



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
INGENIERÍA QUÍMICA – MATERIALES

Desarrollo sustentable y transiciones tecnológicas: Ciclo de vida y dinámica de sistemas para el uso eficiente de recursos en la producción y consumo de Tereftalato de polietileno (PET).

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN INGENIERÍA

PRESENTA:
Pablo Aarón Anistro Jiménez

TUTOR PRINCIPAL
Dr. Carlos E. Escobar Toledo, Facultad de Química
COMITÉ TUTOR
Dr. Jaime Cervantes de Gortari, Facultad de Ingeniería
Dr. José Jesús Acosta Flores, Facultad de Ingeniería

MÉXICO, D. F. MARZO 2016



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO:

Presidente: Dr. Enrique Rodolfo Bazúa Rueda
Secretario: Dr. Javier Eduardo Aguillón Martínez
Vocal: Dr. Ricardo Aceves García
1^{er.} Suplente: Dr. Ricardo Vera Graziano
2^{do.} Suplente: Dr. Carlos E. Escobar Toledo

Lugar donde se realizó la tesis:
Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México

TUTOR DE TESIS:

Dr. Carlos E. Escobar Toledo



A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Carlos E. Escobar Toledo', is written over a horizontal dashed line. The signature is stylized and cursive.

FIRMA

Agradecimientos

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (Conacyt) por la beca otorgada para realizar los estudios de doctorado.

A la Universidad Nacional Autónoma de México por toda la experiencia adquirida.

Al H. Comité Tutor por su guía, paciencia y amistad.

A Edurne y Andrea.

Contenido

RESUMEN	VI
ABSTRACT	VII
1. INTRODUCCIÓN	1
1.1 DESARROLLO SUSTENTABLE	1
1.2 ENFOQUE DE LA TESIS.	4
1.3 OBJETIVOS PARTICULARES DE LA INVESTIGACIÓN	4
1.4 HIPÓTESIS	5
2. LOS MATERIALES PLÁSTICOS Y EL CICLO DE VIDA	6
2.1 INTRODUCCIÓN	6
2.2 LOS POLÍMEROS Y EL ANÁLISIS DE CICLO DE VIDA	7
2.3 LA EXERGÍA Y LOS PLÁSTICOS	8
2.4 BIOPOLÍMEROS	9
2.5 DROP-IN SOLUTIONS: BIOREFINERIAS	12
2.6 RECICLAJE DE PET	13
3. METODOLOGÍA	21
3.1 DESCRIPCIÓN GENERAL	21
3.2 PROSPECTIVA	23
3.3 DINÁMICA DE SISTEMAS	24
3.4 ANÁLISIS DE EXERGÍA	26
3.5 ANÁLISIS MULTICRITERIO Y MULTIESCENARIO	27
4. DEFINICIÓN DE LAS VARIABLES CLAVE PARA LA GENERACIÓN DEL DIAGRAMA CAUSAL APLICABLE A LA DINÁMICA DE SISTEMAS	29
4.1. MÉTODO DE ANÁLISIS ESTRUCTURAL	29
4.2. DIAGRAMA CAUSAL	31
4.3. GENERACIÓN DE DIAGRAMA CAUSAL Y DE LOS CICLOS ENTRE VARIABLES	37
5. RESULTADOS DEL CASO BASE UTILIZANDO VENSIM® Y ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD	41
5.1 VENSIM®	41
5.2 CASO BASE	44
5.3 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD	51
6. CONSTRUCCIÓN DE ESCENARIOS CONSIDERANDO EL PROBABLE AGOTAMIENTO DEL PETRÓLEO Y EL INCREMENTO DE LOS MATERIALES VÍRGENES CON RECURSOS RENOVABLES EN CONJUNTO CON EL RECICLAJE	55
7. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	62
APÉNDICES	67
A.1 DINÁMICA DE SISTEMAS	67
A.2 EXERGÍA	71
A.3 MÉTODOS MULTICRITERIO	76
A.4 INTERSECCIONES ENTRE DISCIPLINAS	84
A.5 APLICACIONES DESARROLLADAS	88
A.6 ECUACIONES ASOCIADAS AL MODELO	90
A.7 PERFILES	94
REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS	99

Índice de Figuras

Figura 1.1.1 Elementos del Desarrollo Sustentable.....	2
Figura 2.4.1. Rutas tecnológicas potenciales de precursores poliméricos.....	10
Figura 2.4.2. Rama de rutas tecnológicas para etanol producido a partir de celulosa.....	11
Figura 2.4.3. Rama de rutas tecnológicas para el ácido láctico producido a partir de celulosa.....	11
Figura 2.5.1. Clasificación de plataformas de biorefinación de la Agencia Internacional de Energía.....	13
Figura 2.6.1. Principales métodos de solvólisis para la depolimerización de PET.....	14
Figura 2.6.2. Representación esquemática de la reacción de extensión.....	16
Figura 2.6.3. Dependencia de la naturaleza de la reacción y sus posibles aplicaciones dependiendo de la viscosidad intrínseca lograda.....	16
Figura 2.6.4. Proceso generalizado para el procesamiento de PET post consumidor.....	18
Figura 2.6.5. Proceso Bepex continuo para la obtención de rPET vía SSP.....	19
Figura 2.6.6. Requerimientos energéticos para un sistema de 12 t/d de rPET.....	20
Figura 3.1. Metodología Escobar et al.....	21
Figura 3.1.1. Metodología general.....	22
Figura 3.2.1. Prospectiva.....	24
Figura 3.3.1. Dinámica de Sistemas (DS).....	25
Figura 3.4.1. Análisis de Exergía.....	26
Figura 3.5.1. Análisis Multicriterio y Análisis Multiescenario.....	27
Figura 4.2.1. Gráfico y Diagrama de Influencias Directas.....	34
Figura 4.2.2. Gráfico y Diagrama de influencias indirectas.....	36
Figura 4.3.1. Ciclos principales detectados en el diagrama de influencias directas.....	38
Figura 4.3.2. Diagrama causal y ciclos identificados vía diagrama de influencias directas.....	39
Figura 5.2.1. Modelo dinámico del ciclo de vida del PET botella. Líneas tecnológicas de producción de material virgen.....	46
Figura 5.2.2. Modelo dinámico del ciclo de vida del PET botella (continuación). Reciclaje de material para aplicaciones de alto desempeño (botellas) y otros usos de bajo desempeño.....	47
Figura 5.2.3. Modelo dinámico del ciclo de vida del PET botella (continuación). Recuperación de material para reciclaje y deposición.....	47
Figura 5.2.4. Funciones de crecimiento anual y tasa de recuperación y uso en botella.....	48
Figura 5.2.5. Perfiles de producción de PET virgen para aplicación a botellas.....	50
Figura 5.2.6. Producción de PET reciclado y su distribución para aplicación a botellas y aplicaciones de bajo desempeño.....	51
Figura 5.3.1. Impacto sobre los perfiles de producción por la variación de un parámetro usando SyntheSim®.....	51
Figura 5.3.2. Ventana de definición del análisis de sensibilidad en Vensim®.....	52
Figura 5.3.3. Perfiles de sensibilidad para diferentes flujos de PET.....	53
Figura 6.1. <i>Escenario 1:</i> Aplicación de medidas 10 años antes del declive.....	56
Figura 6.2. <i>Escenario 1:</i> Aplicación de medidas 10 años antes del declive. Modificación de parámetros durante la simulación.....	57
Figura 6.3. <i>Escenario 2:</i> Aplicación de medidas al inicio del declive.....	58
Figura 6.4. <i>Escenario 2:</i> Aplicación de medidas al inicio del declive. Modificación de parámetros durante la simulación.....	59
Figura 6.5. <i>Escenario 3:</i> Aplicación de medidas a partir del año 5 del horizonte de planeación.....	60
Figura 6.6. <i>Escenario 3:</i> Aplicación de medidas a partir del año 5 del horizonte de planeación. Modificación de parámetros durante la simulación.....	61
Figura 6.7. Perfil de evolución de la producción de bPET reciclado.....	61
Figura A.7.1. Perfil de sensibilidad del flujo de producción de PET virgen vía recursos no renovables.....	94
Figura A.7.2. Perfil de sensibilidad del flujo de producción de PET virgen vía recursos renovables.....	95
Figura A.7.3. Perfil de sensibilidad del flujo de producción total de PET virgen.....	95
Figura A.7.4. Perfil de sensibilidad del inventario total de botellas de PET producidas.....	96
Figura A.7.5. Perfil de sensibilidad del PET reciclado listo para reincorporarse a la cadena de producción.....	96
Figura A.7.6. Perfil de sensibilidad del flujo de PET reciclado para la obtención de botellas.....	97
Figura A.7.7. Perfil de sensibilidad del flujo de PET reciclado para usos diferentes al de botella.....	97
Figura A.7.8. Perfil de sensibilidad del flujo de deposición de PET a rellenos sanitarios.....	98
Figura A.7.9. Perfil de sensibilidad de la recolección de PET para reciclaje.....	98

Índice de Tablas

Tabla 2.6.1. Propiedades del Tereftalato de polietileno postconsumidor requeridas para aplicaciones de alto desempeño,,,	18
Tabla 4.2.1. Definición de variables	32
Tabla 4.2.2. Matriz de Influencias Directas, MID	33
Tabla 5.2.1. Variables incorporadas al modelo	44
Tabla 5.2.2. Parámetros principales	50
Tabla 5.2.1. Rango de valores para los parámetros principales del modelo	52
Tabla A.3.1 Información básica del problema multicriterio	80
Tabla A.3.2 Pesos de relativa importancia	81

Resumen

Esta tesis presenta una metodología para el análisis y la evaluación de tecnologías alternativas relacionadas con la producción de materiales de uso final. El análisis y la evaluación se llevan a cabo en el marco del desarrollo sustentable tomando en cuenta que, en lo referente al ciclo de vida se estudia desde la extracción de las materias primas para la obtención del material de uso final, su procesamiento, reciclaje y deposición.

La presente tesis se centra en los métodos de prospectiva y dinámica de sistemas de la metodología propuesta. En el marco de los métodos de prospectiva se aplica el método de Matriz de Impactos Cruzados – Multiplicación Aplicada a una Clasificación para visualizar la relación entre las variables e identificar las variables clave, como herramientas para generar el diagrama causal representativo del ciclo de vida del material de uso final en estudio. Por su parte, en lo referente a la dinámica del sistema, se presenta la simulación del modelo de ciclo de vida del material en estudio, su evaluación y ajuste mediante el análisis del comportamiento de las variables.

En particular, esta tesis estudia el ciclo de vida del Tereftalato de Polietileno (PET) en su aplicación para empaque de bebidas. Las rutas tecnológicas consideradas para la producción de Tereftalato de Polietileno son la producción de PET a partir de petróleo y gas, recursos no renovables, su contraparte proveniente de recursos renovables, y, la recuperación y reciclaje del material proveniente de la industria de empaque.

Como consecuencia del comportamiento del sistema y el conocimiento de la existencia del llamado “pico petrolero” y su impacto directo en la producción de Tereftalato de Polietileno se evalúan tres escenarios de mitigación con el modelo desarrollado.

Abstract

This thesis presents a methodology for the analysis and evaluation of alternative technologies related to end-use materials production. The analysis and evaluation are focused within sustainable development framework taking into account that life cycle is carried out from raw materials extraction to deposition of the end-use material.

