica, se disminuiría la corriente, haciendo que aumente el rendimiento eléctrico.



ANEXO IV:

CALCULO DE LA TEMPERATURA DE PILA ÓPTIMA

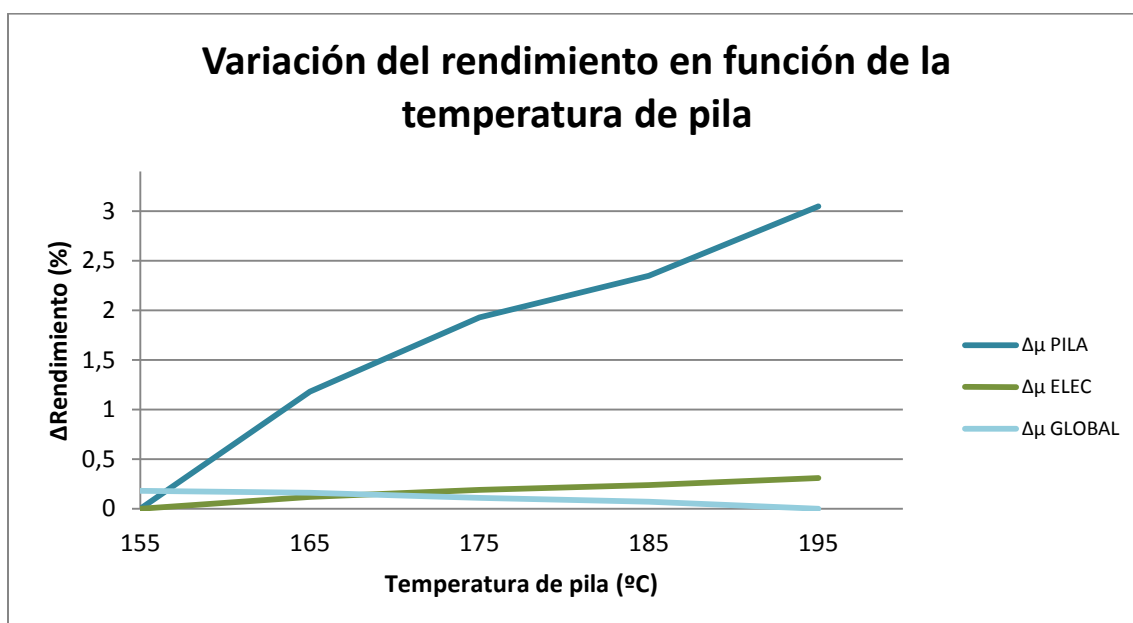
El rango de temperaturas de las HT-PEM puede variar desde 150°C hasta los 200°C [12]. A continuación se realiza un análisis de como varían los diferentes rendimientos del sistema en función de la temperatura de operación de la pila. Los rendimientos se han calculado conforme se explica en el ANEXO I: CALCULOS REFERIDOS A LA PILA. APARTADO 6: PARÁMETROS CARACTERÍSTICOS DE LA PILA. Se toma un flujo fijo de GLP de 0,15 kmol/h y se asume un número de celdas de 545 con un área de celda de 45,16cm² como en las explicaciones anteriores.

Tabla.1 Rendimientos característicos para diferentes temperaturas de pila

Temperatura (°C)	μ PILA (%)	μ ELEC (%)	μ GLOBAL (%)
195	52,95	12,54	74,36
185	52,25	12,47	74,43
175	51,83	12,42	74,47
165	51,08	12,35	74,52
155	49,9	12,23	74,54

Como las diferencias son del orden de las centésimas dentro de un mismo rendimiento, y de decenas entre cada rendimiento, un gráfico con estos datos no nos aporta una visión clara de la relación, por eso, se realiza un gráfico a continuación con el crecimiento o decrecimiento del rendimiento según la temperatura, tomando como 0 el valor más bajo del rendimiento:

Figura 1. Variación del rendimiento en función de la temperatura de pila



Como se observa en el gráfico, el rendimiento de la pila aumenta significativamente según aumenta la temperatura. El rendimiento eléctrico también aumenta con la temperatura, pero de una forma más moderada (un 0,31% con una variación de temperatura de 40°C). Por último, el rendimiento global tiene la reacción contraria, disminuye según aumenta la temperatura de operación de la pila, aun así, este cambio es bastante moderado también (decrece un 0,18% con una variación de temperatura de 40°C).