This thesis focuses on the prospective and system dynamics methods of the proposed methodology. In the context of prospective methods, Impact Matrix Cross-References Multiplication Applied to a Classification method is performed to visualize key variables and its relationships, as a tool to generate the causal diagram representative of the end-use material life cycle. On the other hand, life cycle model simulation is performed under system dynamics approach. Model evaluation and adjustment are performed by analyzing variables behavior.

Specifically, this thesis studies polyethylene terephthalate (PET) life cycle for beverage packaging. The relevant technological routes are PET production from oil and gas, non-renewable resources and its counterpart, production from renewable resources, and, recovered and recycled material coming from the packaging industry.

As a result of system behavior and the so-called "peak oil " and its direct impact to polyethylene terephthalate production, three mitigation scenarios are evaluated with the developed model.

1. Introducción

1.1 Desarrollo sustentable.

Actualmente el término de “desarrollo sustentable” tiene diferentes definiciones. La definición establecida por Brundtland (1987) es la más aceptada, en ella se menciona que “el desarrollo sustentable es un desarrollo social que cubre las necesidades de las generaciones actuales sin comprometer las necesidades de las generaciones futuras”. De esta definición es claro que solamente se puede alcanzar en forma multidisciplinaria, ya que implica cuestionamientos filosóficos, económicos, políticos, sociales y de las ciencias naturales.

En este enfoque, las ciencias naturales, que se encuentran dentro del factor tecnológico del desarrollo sustentable, son de gran importancia. Ellas estudian las diferentes tecnologías para generar los bienes y satisfactores para la sociedad a partir de los recursos naturales. Algunos productos y/o procesos pueden poner en riesgo la viabilidad de las generaciones presentes y futuras tanto en el corto plazo como en el largo plazo.

Las amenazas consisten en primer término en el ritmo de extracción y uso de los recursos materiales y energéticos disponibles en la naturaleza. Si estos recursos son consumidos a un ritmo mayor al que el ecosistema puede producirlos, las necesidades de las generaciones futuras se ponen en riesgo. En segunda instancia, lo relacionado con la emisión de productos de desecho al ambiente, lo que significa que estos desechos emitidos pueden afectar los mecanismos ecológicos y por lo tanto la capacidad de producción de los recursos en el ecosistema (Dewulf et al., 2000). Lo anterior implica que el desarrollo sustentable solo puede ser garantizado mediante la definición de diversas condiciones a la frontera, procedentes de diferentes campos de la ciencia. Es claro que desde el punto de vista de las ciencias naturales, se pueden mencionar dos condiciones de forma directa: los recursos para producir los bienes no deben agotarse y las emisiones no deben poner en riesgo el sistema ecológico. Estas condiciones también se reflejan en el aspecto ambiental del ciclo de vida (Hauschild, 1997).

De las dos condiciones enunciadas se puede obtener una condición indirecta para el desarrollo sustentable desde el enfoque tecnológico: la eficiencia. Esto debido a que las eficiencias altas reducen los requerimientos recursos y la salida de emisiones de los procesos.

Regresando a las condiciones a la frontera, la primera condición de sustentabilidad requiere el conocimiento de los diferentes recursos disponibles en el ecosistema, es decir, el inventario de los recursos. Estos recursos pueden ser renovables (son repuestos por el ambiente) o no renovables (su regeneración tarda millones de años, p.e, minerales y petróleo).

La segunda condición para una sustentabilidad tecnológica es la prevención de las emisiones peligrosas (p.e. clorofluorocarbonos) que interfieran con los procesos ambientales al ser estas emisiones, difícilmente asimilables por el ecosistema. Adicionalmente, las emisiones de compuestos “no peligrosos” como el CO₂, pueden alterar los procesos ambientales si su ritmo de emisión es mayor a la capacidad del ecosistema en asimilarlos o incorporarlos a los mecanismos naturales.

Al respecto, se han desarrollado diversas técnicas para la evaluación del impacto de las acciones del hombre en su medio y sus consecuencias a corto, mediano y largo plazos. Una amplia variedad de estas técnicas se han agrupado dentro de la prospectiva. La Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económico (OCDE) adopta la definición de prospectiva del Profesor Ben Martin (1995), donde se dice que la prospectiva es: “*el conjunto de tentativas sistemáticas para observar e integrar a largo plazo el futuro de la ciencia, la tecnología, la economía y la sociedad con el propósito de identificar las tecnologías emergentes que probablemente produzcan los mayores beneficios económicos y sociales*”.

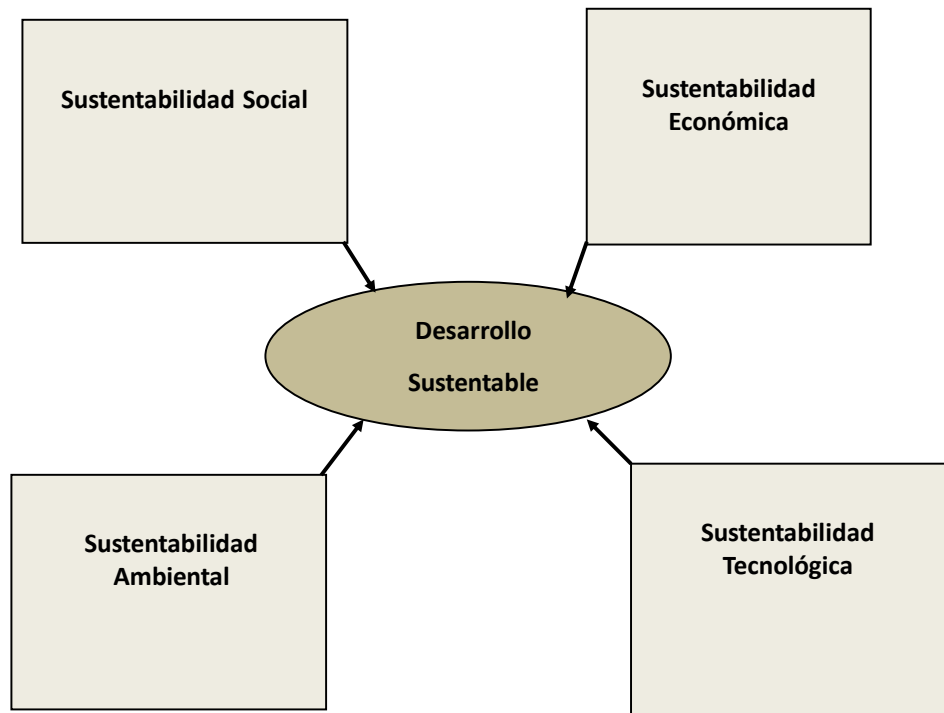


Figura 1.1.1 Elementos del Desarrollo Sustentable

De la definición anterior y el creciente interés en el desarrollo de políticas enfocadas a la generación de productos y servicios ecológicamente adecuados, el uso del análisis del ciclo de vida (LCA, por sus siglas en inglés) de los productos y servicios, ha requerido la incorporación de criterios que lo robustezcan.

En la revisión realizada por Azapagic (1999), de las aplicaciones del análisis de ciclo de vida, resume diversos casos de estas incorporaciones, los cuales buscan realizar optimización de procesos, bajo el enfoque del análisis de objetivos múltiples, a fin de encontrar la “mejor opción practicable” (BPEO por sus siglas en inglés), adicionalmente identifica que esta técnica es dependiente de los alcances (fronteras) definidos, el estado operacional del sistema y los antecedentes económicos.

Otra contribución a análisis de ciclo de vida, se presenta desde el enfoque de la eficiencia energética, en particular, desde el punto de vista del Análisis de Exergía, que representa la mayor contribución en el desarrollo de los estudios de ciclo de vida. Cornelissen (1997) vinculó exitosamente los campos de energía, ambiente y desarrollo sustentable mediante el concepto de exergía, al incorporar los flujos de exergía en el análisis de ciclo de vida. Igualmente, establece la propuesta del Análisis del Ciclo de

Vida Exergético (ELCA por sus siglas en inglés), donde el consumo (destrucción) de exergía es considerado el criterio principal, ya que en el marco del desarrollo sustentable, la destrucción (irreversibilidades) de los depósitos de exergía de los recursos naturales debe ser minimizada a niveles en los que se tenga el mínimo impacto ambiental, con la finalidad de que los sistemas de soporte de vida, sean garantizados a las siguientes generaciones, principalmente referido a el agotamiento de los recursos no-renovables. Este análisis de exergía y ciclo de vida, Cornelissen lo incorpora como criterio de desempeño en equipos, plantas de proceso, y, formalmente hablando, aplica la propuesta del ELCA en la comparación de productos de uso final, en particular, el caso de los vasos de poliestireno con respecto a las tazas de cerámica.

Con la filosofía de establecer una línea base general para la realización de estudios de ciclo de vida, la Organización Internacional para la Estandarización (ISO) publica la norma ISO 14040:2006, en la cual se define al ciclo de vida como “Etapas consecutivas e interrelacionadas de un sistema del producto, desde la adquisición de materia prima o de su generación a partir de recursos naturales hasta la disposición final”, de donde se desprende que un análisis de ciclo de vida consiste en la “Recopilación y evaluación de las entradas, las salidas y los impactos ambientales potenciales de un sistema del producto a través de su ciclo de vida”.

La misma norma reconoce las limitantes propias que tienen, lo cual da la libertad de incorporar el análisis de ciclo de vida a otras metodologías o viceversa, así como, su aplicación a otros campos del conocimiento como ciencias sociales.

El estudio de exergía y ciclo de vida de los plásticos de uso final en la cadena de producción, es decir, aquellos que se emplean en la vida cotidiana lo aborda Dewulf (2004), analizando diversos plásticos (polietileno, polipropileno, poliestireno, Tereftalato de polietileno y cloruro de polivinilo) desde la obtención de la materia prima hasta que estos son desechados. Dewulf, hace especial énfasis en la etapa final del ciclo de vida de los plásticos que analiza, a fin de obtener las opciones para su uso como fuentes de energía para la generación eléctrica o como fuente de calentamiento.

De lo anterior se entiende que, en general, la esencia del análisis de ciclo de vida es comparar las entradas y salidas consolidadas de un proceso o producto, desde el enfoque conocido como “de la cuna a la tumba” (*from cradle to grave*), tomando en cuenta las irreversibilidades antes mencionada.

La aplicación del ciclo de vida y exergía a procesos presenta diversos caso de estudio como son: el análisis los sistemas de tratamiento de efluentes gaseosos en plantas de tratamiento de aguas residuales con carga de componentes orgánicos volátiles, y el estudio realizado por Hernández (2006) sobre la sustentabilidad del sector petrolero nacional aplicando el ciclo de vida exergético, esto por mencionar una diminuta fracción de la aplicación a procesos.

Recientemente en el marco de la dinámica de sistemas, han surgido propuestas donde se busca llevar las transiciones tecnológicas de simples tópicos periféricos (definidos como una razón de cambio constante) a formar parte del cuerpo central del análisis, considerando las retroalimentaciones positivas o negativas que se puedan generar, en un modelo de dinámica de sistemas, como propone G. Vancronenburg (2007).

En la sección de anexos, se describen con mayor profundidad los campos del conocimiento principales involucrados y se revisan las vinculaciones entre campos del conocimiento y su aplicación a técnicas de evaluación que se han desarrollado, dirigidas al desarrollo sustentable.

1.2 Enfoque de la Tesis.

La presente tesis tiene como objetivo presentar y demostrar una mejora y adaptación de la metodología desarrollada por Escobar et al. (2012), para analizar tecnologías alternativas relacionadas con la producción de materiales de uso final. Se analizará tanto la oferta como la demanda a largo plazo de los materiales, seleccionando uno de ellos, a la ocasión el Tereftalato de Polietileno (PET), con el objetivo de mejorar la conservación de los recursos naturales. En lo que refiere al estudio del ciclo de vida, se estudiará desde la obtención de la materia prima hasta que éste es desechado. **Para ello se utilizarán métodos de prospectiva y de dinámica de sistemas.**

Hagamos notar que el enfoque de la tesis se limitó a los métodos de prospectiva y de dinámica de sistemas, ya que de haber seguido la metodología al pie de la letra, tal y como se presenta en el capítulo 2 de la presente tesis, no solo era presuntuoso sino poco probable obtener la información adecuada. En este sentido se pronunció también el H. Jurado del examen de candidatura al grado de doctor.

1.3 Objetivos particulares de la investigación.

I. Identificar las rutas tecnológicas de producción del PET en uso final tomando en cuenta las diferentes posibilidades de producción de éste a través de recursos obtenidos de fuentes renovables y no renovables, con el fin de utilizar los recursos de forma eficiente y sustentable y que los resultados sirvan como medio de identificación de nichos de oportunidad para la elección de los procesos de producción, incluyendo el reciclaje.

II. Identificar las transiciones tecnológicas que permitan la manufactura de productos básicos, intermedios y finales, usando principalmente recursos renovables y fuentes alternas de forma eficiente, tomando en cuenta la dinámica del sistema estudiado en el largo plazo utilizando técnicas de prospectiva

Esta tesis se centró principalmente en la teleología de los ciclos de vida del Tereftalato de polietileno, producido por tres vías: 1.- La vía petroquímica, por la reacción entre el ácido tereftálico y el etilenglicol, asu vez provenientes de naftas en donde se encuentra el p-xileno, materia prima del primero a través del proceso BTX y el segundo del etileno transformado en óxido de etileno primero y luego en etilenglicol. 2.- La vía bioquímica a través de biorefinerías para producir biopolímeros, usando recursos renovables. 3.- La posibilidad de fabricar los productos provenientes de las dos vías anteriores, mediante el **reciclaje químico** para aumentar la producción y con ello, satisfacer la creciente demanda del uso final del PET (botellas).

Es obvio que resulta necesario encontrar un equilibrio entre las vías petroquímica y bioquímica versus el reciclaje en el largo plazo por lo que la utilización de la prospectiva y la dinámica de sistemas resultan clave en el desarrollo de la presente tesis.

1.4 Hipótesis.

1. Las consecuencias, la probabilidad de éxito de la prospectiva y la dinámica de los sistemas en estudio, pueden cuantificarse en el largo plazo.
2. Existen alternativas tecnológicas para la manufactura de productos de uso final, provenientes de la industria petroquímica y bioquímica, que utilicen eficiente y sustentablemente los recursos naturales ya sean renovables o no.
3. La visualización de las transiciones tecnológicas de las tres vías de producción, permite evaluar procesos para la planeación, implementación y evaluación de estrategias de desarrollo tecnológico.

2. Los Materiales Plásticos y el Ciclo de Vida

2.1 Introducción.

El desarrollo de materiales plásticos inicia con el uso de materiales naturales con propiedades plásticas evolucionando con la modificación química de dichos materiales y finalmente con el desarrollo de materiales sintéticos los cuales se reconocen actualmente como los plásticos modernos. La creación de la bakelita por Leo Baekland en 1907, y su producción en masa es el punto clave, al ser el primer plástico completamente sintético.

La producción de los polímeros inicia con el proceso de destilación del petróleo, lo que involucra la separación del petróleo en fracciones que difieren en el tamaño y estructura de la mezcla de las moléculas. Dentro de las diferentes fracciones del petróleo es la nafta la que tiene un papel crucial en la producción de plásticos. Los procesos mayoritarios en la producción de plásticos son los conocidos como polimerización y poli condensación, los cuales requieren de catalizadores específicos de acuerdo a los monómeros y la estructura y el tamaño del producto deseado.

Es importante considerar que los diferentes tipos de plásticos se agrupan en dos grandes familias de polímeros, 1) termoplásticos, los cuales se ablandan al calentarse y se endurecen nuevamente al enfriarse como el polietileno (PE), el polipropileno (PP) y el poliestireno (PS), y 2) termoestables, que no pueden ablandarse nuevamente una vez moldeados como el poliuretano (PUR) y el politetrafluoroetileno (PTFE).

Se emplean un amplio espectro de aditivos para mejorar las propiedades intrínsecas de los diferentes plásticos de acuerdo al uso para el que son destinados, entre las propiedades que se modifican comúnmente se encuentran el color, conductividad térmica, inflamabilidad y la resistencia mecánica.

Las diferentes propiedades de los polímeros los hacen materiales para aplicaciones muy diversas. La relativa baja densidad de la mayoría de los polímeros se traduce en productos de uso final de bajo peso, por su parte la característica de ser aislantes térmicos y eléctricos presentan grandes campos de aplicación, sin embargo, de ser requerido pueden presentar características como conductores de electricidad. Los plásticos son materiales resistentes al ataque corrosivo de diversas sustancias, algunos son transparentes lo que permite la fabricación de dispositivos ópticos. Son materiales de fácil moldeo facilitando la creación de formas complejas, permitiendo así la integración con diversos materiales y funciones. En el caso de que las propiedades intrínsecas de un material no cubran los requerimientos específicos de una aplicación, las propiedades del material pueden ser modificadas por la incorporación de cargas de refuerzo, colorantes, agentes espumantes, retardantes de flama, etc., para cubrir las demandas requeridas por la aplicación.

Por estas y otras razones, los plásticos son usados en diversos sectores productivos, principalmente, en empaque, construcción, transporte, salud, eléctrico-electrónico, agricultura, y, deportes y esparcimiento.

2.2 Los polímeros y el análisis de ciclo de vida.

Si bien los primeros polímeros fabricados por el hombre fueron obtenidos de fuentes naturales, fueron desplazados por los polímeros de origen petroquímico por el crecimiento de la industria petroquímica principalmente en la década de 1930. Es a partir de la década de 1980 y en especial en la década de 1990, los biopolímeros y las fibras naturales, han presentado un incremento en su participación e importancia en diversas aplicaciones. Las materias primas obtenidas a partir de procesos biológicos son empleadas en la producción de materiales biodegradables, así como de materiales no-biodegradables. La superioridad en términos de medio ambientales de los bio-materiales ha sido la fuerza impulsora principal que ha generado este incremento en su uso, el cual se espera se mantenga en el futuro.

Como consecuencia, se requiere la comparación de los bio-materiales con sus contrapartes petroquímicas. Para esto el análisis de ciclo de vida (ACV), ha contribuido con resultados importantes, por ser un método estandarizado para la cuantificación de los impactos ambientales.

La revisión a diversos estudios de ACV aplicados a polímeros de base petroquímica y base biológica (Patel et al., 2005), revela suposiciones cuestionables e incertidumbres en la información. Entre estas suposiciones e incertidumbres figuran el marco de referencia de los estudios de ACV realizados, en los que el enfoque comúnmente utilizado es el conocido como *cradle to factory gate (de la cuna a la puerta de la fábrica)*, situación que deja muy acotado el estudio de ciclo de vida al excluir de este las etapas posteriores a la obtención del material hasta su disposición final. Esto incluye la consideración de las diversas opciones de tratamiento de residuos y reciclaje, debido al fuerte impacto que tienen en el resultado final.

Entre los resultados relevantes de los estudios de ACV revisados por Patel (op. cit.), a diversos materiales, se encuentra de manera general que los materiales de base biológica contribuyen claramente a los objetivos del ahorro de recursos energéticos y la mitigación de gases de efecto invernadero (GEI). Sin embargo, al mismo tiempo se aprecia que el desempeño de dichos materiales no supera al correspondiente de sus contrapartes sintéticas.

En un estudio realizado por Pilz et. al. (2010) para Denkstatt GmbH en 2010, se cubren algunas de las deficiencias detectadas en estudios previos, destacando el enfoque *de la cuna a la tumba (from cradle to grave)*, al cuantificar los impactos de productos plásticos a lo largo del ciclo de vida completo; el estudio no pretende fijar una premisa de superioridad de los plásticos sobre otros materiales, ya que, todos los materiales tienen características que los hacen adecuados en mayor o menor medida para una cierta aplicación, puesto que en muchos casos la solución en términos de eficiencia en el uso de recursos corresponde a la combinación de diferentes materiales.

En este sentido, la selección de un material para determinada aplicación dependerá de factores tales como el impacto en la deposición o en un adecuado sistema de recuperación de desechos. En estos casos la solución es dependiente del país y esta relacionada a la proporción de aplicaciones para el material. Si bien este estudio no aborda a profundidad los plásticos de origen de fuentes renovables, por su bajo impacto de penetración en el mercado actual, reconoce la futura importancia del papel de los materiales de fuentes renovables en la industria del plástico.

El estudio de Pilz (op. cit.) hace distinción a dos categorías para la producción de plásticos de fuentes renovables. La primera es la producción de monómeros para la fabricación de polímeros como el ácido poli láctico (PLA), donde el reto comercial es la competencia con la producción de alto volumen existente en términos de la economía de la producción y la adaptación del equipo de procesamiento. La segunda ruta es la producción de monómeros de alto volumen como el etileno a partir de etanol a partir de fuentes renovables, para usarse en plantas de polimerización para la producción de los diferentes grados de polietileno. En ambos casos los mecanismos químicos están probados, sin embargo la consideración clave será la cantidad de energía (no renovable) requerida por la cadena de producción.

2.3 La exergía y los plásticos.

La metabolización de recursos debe ser optimizada en términos termodinámicos mediante herramientas de optimización del ciclo de vida de estos materiales.

Como se ha mencionado la sustentabilidad es un tema multidisciplinario, en el que las amenazas se encuentran entre dos frentes, la extracción de recursos, principalmente los no renovables, y la generación de emisiones por los procesos en sí mismos o incorporados a los productos, los cuales son liberados al final de su uso e impactan en la salud de varias generaciones y el ecosistema.

Con esta visión y en base a las ventajas del análisis de exergía, especialmente en la cuantificación del uso de recursos, Dewulf (op. cit.) estudia la exergía como herramienta de evaluación del metabolismo industrial de sistemas de residuos plásticos, presentando métricas de sustentabilidad en los sistemas industriales con base en la 2ª ley de la termodinámica.

Dewulf (op. cit.), enfoca su estudio a cinco plásticos de alta demanda: polietileno (PE), polipropileno (PP), poliestireno (PS), tereftalato de polietileno (PET), y cloruro de polivinilo (PVC), desde la producción de material virgen basado en la extracción de materias primas, y considerando cuatro opciones de tratamiento de residuos: reciclaje (en cual es necesario considerar aspectos como transporte y electricidad), incineración con cogeneración de calor y electricidad, relleno sanitario con incineración de biogas para cogeneración de calor y electricidad, y la deposición sin recuperación de material o energía. Todo esto lo considera para la obtención del consumo total acumulado de exergía (cumulative exergy consumption, CExC; Dewulf et al., 2000, 2001) como métrica de sustentabilidad de los materiales estudiados junto a sus eficiencias de producción.