Pero la temperatura no solo afecta al rendimiento, también a la vida útil de la pila, debido a la degradación del electrolito y otros materiales que forman la pila. Si se mantiene un material sometido a altas temperaturas durante largos periodos de tiempo, esto reduce su vida útil.

Con estos dos factores, puede llegarse a la conclusión de que la temperatura elegida de 185°C es una buena opción, ya que el rendimiento de pila es de los más altos, pero no es una temperatura demasiado elevada que pueda reducir considerablemente la vida útil de la pila.



ANEXO V:

DISEÑO DE LA RED DE INTERCAMBIADORES DE CALOR

INDICE

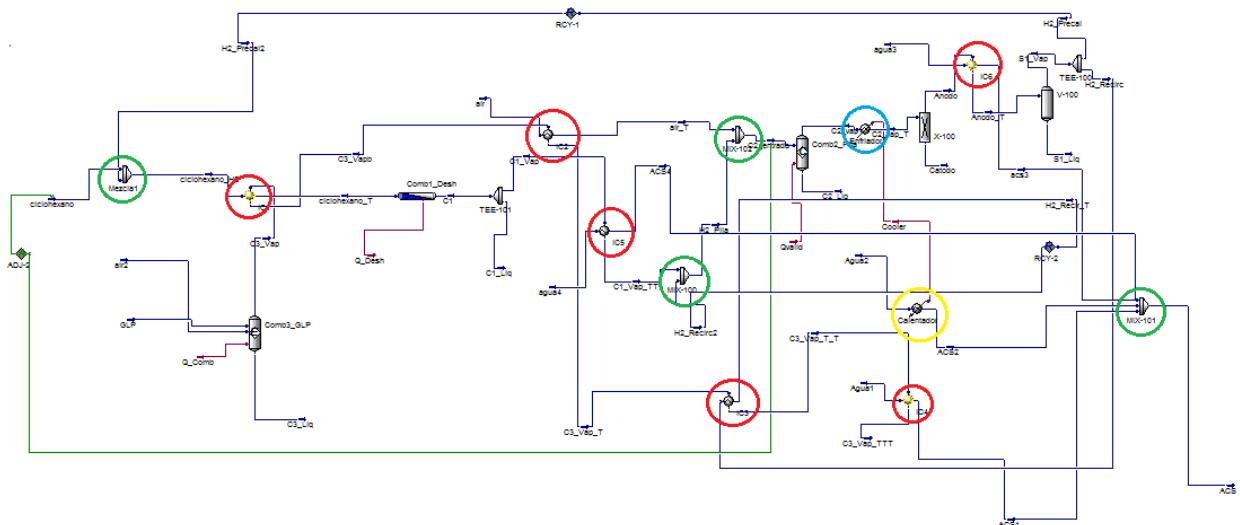
INTRODUCCION.....	24
1. MEZCLADOR DE CORRIENTES Nº1.....	26
2. INTERCAMBIADOR DE CALOR Nº1.....	27
3. INTERCAMBIADOR DE CALOR Nº2.....	27
4. INTERCAMBIADOR DE CALOR Nº3.....	28
5. INTERCAMBIADOR DE CALOR Nº4.....	28
6. INTERCAMBIADOR DE CALOR Nº5.....	29
7. INTERCAMBIADOR DE CALOR Nº7.....	29
8. SISTEMA ENFRIADOR-CALENTADOR.....	31

INTRODUCCION

Para aprovechar al máximo la energía producida por el sistema, se utiliza una serie de intercambiadores, enfriadores y calentadores. No solo con estos aparatos se modifica la temperatura de un flujo, sino también mezclando flujos de distintas temperaturas.

El diseño con HYSYS de la simulación se muestra a continuación. En rojo aparecen los 6 intercambiadores de calor, en azul aparece el enfriador, en amarillo el calentador y en verde los mezcladores de corriente.

Figura 1. Diseño del sistema con los intercambiadores de calor.



A continuación se realiza un estudio detallado de ellos, se debe dar especial importancia a los flujos de calor y a las temperaturas de entrada y salida.

1. MEZCLADOR DE CORRIENTES N°1

El primer mezclador de corrientes unifica la corriente de ciclohexano con hidrógeno de la recirculación, los flujos y temperaturas que intervienen son los siguientes:

Tabla 1. Parámetros termodinámicos de las corrientes del mezclador 1.