En el análisis para los materiales establece diferentes niveles de optimización, siendo el más bajo el correspondiente al proceso individual, donde, entre las diferentes opciones disponibles aquel con mayor eficiencia en términos de exergía debe ser seleccionado. El segundo nivel consiste en la combinación de procesos llevando a cabo diferentes funcionalidades. El tercer nivel corresponde a la totalidad del metabolismo industrial, de hecho, la generación de plásticos y las posibilidades de conversión están incorporadas en un metabolismo amplio.

La metodología presentada por Dewulf, aplica el análisis de segunda ley en un nivel agregado, toma en cuenta diferentes opciones industriales resultando en diversos modos

de producción de un conjunto de productos. Ofrece así, una herramienta cuantitativa para la valoración de la eficiencia y el grado de interconexión de sistemas industriales, que en combinación con otras herramientas cuantitativas de otros aspectos de la tecnología, como los costos de inversión, operación y el desarrollo de rutas alternativas de producción y reciclaje, fortalece el debate sobre la sustentabilidad de los procesos y productos en general, y de los plásticos en particular.

2.4 Biopolímeros.

Existe confusión entre los términos “biopolímero”, “bioplástico”, “plástico biodegradable”, “plásticos de fuentes renovables”, etc., debido a que los plásticos biodegradables pueden obtenerse de fuentes petroquímicas como de fuentes renovables. La degradabilidad de materiales poliméricos está influenciada solo por la microestructura física y química del polímero, y no por el origen de las materias primas requeridas para su producción. La mejor definición general para el concepto de biopolímero describe un material que *al menos* cumple con una de las siguientes propiedades (Endres, 2001):

- Consiste (parcialmente) de materias primas de base biológica (renovables).
- Es en algún modo biodegradable.

Con esto en mente, se puede distinguir tres grupos de biopolímeros:

1. Biopolímeros degradables a base de petróleo.
2. Biopolímeros degradables (mayoritariamente) de base biológica.
3. Biopolímeros no degradables de base biológica.

Esto significa que los biopolímeros no provienen exclusivamente de recursos renovables y, por otra parte, no todos los biopolímeros a base de recursos renovables son necesariamente biodegradables como el hule vulcanizado, los plásticos de caseína o linóleo.

Biopolímeros degradables a base de petróleo.

Los biopolímeros con base en materias primas petrolíferas, así como sus productos secundarios (p.e. polioles, ácidos carboxílicos), están basados en monómeros obtenidos del petróleo crudo, gas natural o carbón, mediante varios métodos de destilación y cracking, como los plásticos convencionales. Como se mencionó en secciones anteriores el perfil de desempeño de los plásticos puede modificarse por medio de una amplia variedad de resinas, mecanismos de polimerización, parámetros de procesamiento o aditivos para su adaptación a diferentes aplicaciones. De forma similar, la degradabilidad puede ser mejorada mediante la incorporación de heteroátomos (especialmente oxígeno y nitrógeno) en sus moléculas. En los plásticos convencionales, la resistencia a la acción de químicos y microorganismos son propiedades buscadas. El objetivo para los biopolímeros degradables a base de petróleo es el diseño y desarrollo de moléculas y materiales que no son *tan* resistentes, pero que se pueden degradar y depolimerizar fácilmente bajo ciertas influencias ambientales.

Biopolímeros degradables de base biológica.

Pocos materiales recientes se encuentran disponibles en el mercado que sean a base de recursos renovables y biodegradables. Las fuentes renovables principales son la celulosa, el almidón, el azúcar, los aceites vegetales y sus productos secundarios, así

como algunas proteínas, las que se pueden usar como componentes básicos para la obtención de biopolímeros.

Biopolímeros no degradables de base biológica.

Estos materiales biopoliméricos son conocidos de hace tiempo. El primer material de polimérico de ingeniería tiene su base en materiales renovables como la celulosa y el látex natural. La disponibilidad de las materias primas era la característica principal para la obtención de estos materiales. Durante el proceso de manufactura, estos productos naturales eran modificados de cierta forma que los materiales poliméricos resultantes exhibían propiedades que eran totalmente nuevas en esos tiempos. En los inicios del siglo pasado, mientras la industrialización continuaba su avance, no estaban aún disponibles las materias primas petroquímicas, por lo que los biopolímeros no degradables de base biológicos eran manufacturados, aunque no se les conocía como biopolímeros.

Dentro de las fuentes biológicas, ya sea para la obtención de biopolímeros degradables o biopolímeros no degradables, el caso de la celulosa presenta un potencial atractivo para futuros desarrollos y así ampliar la disponibilidad de polímeros derivados directamente de monómeros provenientes de la celulosa. En la Figura 2.4.1 se presenta las primeras etapas de las rutas tecnológicas potenciales para la obtención de materiales poliméricos a partir de celulosa, las cuales parten de la depolimerización de la celulosa en glucosa. A partir de la glucosa se pueden obtener diferentes precursores como etanol, ácido láctico y ácido glutámico, entre otros.

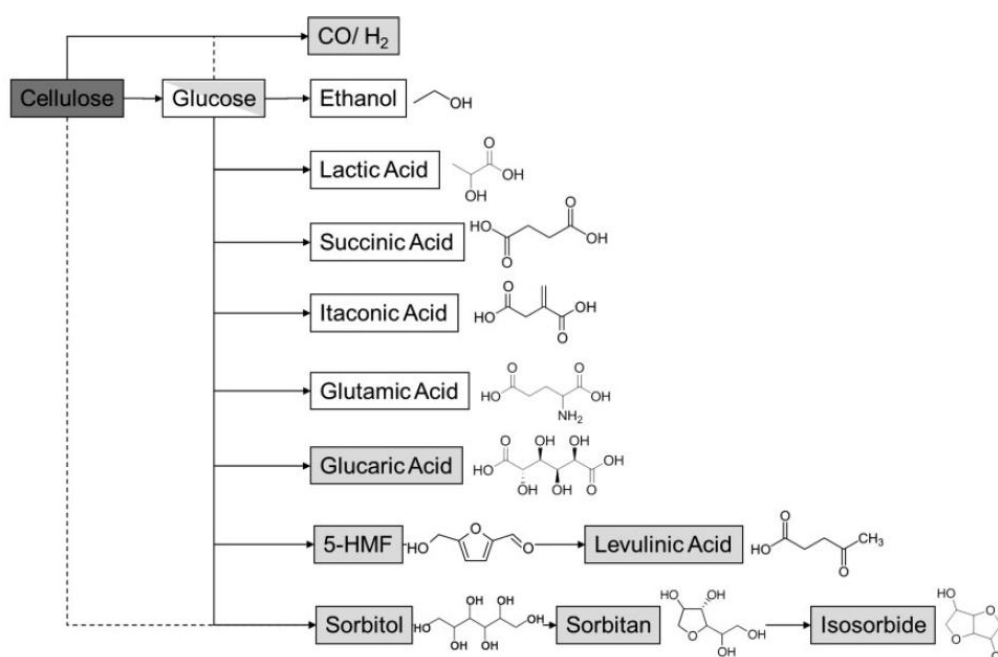


Figura 2.4.1. Rutas tecnológicas potenciales de precursores poliméricos (Rose & Palkovits, 2011).

Cada una de las rutas tecnológicas propuestas presentan ramificaciones hacia diferentes ramas poliméricas. En la Figura 2.4.2 y la Figura 2.4.3 se presentan las ramificaciones para la rama del etanol y la rama de ácido láctico respectivamente.

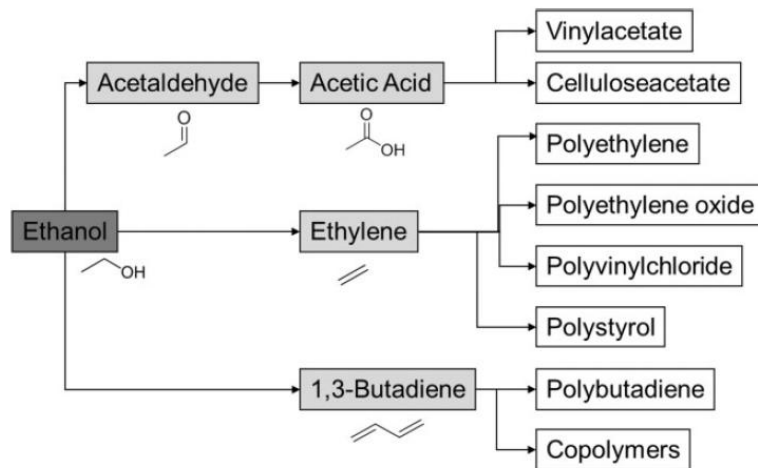


Figura 2.4.2. Rama de rutas tecnológicas para etanol producido a partir de celulosa (Rose & Palkovits, 2011).

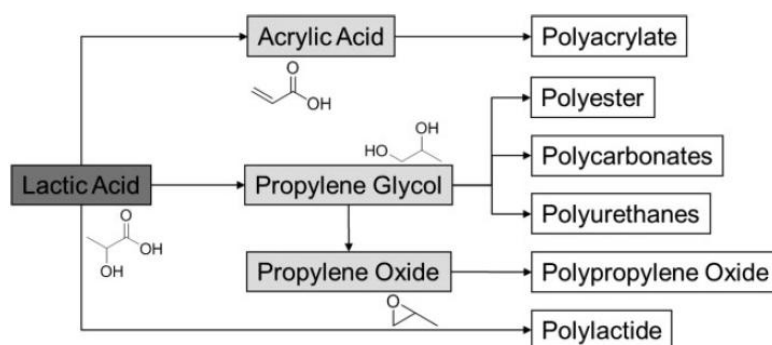


Figura 2.4.3. Rama de rutas tecnológicas para el ácido láctico producido a partir de celulosa (Rose & Palkovits, 2011).

Las diferentes rutas metabólicas se encuentran descritas ampliamente en la literatura especializada, Rose y Palkovits (2011) presentan una descripción condensada de las diferentes ramas de precursores poliméricos y sus correspondientes rutas metabólicas hacia diversos materiales poliméricos.

La propuesta de rutas tecnológicas alternativas a la ruta del petróleo, principalmente de fuentes renovables está motivada por el constante incremento en la demanda de productos a base de petróleo y la escasa disponibilidad de este recurso en el futuro, lo que afecta la sustentabilidad de los polímeros sean estos a base de petróleo o de base biológica al evaluar sus ciclos de vida (Álvarez et al., 2012).

Por lo anterior, la disponibilidad de materias primas es el criterio principal para la producción de diversos productos químicos entre ellos los polímeros. Sin embargo, no es una cuestión de disponibilidad inmediata, sino de aseguramiento estratégico y disponibilidad en el largo plazo de materias primas.

Un desarrollo en este ámbito es la llamada “*drop-in solution*”. Enunciada de forma simple como el intento de reemplazar las alimentaciones de materias primas petroquímicas con materias primas renovables manteniendo los procesos establecidos de síntesis usados para las materias primas petroquímicas. Su objetivo es la obtención de poli olefinas “convencionales”, como el polietileno o incluso el polipropileno, a partir de recursos renovables.

En este sentido The Coca-Cola Company, en 2010, introdujo en nueve mercados su llamada PlantBottle™, la cual, argumentan, tienen un contenido cercano al 30% de materias primas provenientes de fuentes renovables.

2.5 DROP-IN solutions: biorefinerías.

Los miembros de la Agencia Internacional de Energía (International Energy Agency, IEA), en el grupo de trabajo 42 sobre bioenergía, acuerdan como definición de biorefinería al “procesamiento sustentable de biomasa en un espectro de productos comercializables (alimentos, materiales, químicos) y energía (combustibles, potencia, calor)”. Esta definición permite que el concepto de biorefinería aplique a una instalación, proceso, planta o a un agrupamiento de instalaciones.

Una biorefinería puede usar todo tipo de biomasa incluyendo madera y recortes agrícolas, residuos forestales, residuos orgánicos (de origen vegetal y animal), biomasa acuática (algas y plantas marinas) y desechos industriales. Este concepto no es completamente nuevo y se ha retomado por factores económicos y ambientales, como el calentamiento global, suministro energético y políticas agrícolas, por citar algunos.

Un factor clave en la implementación de estos procesos está en el desarrollo de sistemas de biorefinación integrados a la infraestructura existente, para lograr el procesamiento de materias primas biológicas para la obtención de diversos productos de forma eficiente y rentable.

En biorefinación, las llamadas **plataformas** son intermediarios entre las alimentaciones y los productos finales. Este concepto es similar al de la industria petroquímica, donde la refinación inicia con una destilación masiva para separar el crudo en una amplia gama de intermediarios que posteriormente son transformados a los productos deseados. Las plataformas de mayor importancia en biorefinería están: biogás, gas de síntesis (syngas), hidrógeno, azúcares de seis y cinco carbonos, aceite de algas, lignina, aceite pirolítico y soluciones orgánicas. En la Figura 2.5.1 se presenta el sistema de clasificación de plataformas de acuerdo a la IEA (Cherubini et al., 2009), fuentes de materia orgánica y rutas tecnológicas para la obtención de diversos productos de refinación.

Cada ruta de proceso en la Figura 2.5.1 puede ser objeto de aplicación de la metodología descrita más adelante en el presente trabajo, para fines de demostrar la aplicación de y funcionamiento de la metodología se seleccionara una ruta tecnológica en la producción de un polímero en particular.

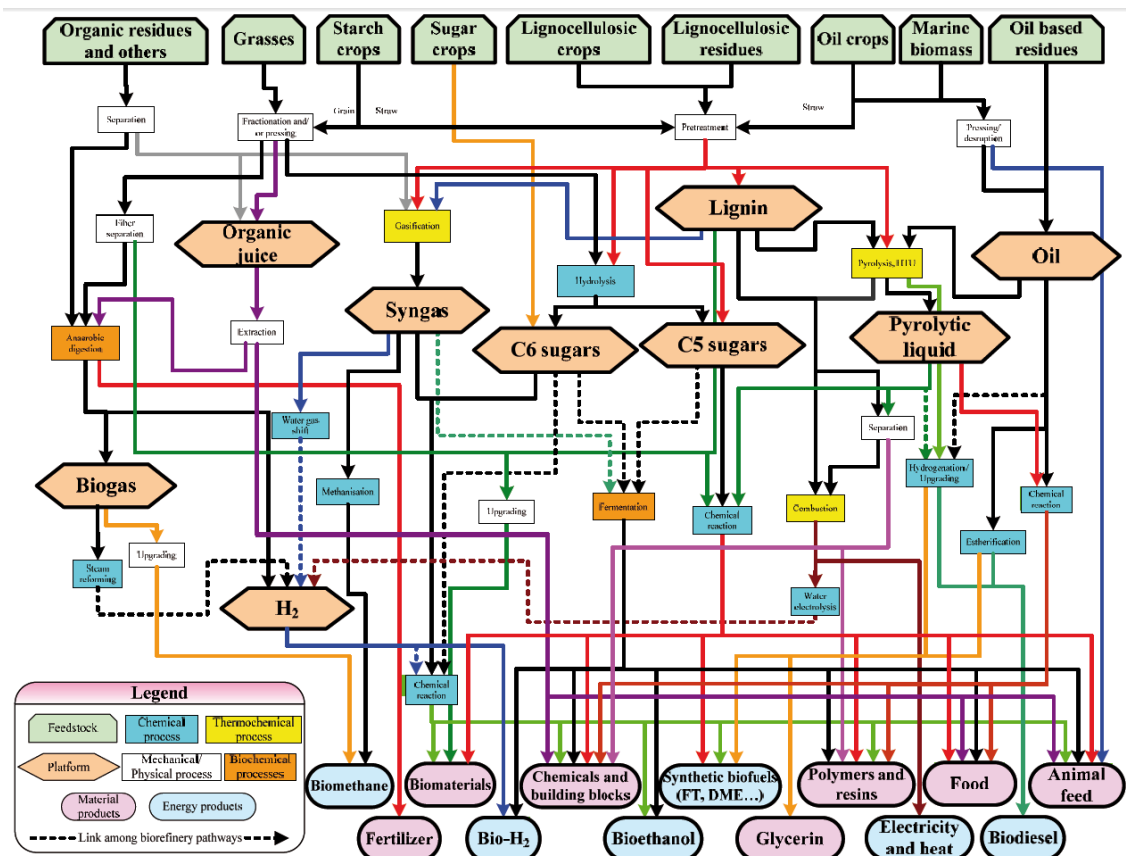


Figura 2.5.1. Clasificación de plataformas de biorefinación de la Agencia Internacional de Energía (De Jong et al., 2012).

2.6 Reciclaje de PET

Por el incremento en el consumo y no biodegradabilidad, el PET ha creado serias preocupaciones económicas y ambientales, por lo que el manejo del desecho de PET se ha convertido en un tema social importante. En vista de la creciente conciencia ambiental en la sociedad, el reciclaje continúa presentándose como la más viable para el tratamiento de los desechos de PET.

El PET es considerado uno de los materiales más sencillos de reciclar, figurando como el segundo después del aluminio en términos del valor como chatarra para el reciclaje (Sheirs, 1998), lo que ha dado como resultado el uno de los más exitosos y difundidos materiales poliméricos que se reciclan (Karayaniddis & Achilias, 2007). El reciclaje de PET se clasifica, principalmente, en reciclaje primario, secundario, terciario y cuaternario; existe también lo que se llama reciclaje de “orden cero”, el cual consiste en el reúso directo del material de desecho (Nikles & Farahat, 2005).

Reciclaje primario.

Conocido también como re-extrusión, es el proceso de reciclaje más antiguo y básico. Consiste en el reciclaje “en planta” del material de desperdicio que tiene características similares con el material original. Este proceso garantiza simplicidad y bajo costo, sin embargo, requiere de material homogéneo y libre de contaminación, lo que lo hace inconveniente para los recicladores (Al-Salem, 2009).

Reciclaje secundario.

Consiste en la separación de contaminantes del polímero y su reprocesamiento vía procesos mecánicos, tales como clasificación, molienda y extrusión (Aguado & Serrano,

1999). Este reciclaje se es cada vez más complejo en función del nivel de contaminación del material a reciclar, y presenta como principales problemas el carácter heterogéneo del material a reciclar (presencia de cargas y tintes), y la degradación de las propiedades del material en cada ciclo de reciclaje (fotooxidación y estrés mecánico).

Reciclaje terciario.

Mejor conocido como reciclaje químico, involucra la transformación de la cadena polimérica del tereftalato de polietileno. La depolimerización de la cadena puede ser parcial (producción de oligómeros y otros químicos) o total (obtención de los monómeros). Los productos obtenidos pueden ser purificados y reutilizados para la producción de otros productos químicos (Carta et al., 2003). Dentro del reciclaje químico, la reformación de la cadena polimérica a fin de contrarrestar los cambios estructurales en la cadena polimérica ocasionados por la degradación intrínseca al procesamiento del material, lo que busca el realce en las propiedades del PET.

De entre todos los métodos de reciclaje de PET (primario o “en planta”, secundario o mecánico, terciario o químico, cuaternario que involucra la recuperación de energía, como se verá más adelante), solo el reciclaje químico cumple con los principios del desarrollo sustentable, definido como aquel que cubre las necesidades de la presente generación sin comprometer la capacidad de las futuras generaciones de cubrir sus necesidades (Harris, 2001), ya que conduce a la obtención de las materias primas de las cuales se obtiene originalmente el PET, y, de acuerdo a Achilias & Karayaniddis (2004), el ambiente no se sobrecarga y no habría la necesidad del consumo de nuevos recursos para la producción de PET (Situación que de acuerdo al modelo aquí presentado es parcialmente cierta). El reciclaje químico usa procesos como la hidrólisis, metanólisis, glicólisis, amonólisis y aminólisis.

El mecanismo de reacción para la depolimerización del PET consiste en tres reacciones reversibles; la primera, en el carbón del carbonilo de la cadena polimérica se lleva a cabo una protonación rápida donde el oxígeno del carbonilo es convertido a un segundo grupo hidroxilo; segunda, el oxígeno del hidroxilo añadido ataca lentamente el átomo de carbón protonado del carbonilo; tercera, el oxígeno del carbonilo y un protón se liberan rápidamente para formar agua o un alcohol simple y el protón catalítico (Patterson, 2007).

En la Figura 2.6.1 se muestran los tres principales métodos en el reciclaje químico del PET dependiendo de la molécula con el grupo hidroxilo añadida: glicol para la glicólisis, metanol para la metanólisis y agua para la hidrólisis.

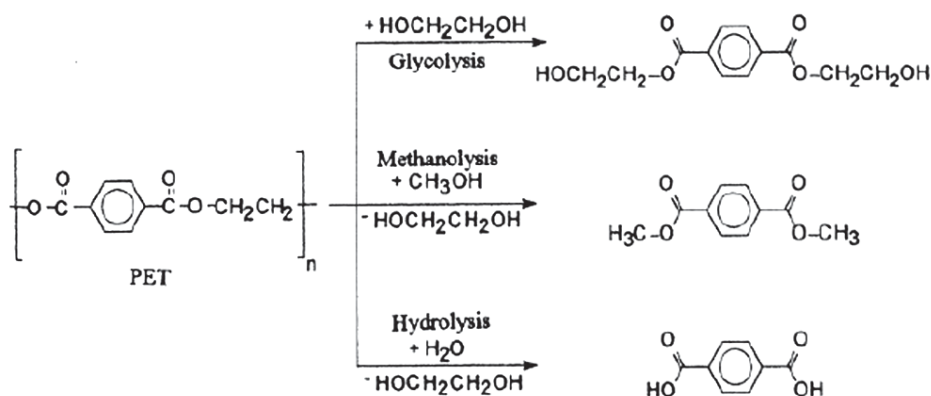


Figura 2.6.1. Principales métodos de solvólisis para la depolimerización de PET (Janssen & van Santen, 1999).