Name	ciclohexano	H2_Precal2	ciclohexano_H2
Vapour	0,000	1,000	0,078
Temperature [C]	20,000	40,000	23,777
Pressure [kPa]	100,000	100,000	100,000
Molar Flow [kgmole/h]	0,076	0,008	0,084
Mass Flow [kg/h]	6,388	0,162	6,550
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,008	0,000	0,009
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-155951,74	21590,892	-139755,373
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	-187,010	85,505	-161,200
Heat Flow [kJ/h]	-11837,342	164,510	-11672,832

Aunque existen otros tres mezcladores de corriente, tanto las corrientes de entrada como la de salida tienen la misma temperatura, por lo que no es necesario un análisis más exhaustivo de lo que ocurre. El resto unen: la corriente de hidrógeno de entrada a la pila, el aire con este mismo hidrógeno, y los diferentes flujos de agua caliente sanitaria.

2. INTERCAMBIADOR DE CALOR N°1

El intercambiador de calor afecta a la corriente de ciclohexano y a la salida de los gases de la combustión de GLP. El ciclohexano ha sido previamente calentado con el hidrogeno de la recirculación.

Tabla 2. Parámetros termodinámicos de las corrientes del IC1

Name	ciclohexano_H2	ciclohexano_T	C3_Vap	C3_Vapb
Vapour	0,078	1,000	1,000	1,000
Temperature [C]	23,777	375,000	1892,082	1821,860
Pressure [kPa]	100,000	100,000	100,000	100,000
Molar Flow [kgmole/h]	0,084	0,084	1,906	1,906
Mass Flow [kg/h]	6,550	6,550	55,924	55,924
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,009	0,009	0,071	0,071
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-139755,37	-52029,97	-316,91	-4161,95
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	-161,200	47,581	245,696	243,891
Heat Flow [kJ/h]	-11672,832	-4345,716	-603,893	-7931,009

3. INTERCAMBIADOR DE CALOR N°2

El intercambiador de calor afecta al aire de entrada a la pila y a los gases de combustión de GLP, que antes ya han sido enfriados en el intercambiador de calor 2.

Tabla 3. Parámetros termodinámicos de las corrientes del IC2

Name	air	air_T	C3_Vapb	C3_Vap_T
Vapour	1,000	1,000	1,000	1,000
Temperature [C]	20,000	185,000	1821,860	1756,785
Pressure [kPa]	100,000	100,000	100,000	100,000
Molar Flow [kgmole/h]	1,358	1,358	1,906	1,906
Mass Flow [kg/h]	39,183	39,183	55,924	55,924
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,045	0,045	0,071	0,071
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-153,994	4740,664	-4161,949	-7650,426
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	151,308	164,537	243,891	242,200
Heat Flow [kJ/h]	-209,146	6438,497	-7931,009	-14578,652

4. INTERCAMBIADOR DE CALOR N°3

El intercambiador de calor número cuatro afecta a los gases de combustión y al hidrógeno recirculado que va en dirección a la pila

Tabla 4. Parámetros termodinámicos de las corrientes del IC3

Name	H2_Recirc	H2_Recir_T	C3_Vap_T	C3_Vap_T_T
Vapour	1,000	1,000	1,000	1,000
Temperature [C]	40,000	185,000	1756,785	1751,989
Pressure [kPa]	100,000	100,000	100,000	100,000
Molar Flow [kgmole/h]	0,069	0,069	1,906	1,906
Mass Flow [kg/h]	1,460	1,460	55,924	55,924
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,003	0,003	0,071	0,071
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	21590,892	28651,083	-7650,426	-7904,927
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	85,505	103,907	242,200	242,074
Heat Flow [kJ/h]	1483,114	1968,090	-14578,652	-15063,628

5. INTERCAMBIADOR DE CALOR N°4

Este intercambiador es el encargado de generar gran parte del agua caliente sanitaria. Se producirá tanta agua como se pueda para bajar la temperatura de salida de los gases de combustión hasta 40°C.