La hidrólisis involucra la depolimerización del PET a ácido tereftálico (TPA) y etilenglicol (EG) mediante la adición de agua en medio ácido, alcalino o neutro. Los productos de la hidrólisis pueden usarse para la producción de PET virgen, o convertirse a químicos de mayor valor agregado. Este método es lento en comparación con la metanólisis y la glicólisis ya que entre los agentes de depolimerización el agua es el nucleófilo más débil, requiere de altas presiones y temperaturas y la recuperación del monómero de TPA requiere numerosas etapas para alcanzar la especificación requerida.

La metanólisis consiste en la degradación a dimetiltereftalato (DMT) y EG del PET usando metanol. Este método presenta altos costos asociados a la separación y refinación de los productos de reacción. Además, si hay presencia de agua en el proceso, esta envenena el catalizador y genera varios azeótropos. La falta de una adecuada recuperación de DMT ha llevado a la metanólisis a convertirse en un proceso obsoleto (Patterson, 2007).

La glicólisis se lleva a cabo mediante el uso de etilenglicol para producir bis(2-hidroxietil) tereftalato y otros glicolizatos de PET, los cuales pueden ser utilizados en la manufactura de resinas insaturadas, espumas de poliuretano, copoliésteres, recubrimientos acrílicos e hidrofóbicos. El BHET producido puede ser usado nuevamente para la producción de PET. En el proceso de glicólisis de PET, se puede usar diferentes glicoles como solventes como dietilen glicol, trietilen glicol, propilen glicol o dipropilen glicol.

Reciclaje cuaternario.

Consiste en la recuperación del contenido energético del plástico por medio de la incineración. Esto aplica cuando el acopio, clasificación y separación es muy complejo, no resulta económicamente viable o el material es tóxico y peligroso en su manipulación. Sin embargo, es sabido que debido a las emisiones al ambiente por la combustión del plástico resulta ambientalmente inaceptable (Leian et al., 2012).

El PET post consumidor puede ser contaminado por contaminación física microscópica y macroscópica, y, por contaminación química. La contaminación física macroscópica consiste en la presencia de polvo, cristales, piedras, adhesivos, residuos de los productos envasados y otros plásticos, atribuido a un almacenamiento o deposición inadecuado. Este tipo de contaminación es sencillo de remover. Por su parte la contaminación física microscópica presenta mayor dificultad al estar parcialmente incrustada a la botella por el efecto de los adhesivos o la impregnación por impacto o abrasión. La contaminación química resulta de la adsorción de saborizantes, aceites, pesticidas, productos químicos, y combustibles almacenados en el envase en un uso secundario del mismo. Esta contaminación representa un importante riesgo si el producto reciclado está enfocado hacia el empaque de productos alimenticios.

A pesar de los esfuerzos, por el costo y desempeño en las aplicaciones del material reciclado, hoy en día, es ampliamente aceptado que el reciclaje del PET post consumidor sin reformación estructural es un procedimiento no-eficiente en aplicaciones que requieren propiedades de alto desempeño, como el envasado de bebidas carbonatadas.

El *reformado de la cadena polimérica del PET*. Por lo anterior, diversos trabajos enfocados en la reformación de las propiedades del PET post consumidor incrementando el peso molecular por medio de reacciones de extensión de cadena se han publicado (Cavalcanti et al., 2007, Awaja & Pavel, 2005); en los cuales se hace énfasis como factores controlantes a la eliminación de la humedad y la estabilización del PET en el proceso de fundición.

Métodos de reformado de PET por extensión de cadena.

La extensión macromolecular de la cadena es el resultado de reacciones particulares de post condensación entre el polímero degradado y los extensores de cadena seleccionados. Estos acoplamientos inhiben el efecto de degradación al incrementar el peso molecular por extensión, ramificación y formación de redes (reticulación). La intensidad de la degradación dependerá en mayor o menor medida, de la forma en que se realice la reacción de extensión.

La reacción de extensión de cadena se representa esquemáticamente en la Figura 2.6.2. En la Figura 2.6.3 se aprecia de forma más clara como se presenta el desarrollo de la reacción dependiendo de las condiciones a las que se lleve a cabo, en particular se presenta el porcentaje del componente extensor, y el efecto en la viscosidad intrínseca y la presencia o no de gel por la extensión y reticulación de la cadena. Así mismo, presenta diversos intervalos de viscosidad intrínseca para diferentes aplicaciones.

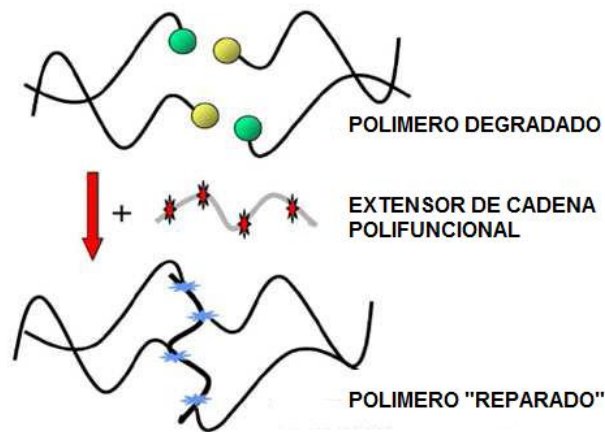


Figura 2.6.2. Representación esquemática de la reacción de extensión (Villalobos et al., 2006).

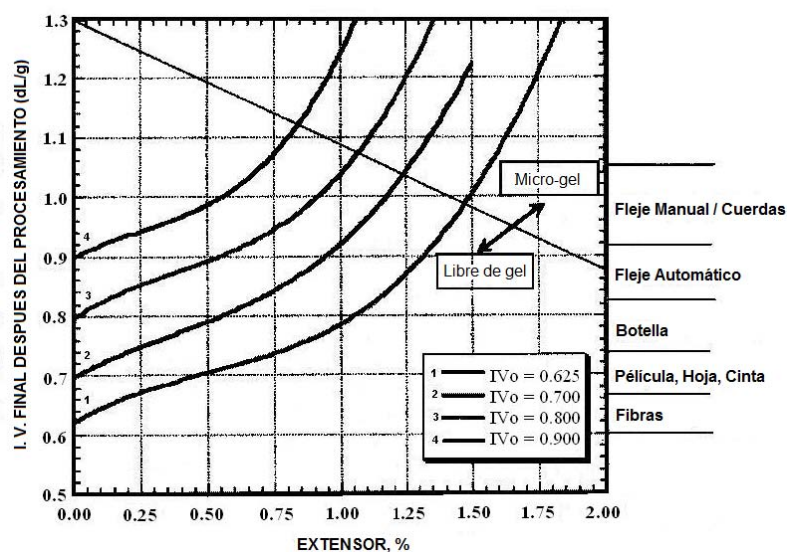


Figura 2.6.3. Dependencia de la naturaleza de la reacción y sus posibles aplicaciones dependiendo de la viscosidad intrínseca lograda (Villalobos et al., 2006).

En la mayoría de los casos, la extensión de cadena lleva a un desempeño térmico, mecánico y reológico igual o mayor que el desempeño del polímero primario (Bikiaris et al., 1996). Con lo anterior se puede decir que la extensión de cadena es una forma importante de dar valor al PET post consumidor y obtener productos de alto valor agregado, tanto técnico como económico.

A continuación se presentan dos alternativas conocidas para extender la cadena macromolecular, las cuales se aplican a los polímeros de poli condensación: polimerización en estado sólido y procesamiento reactivo (SSP y RP respectivamente por sus siglas en inglés)

La *policondensación en estado sólido* (Solid State Polycondensation, SSP) consiste en la reacción de acoplamiento entre PET y el extensor que se lleva a cabo al alto vacío, a temperaturas entre la temperatura de transición vítrea (T_g) y la temperatura de fundición (T_m) en presencia de catalizador. La reacción se lleva a cabo en el rango de temperaturas entre 200 – 240°C, estas temperaturas favorecen la extensión de la cadena. El control de temperatura es esencial ya que si la temperatura es muy baja la reacción de extensión de la cadena tarda mucho, y si la temperatura es muy alta las hojuelas de PET tienden a aglomerarse mitigando la reacción de extensión. Un crecimiento adecuado de la molécula se obtiene después de 8 horas a 230°C. Los componentes volátiles son removidos del reactor al operar al vacío o bajo una atmósfera inerte, comúnmente de nitrógeno.

El *procesamiento reactivo* (Reactive Processing, RP) del PET post consumidor para la extensión de las cadenas macromoleculares, se realiza generalmente en el equipo para fundido del polímero primario a temperaturas entre la temperatura de fundición y la temperatura de degradación, bajo condiciones particulares dependiendo del par PET – extensor, principalmente en extrusores de tornillos gemelos por la mejor dispersión de los componentes pequeños que logra mediante este proceso.

Dependiendo de la estructura química de la molécula de acoplamiento (extensor) y las condiciones de reacción específicas, la formación de las cadenas presentarán en mayor o menor medida ramificaciones y reticulación, con formación de gel y/o por degradación (Paci & La Mantia, 1998). Sin embargo, se considera que la estructura química del extensor y las condiciones de operación han de definirse para favorecer las reacciones de extensión de la cadena.

Las aplicaciones principales del PET “reconstituido” (rPET) consisten en la manufactura de botellas, láminas, láminas multicapa, paneles espumados para construcción, y modificaciones físicas mediante nano compuestos para diversos usos. El presente trabajo se considera únicamente la aplicación a botellas para la industria de bebidas, donde las reacciones de extensión ofrecen una nueva perspectiva donde el reciclaje botella a botella es posible. El uso del PET bajo este enfoque depende del potencial de reprocesamiento del material para brindar la misma seguridad que el material virgen y la solución al problema de logística que se presenta en el acopio del PET post consumidor a fin de mantener un flujo constante de material a los procesos correspondientes.

El proceso para la obtención de rPET reciclado a partir de PET post consumidor ha sido desarrollado por diversas firmas, las cuales han desarrollado procesos tecnológicos eficientes energéticamente así como en costos, adaptables para el reciclaje a gran escala y capaces de incrementar la calidad y por lo tanto el valor del PET procesado (Bhatt, 2007).

En la Figura 2.6.4 se presenta un diagrama de flujo generalizado del proceso de reciclaje donde se muestran las diferentes operaciones unitarias involucradas.

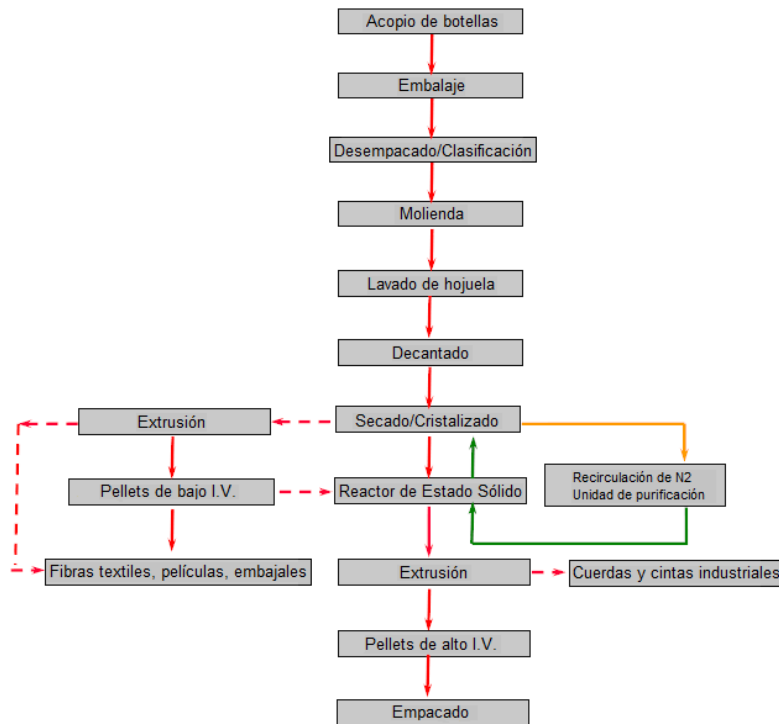


Figura 2.6.4. Proceso generalizado para el procesamiento de PET post consumidor (Bepex Int. LLC, 2007).