Tabla 5. Parámetros termodinámicos de las corrientes del IC4

Name	Agua1	ACS1	C3_Vap_T_T	C3_Vap_TTT
Vapour	0,000	0,000	1,000	0,923
Temperature [C]	20,000	60,000	1751,989	40,000
Pressure [kPa]	100,000	100,000	100,000	100,000
Molar Flow [kgmole/h]	48,742	48,742	1,906	1,906
Mass Flow [kg/h]	878,084	878,084	55,924	55,924
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,880	0,880	0,071	0,071
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-286609,255	-283497,782	-7904,927	-87490,404
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	52,390	62,339	242,074	153,615
Heat Flow [kJ/h]	-13969783,025	-13818124,938	-15063,628	-166721,715

6. INTERCAMBIADOR DE CALOR N°5

Para enfriar la salida del reactor de flujo pistón hasta la temperatura de operación de la pila, se introduce in intercambiador de calor que genere ACS.

Tabla 6. Parámetros termodinámicos de las corrientes del IC5

Name	agua4	ACS4	C1_Vap	C1_Vap_TT
Vapour	0,000	0,000	1,000	1,000
Temperature [C]	20,000	60,000	375,000	185,000
Pressure [kPa]	100,000	100,000	100,000	99,998
Molar Flow [kgmole/h]	1,117	1,117	0,311	0,311
Mass Flow [kg/h]	20,130	20,130	6,550	6,550
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,020	0,020	0,014	0,014
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-286609,255	-283497,782	39566,721	28396,110
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	52,390	62,339	124,561	104,267
Heat Flow [kJ/h]	-320250,232	-316773,546	12314,549	8837,864

7. INTERCAMBIADOR DE CALOR N°6

El último intercambiador de calor del sistema es el encargado de enfriar el ánodo para llevar a cabo la separación del benceno. A su vez, se produce agua caliente sanitaria.

Tabla 7. Parámetros termodinámicos de las corrientes del IC6

Name	agua3	ACS3	Anodo	Anodo_T
Vapour	0,000	0,000	1,000	0,501
Temperature [C]	20,000	60,000	185,000	40,000
Pressure [kPa]	100,000	100,000	100,000	100,000
Molar Flow [kgmole/h]	1,341	1,341	0,152	0,152
Mass Flow [kg/h]	24,158	24,158	7,563	7,563
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,024	0,024	0,010	0,010
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-286609,255	-283497,782	64138,182	36758,359
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	52,390	62,339	51,249	-26,889
Heat Flow [kJ/h]	-384345,153	-380172,644	9774,247	5601,738

8. SISTEMA ENFRIADOR-CALENTADOR

Este sistema actúa prácticamente igual que in intercambiador, el enfriador cede el calor que ha sustraído al calefactor para que caliente otra corriente. Se utiliza este sistema ya que el propósito es simular la pila de alta temperatura. En la simulación, los gases salen del combustor de simulación de la pila a distinta temperatura de la que entran, sin embargo, la pila lleva un sistema de refrigeración que hace que la temperatura se mantenga constante. Es por esto que se sitúa un enfriador.

Como se puede observar, el calor sustraído por el enfriador es igual al aportado al calefactor:

$$\text{Heat Flow, enfriador} = \text{Heat flow, calefactor} = 19529,5 \left[\frac{\text{kJ}}{\text{h}} \right]$$

8.1 Enfriador

Tabla 8. Parámetros termodinámicos de las corrientes del enfriador

Name	C2_vap	C2_vap_T	Cooler
Vapour	1,000	1,000	
Temperature [C]	491,761	185,000	
Pressure [kPa]	100,000	100,000	
Molar Flow [kgmole/h]	1,625	1,625	
Mass Flow [kg/h]	47,206	47,206	
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,056	0,056	
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-11532,672	-23553,554	
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	182,514	162,542	
Heat Flow [kJ/h]	-18736,338	-38265,837	19529,499

8.2 Calentador

Tabla 9. Parámetros termodinámicos de las corrientes del calentador

Name	Agua2	ACS2	Heater
Vapour	0,000	0,000	
Temperature [C]	20,000	60,000	
Pressure [kPa]	100,000	100,000	
Molar Flow [kgmole/h]	6,277	6,277	
Mass Flow [kg/h]	113,074	113,074	
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,113	0,113	
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-286609,255	-283497,782	
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	52,390	62,339	
Heat Flow [kJ/h]	-1798933,878	-1779404,379	19529,499

ANEXO VI:

EL PAPEL DEL CICLOHEXANO EN LA INDUSTRIA DEL HIDRÓGENO

Es imprescindible que las necesidades energéticas sean satisfechas con recursos renovables. El uso de estos está limitado actualmente por su ubicación, las tecnologías disponibles para aprovecharlos y los principales problemas asociados con su almacenamiento. El hidrógeno producido por cualquier medio se utiliza como medio para el almacenamiento y la transmisión de energía.

Cerca de su sitio de producción, el hidrógeno reacciona catalíticamente con benceno para producir ciclohexano; esto se transfiere de manera segura por tubería o contenedor hasta el punto de requerimiento de energía donde se deshidrogena catalíticamente. El hidrógeno liberado está disponible para su uso en una amplia variedad de formas, mientras que el benceno se devuelve a la fuente para una su hidrogenación, y el ciclo se repite.

Las tecnologías apropiadas, que incluyen la electrólisis, la conversión fotovoltaica y termoquímica, se emplean para producir hidrógeno que luego se usa de manera convencional para producir energía térmica o eléctrica.

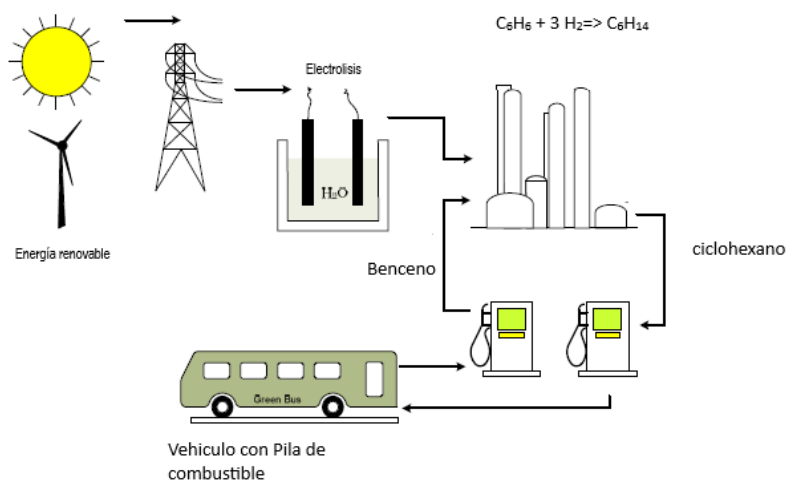
Es evidente que la explotación de fuentes de energía renovables como la energía solar, eólica o hidroeléctrica por estos medios dependería mucho de la ubicación de las fuentes y del tiempo que estuvieran disponibles para la generación de energía. Un ejemplo de ello es la dependencia climatológica y geográfica de la energía solar, el carácter fluctuante de los vientos y las variaciones estacionales en la lluvia de las que depende la hidroelectricidad.

El almacenamiento eficiente de hidrógeno es probablemente el mayor obstáculo para el éxito de la economía del hidrógeno.

El hidrógeno, al ser el elemento más ligero y altamente inflamable con una temperatura crítica extremadamente baja, dificulta su almacenamiento seguro y económico, especialmente para aplicaciones residenciales y de movilidad.

Hidruros orgánicos líquidos, como el ciclohexano se consideran una fuente más adecuada para la generación *in situ*, almacenamiento, transporte y utilización de hidrógeno. Contienen suficientemente masa de hidrógeno en su molécula y son estables, relativamente menos volátiles y fáciles para transportar.

Un sistema completo que incluye la producción de hidrógeno, su almacenamiento y utilización se puede ver en un sistema ciclohexano-benceno-hidrógeno siendo una operación reversible deshidrogenación / hidrogenación de ciclohexano / benceno.



El uso de ciclohexano para el almacenamiento de hidrógeno y la generación de hidrógeno tiene una serie de ventajas que se describen a continuación:

- Las propiedades del ciclohexano son muy similares a las de la gasolina
- La infraestructura actual de la gasolina puede utilizarse para el transporte, distribución y dispensación del ciclohexano líquido a nivel del consumidor
- El ciclohexano y su producto de deshidrogenación (benceno) son estables
- Los catalizadores con alta selectividad, actividad y vida relativamente larga están disponibles comercialmente.
- Son necesarias presiones bajas (1-10 bar) para que sea posible un equipo más seguro y de menor costo. La termodinámica de la deshidrogenación de ciclohexano se ve favorecida por la baja presión.
- Una cantidad satisfactoria de hidrógeno está contenida en una molécula de ciclohexano.
- La reacción reversible es comercial y requiere condiciones de reacción asequibles.