Las aplicaciones comerciales varían en el equipamiento y operación (lotes, semilotes o continuo). Los pasos de lavado del material acopiado también varían, algunos utilizan un lavado con sosa caliente seguido de un lavado con detergente, mientras que otros omiten uno u otro paso de lavado. Las características generales del PET post consumidor y las características requeridas para el rPET para aplicación a botella se muestran en la Tabla 2.6.1.

Características	PET post consumidor	rPET requeridas
Viscosidad (IV)	0.70 dl/g a 0.76 dl/g	Aumentar a 0.80 dl/g - 1.05 dl/g
Temperatura de fundición	240 - 250°C	
Hojuelas con color	10000 ppm a 100 ppm	reducir a < 50 ppm
Poli olefinas	100 ppm a 10 ppm	reducir a < 5 ppm
PVC	50 ppm a 10 ppm	reducir a < 5 ppm
Adhesivo	20 ppm a 5 ppm	reducir a < 3 ppm
Metales	10 ppm a 3 ppm	reducir a < 5 ppm
Humedad	< 0.4 %	reducir a < 50 ppm
Número de color	"b" valor de 5 a 2	reducir "b" valor < 2
Densidad	20 lb/ft ³ a 22 lb/ft ³	Aumentar a > 40 lb/ft ³

Tabla 2.6.1. Propiedades del Tereftalato de polietileno postconsumidor requeridas para aplicaciones de alto desempeño (Bepex Int. LLC, 2007).

Como se aprecia en la tabla el PET post consumidor presenta pobres propiedades de flujo y puede contener contaminantes orgánicos y partículas que limitan su uso. Los procesos de extrusión, filtración en fundición, solidificación y peletización son empleados regularmente para mejorar las características de flujo junto con la densidad, reduciendo el contenido de contaminantes sólidos. Sin embargo, estos procesamientos térmicos afectan de forma adversa la IV, el contenido de acetaldehído y el color, sin considerar los costos adicionales de estas operaciones.

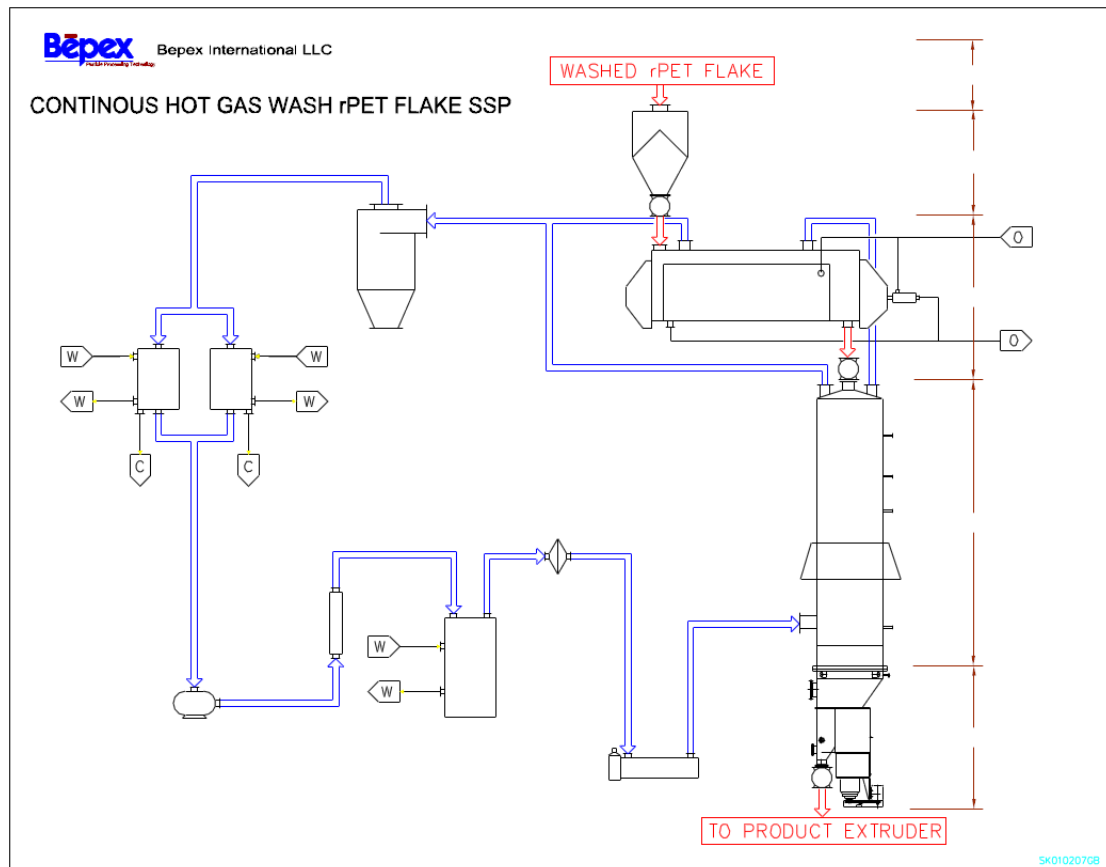


Figura 2.6.5. Proceso Bepex continuo para la obtención de rPET vía SSP (Bepex Int. LLC, 2007).

Los procesos propuestos por los desarrolladores se enfocan principalmente en el proceso SSP continuo, el cual resulta efectivo en el incremento de la IV y la densidad, a la vez que reduce el contenido de PVC, adhesivos y contaminantes orgánicos volátiles. En la Figura 2.6.5 se presenta el proceso general.

Posteriormente al lavado de las hojuelas y su separación del agua el PET se alimenta a un precalentador de disco rotativo para ser cristalizado y calentado a la temperatura de reacción. Las altas temperaturas de los discos carbonizan las trazas de PVC y PE en el material mientras remueven parte del adhesivo y los contaminantes volátiles con nitrógeno proveniente del reactor SSP; el nitrógeno posteriormente se purifica en un proceso de tres etapas (filtración, conversión catalítica y secado del gas) en un circuito cerrado hacia el reactor SSP, a fin de minimizar la reposición del gas. El PET precalentado se alimenta al reactor continuo SSP. En el reactor SSP el material se desplaza por gravedad a lo largo del reactor en el que se lleva a cabo la reacción de extensión en presencia de un flujo a contracorriente de nitrógeno caliente (200-230°C) para prevenir la degradación térmica y oxidativa de la resina, y remover el

adhesivo superficial, los contaminantes orgánicos volátiles y los productos secundarios de la reacción SSP. El tiempo de residencia del material en el reactor se ajusta para alcanzar el peso molecular deseado, alcanzando con facilidad una IV de 1.2. El PET reformado puede ser extruido directamente para obtener el producto final o peletizado sin presentar una reducción considerable en su IV.

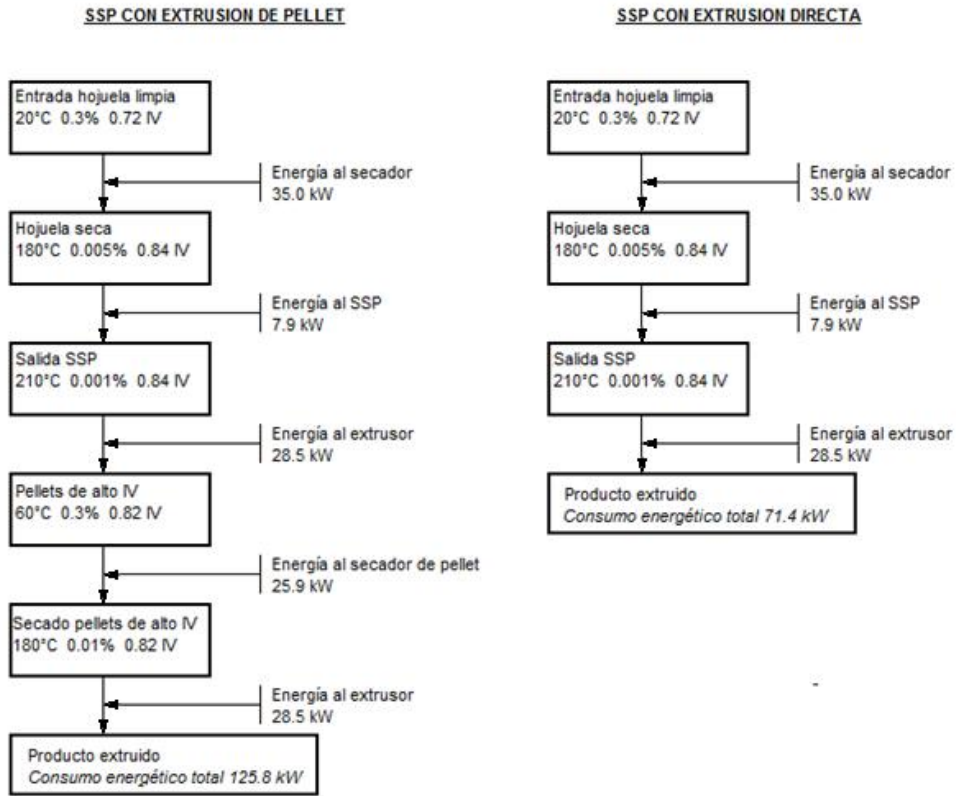


Figura 2.6.6. Requerimientos energéticos para un sistema de 12 t/d de rPET (Bepex Int. LLC).

Los requerimientos energéticos del proceso son mínimos cuando el rPET es extruido al producto final después del SSP, cuando se instala un sistema integral de lavado antes del proceso SSP. El sistema comúnmente instalado en el país entrega el rPET en presentación de pellets, los cuales se comercializan a los fabricantes de la preforma para envases de bebidas principalmente. En la Figura 2.6.6 se presenta el comparativo de consumo energético en las propuestas mencionadas.

3. Metodología

Considerando la metodología establecida por Escobar et al. (op. cit.), la cual se representa de forma gráfica en la Figura 3.1 donde queda de manifiesto la vinculación entre el análisis de ciclo de vida exergético y el análisis multicriterio cuantificando a lo largo del ciclo de vida del producto diferentes variables o criterios de análisis para su comparación con otros productos equivalentes.