A pesar de los muchos factores alentadores descritos anteriormente, hay algunos factores que impiden la implementación aceptable y exitosa de esta tecnología a escala comercial. Los inconvenientes de este sistema son:

- La reacción de deshidrogenación es altamente endotérmica.
- La deshidrogenación requiere altas temperaturas de reacción (300-400 ° C)
- Ningún catalizador de deshidrogenación de ciclohexano comercial cumple con el objetivo requerido de selectividad, actividad y estabilidad.

Información obtenida a través de las páginas web del Centro Nacional del Hidrogeno [37] y a la Asociación Española del Hidrógeno [38].

ANEXO VII:

UTILIZACIÓN DEL BENCENO: ASPECTOS A TENER EN CUENTA



El benceno es un líquido orgánico incoloro e inflamable con un olor dulce. Se encuentra en la naturaleza formándose a partir de procesos naturales como volcanes e incendios; sin embargo, la mayor producción de benceno es el resultado de actividades humanas.

Según la web benceno.net (actualizada en 2018) el benceno es uno de los productos químicos más utilizados. Se utiliza principalmente como material de partida en la fabricación de otros productos químicos, incluyendo plásticos, lubricantes, cauchos, colorantes, detergentes, drogas y pesticidas. En el pasado también se usaba comúnmente como solvente industrial (una sustancia que puede disolver o extraer otras sustancias) y como aditivo de gasolina, pero estos usos se han reducido considerablemente en las últimas décadas. El benceno es también una parte natural del petróleo crudo y la gasolina (y por lo tanto, el escape de los vehículos de motor), así como el humo del cigarrillo.

PRINCIPALES ÁREAS DE UTILIZACIÓN

- **Fabricación de neumáticos y caucho**

El benceno se utiliza en la producción de neumáticos y caucho. Los fabricantes utilizan productos que contienen benceno como solventes en varias etapas de la producción. Los adhesivos utilizados para fijar las suelas a los zapatos también lo contienen.

- **Impresión y pintura**

El benceno está contenido en los productos utilizados en la industria gráfica para la limpieza y mantenimiento de equipos de impresión. Además, la tinta que se usa en la impresión frecuentemente contiene benceno. El benceno es un ingrediente de una variedad de productos de pintura, tales como pinturas de base y capa superior, lacas, pinturas en aerosol, selladores y manchas. La mayoría de estos productos contienen un solvente que contiene benceno que los mantiene en forma líquida hasta que están listos para su uso.

- **Petróleo y asfalto**

Las refinerías de petróleo producen productos que contienen benceno, como gasolina, fueloil y queroseno. También producen lubricantes a partir de petróleo crudo. El benceno también se utiliza en la producción de asfalto para tejados y pavimentos.



- Químicos y plásticos

El benceno se utiliza en la fabricación de productos químicos y plásticos. Algunos ejemplos incluyen resinas, adhesivos y productos sintéticos como el nylon, estireno y poliestireno. Los productos químicos fabricados que usan benceno incluyen detergentes, insecticidas, herbicidas, pesticidas y colorantes. Algunos ejemplos de productos específicos que contienen benceno incluyen Bonide Grass, Weed and Vegetation Killer, Ortho Weed-B-Gone y Formula M 62 Insecticida.

- Reparación de automóviles

Las instalaciones de reparación de automóviles utilizan disolventes que contienen benceno para limpiar partes tales como sistemas hidráulicos, componentes del sistema de combustible y frenos. Estos disolventes que contienen benceno disuelven la grasa que se acumula en estas partes y no daña el metal. También utilizan lubricantes que contienen benceno. Los ejemplos incluyen WD 40, Limpiador de Carbohidratos Gumout, Llave líquida y Aceite penetrante Champion N/F 4 Way [39].

A pesar de sus múltiples aplicaciones, hay que tomar medidas y precauciones para usar este compuesto debido a su toxicidad. La exposición durante largos periodos sin las medidas necesarias puede dañar el ADN y provocar enfermedades, además de otros efectos secundarios como irritación en los ojos o dermatitis [40].

El benceno para este proceso estaría siempre aislado en tanques y tuberías, reduciendo así la posibilidad de inhalación o contacto. A continuación se exponen las medidas a tener en cuenta según el Real Decreto 665/1997, de 12 de mayo, sobre la protección de los trabajadores contra los riesgos relacionados con la exposición a agentes cancerígenos durante el trabajo:

Artículo 3. Identificación y evaluación de riesgos.

1. De acuerdo con lo dispuesto en el artículo 2 del Real Decreto 39/1997, de 17 de enero, por el que se aprueba el Reglamento de los Servicios de Prevención, identificados uno o más riesgos relacionados con la exposición a agentes cancerígenos o mutágenos durante el trabajo, se procederá, para aquellos que no hayan podido evitarse, a evaluar los mismos determinando la naturaleza, el grado y la duración de la exposición de los trabajadores.

2. La evaluación deberá tener en cuenta especialmente: a) Toda posible vía de entrada al organismo o tipo de exposición, incluidas las que se produzcan por absorción a través de la piel o que afecten a ésta; b) Los posibles efectos sobre la seguridad o la salud de los trabajadores especialmente sensibles a estos riesgos.



3. La evaluación deberá repetirse periódicamente y, en todo caso, cada vez que se produzca un cambio en las condiciones que pueda afectar a la exposición de los trabajadores a agentes cancerígenos o mutágenos o se den las circunstancias a que se refiere el apartado 4 del artículo 8 de este Real Decreto.

Artículo 5. Prevención y reducción de la exposición

2. En caso de que no sea técnicamente posible sustituir el agente cancerígeno o mutágeno, el empresario garantizará que la producción y utilización del mismo se lleven a cabo en un sistema cerrado.

4. La exposición no superará el valor límite de los agentes cancerígenos establecido en el anexo III del presente Real Decreto.

5. Siempre que se utilice un agente cancerígeno, el empresario aplicará todas las medidas necesarias siguientes:

a) Limitar las cantidades del agente cancerígeno o mutágeno en el lugar de trabajo.

b) Diseñar los procesos de trabajo y las medidas técnicas con el objeto de evitar o reducir al mínimo la formación de agentes cancerígenos.

c) Limitar al menor número posible los trabajadores expuestos o que puedan estarlo.

d) Evacuar los agentes cancerígenos en origen, mediante extracción localizada o, cuando ello no sea técnicamente posible, por ventilación general, en condiciones que no supongan un riesgo para la salud pública y el medio ambiente.

e) Utilizar los métodos de medición más adecuados, en particular para una detección inmediata de exposiciones anormales debidas a imprevistos o accidentes.

f) Aplicar los procedimientos y métodos de trabajo más adecuados.

g) Adoptar medidas de protección colectiva o, cuando la exposición no pueda evitarse por otros medios, medidas individuales de protección.

h) Adoptar medidas higiénicas, en particular la limpieza regular de suelos, paredes y demás superficies.

i) Delimitar las zonas de riesgo, estableciendo una señalización de seguridad y salud adecuada, que incluya la prohibición de fumar en dichas zonas, y permitir el acceso a las mismas sólo al personal que deba operar en ellas, excluyendo a los trabajadores especialmente sensibles a estos riesgos.

- j) Velar para que todos los recipientes, envases e instalaciones que contengan agentes cancerígenos estén etiquetados de manera clara y legible y colocar señales de peligro claramente visibles, de conformidad todo ello con la normativa vigente en la materia.
- k) Instalar dispositivos de alerta para los casos de emergencia que puedan ocasionar exposiciones anormalmente altas.
- l) Disponer de medios que permitan el almacenamiento, manipulación y transporte seguros de los agentes cancerígenos, así como para la recogida, almacenamiento y eliminación de residuos, en particular mediante la utilización de recipientes herméticos etiquetados de manera clara, inequívoca y legible, y colocar señales de peligro claramente visibles, de conformidad todo ello con la normativa vigente en la materia.

Las medidas para los trabajadores no serán necesarias ya que no habrá trabajadores en las cercanías, por ello no se añaden en este informe los Artículos 6, 7 y 8 de este decreto. Será necesario mirarlas desde el punto del control del agente cancerígeno de cara a la exposición de habitantes de alrededor debido a una fuga u otra situación inesperada [41].

Como conclusión, dado que se tiene un proceso aislado, en el que no hay trabajadores que deban estar trabajando con benceno diariamente ni se prevén largas exposiciones a dicho compuesto; sumado con que no es necesaria la eliminación de benceno ya que será reutilizado para la producción de ciclohexano, las medidas más importantes a tomar es el buen aislamiento de todos los tanques que puedan contener benceno así como un sistema de aviso en caso de fuga. Es también necesario el aviso a los habitantes de alrededor de las medidas que han de tomar en caso de producirse contacto con el benceno como indica la hoja de seguridad del benceno (Safety Data Sheet) [42].