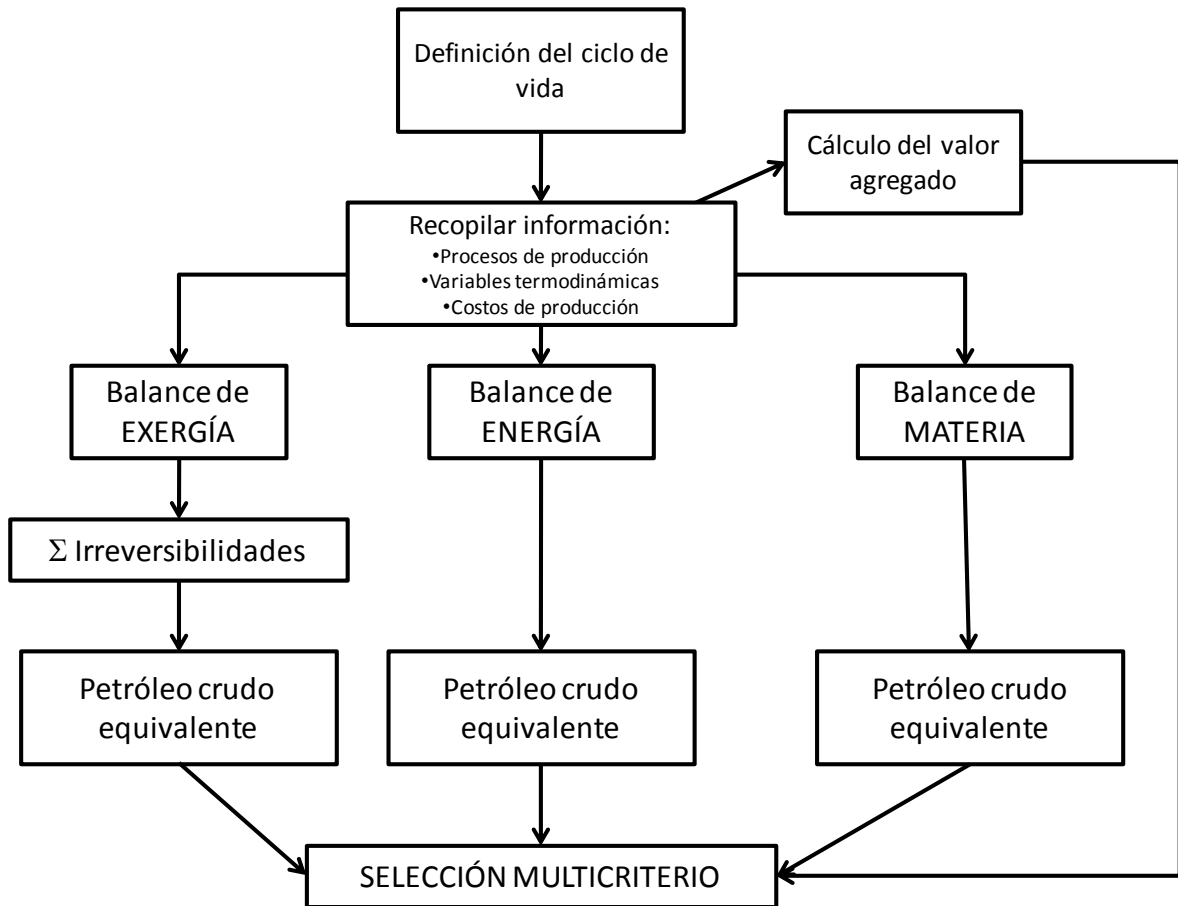


Figura 3.1. Metodología Escobar et al.

La presente sección se propone y desarrolla la propuesta de mejoramiento y adaptación a lo metodología antes mencionada incorporando el estudio de las variables clave del sistema y la evolución del ciclo de vida exergético en el tiempo. Lo que sustenta la presente tesis y proporciona un valor agregado importante a la metodología per se, así como a los campos del conocimiento involucrados.

3.1 Descripción general.

Como principio básico de toda metodología es requisito definir el objeto o sistema de estudio, para esto es necesario se definan adecuadamente el tipo de sistema, así como los alcances del mismo. Esto se encuentra representado en los primeros bloques de la Figura 3.1.1, en los cuales se hace el planteamiento del sistema a estudiar y la recopilación de información referente al sistema. La información esta contenida en la misma definición del ciclo de vida y las características de los productos y procesos involucrados en el sistema.

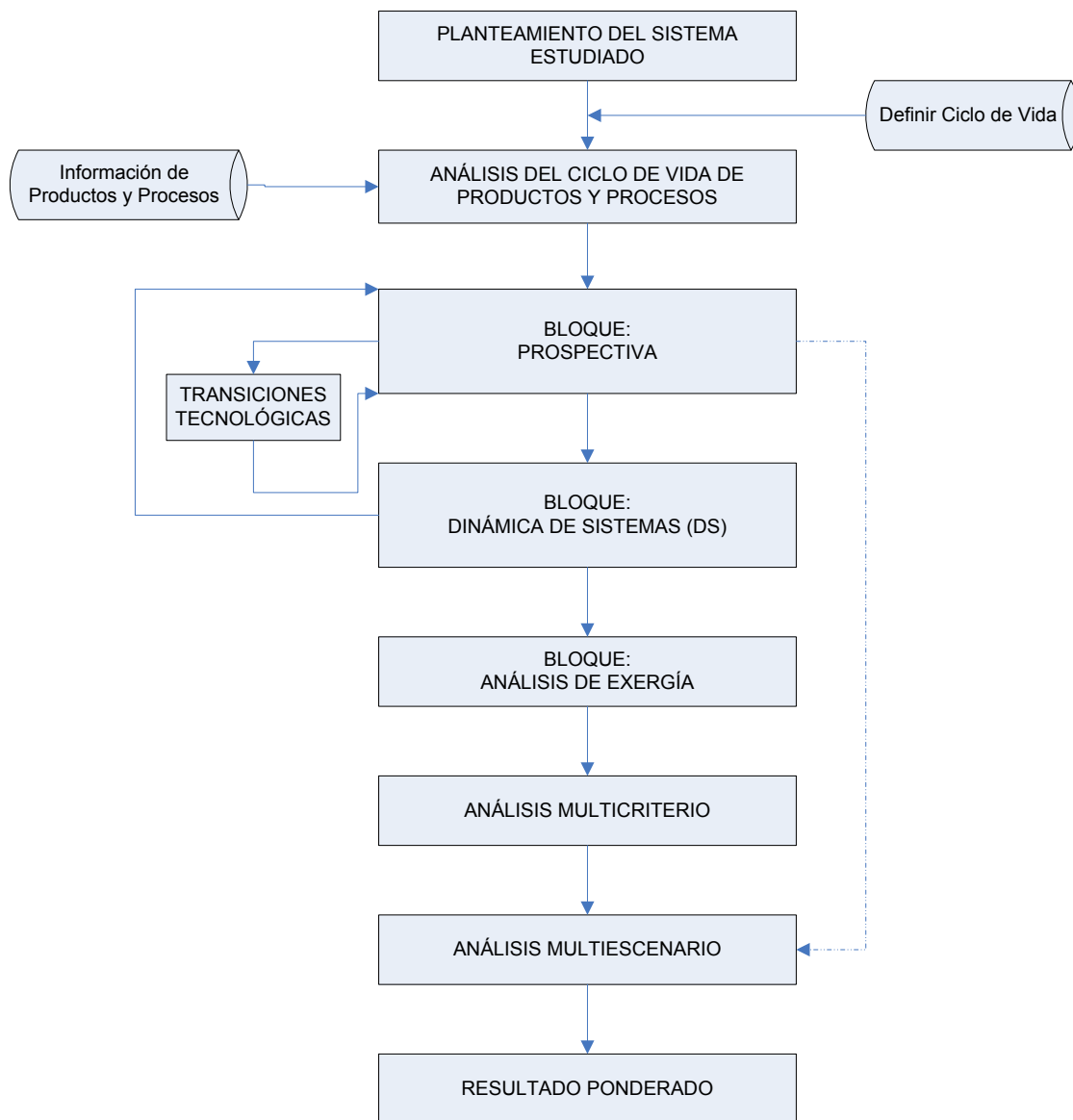


Figura 3.1.1. Metodología general.

Esta información, inventarios, permite proceder con la segunda etapa de la metodología propuesta, que corresponde al análisis del ciclo de vida de productos y procesos, con lo que el planteamiento del sistema se podrá considerar completo. Es necesario aclarar que en esta etapa la metodología toma solo definiciones y conceptos del análisis del ciclo de vida sin aplicar estrictamente la norma, la cual menciona, como se ha expresado anteriormente, sus limitaciones y da la libertad para su incorporación a otras metodologías. En particular, para la presente metodología, el análisis de los aspectos ambientales se concreta en el bloque de análisis de exergía, como se menciona en la sección correspondiente.

La definición y adquisición de la información correspondiente a los inventarios permitirá proceder al bloque de prospectiva en el que se busca la identificación de los escenarios deseados, posibles y/o probables en base al ciclo de vida, al igual que la identificación de variables claves que permitan establecer o visualizar las transiciones tecnológicas y el planteamiento de escenarios.

En el siguiente bloque se realiza el estudio de la dinámica del sistema de los escenarios visualizados anteriormente, mediante técnicas de simulación, lo que representa la evolución del sistema respecto al tiempo (largo plazo).

De acuerdo a la información obtenida en el bloque de dinámica de sistemas, es posible retroalimentar al bloque de prospectiva a fin de modificar y/o fortalecer los escenarios generados previamente, o proceder al siguiente bloque correspondiente al análisis de exergía.

En el análisis de exergía se establecerá la eficiencia energética y exergética en el ciclo de vida del sistema, considerando la cuantificación de gases de efecto invernadero (GEI), y representar o no estos resultados en términos de una unidad funcional, lo cual depende de la pertinencia que pueda generar la unidad funcional.

Los datos obtenidos hasta este punto se someten a un tratamiento para generar los criterios que permitan llevar a cabo el análisis multicriterio el cual tiene como objetivo principal obtener una jerarquización y ordenamiento de los materiales involucrados.

Posteriormente los resultados de la información multicriterio que se ha obtenido para cada escenario se procesan mediante análisis multiescenario, el cual permite relacionar y comparar las soluciones de los escenarios independientes, a fin de buscar un resultado ponderado

En las siguientes secciones se describe a detalle las etapas de la metodología identificadas en los párrafos previos.

3.2 Prospectiva

En esta sección de la metodología se busca la generación de escenarios bajo una visión conceptual del futuro a partir de las premisas disponibles en el presente, para describir el encadenamiento de los eventos que harían posible pasar de la situación presente a la descrita y adaptada para el futuro.

La información de la etapa análisis de ciclo de vida de productos y procesos permitirá abordar la prospectiva al dejar definido el planteamiento del objeto de estudio. Esta es la etapa inicial en los análisis prospectivos típicos, por lo que se puede proceder directamente a la búsqueda de las variables clave internas y externas que afectan el sistema, al igual que las tendencias y los actores involucrados. Es en esta etapa donde la clasificación de las variables y la identificación de las variables clave, es de suma importancia para la estructura del modelo del sistema en estudio. Para esto, se clasifican y jerarquizan las variables de acuerdo a la aplicación del método MICMAC (Matriz de Impactos Cruzados - Multiplicación Aplicada a una Clasificación), visualizando por medio de los planos y gráficos de influencia-dependencia la relación entre las variables.

Con las variables clave identificadas se procede a visualizar la competitividad y los objetivos estratégicos que se desean en los escenarios, lo cual permite barrer el campo de los posibles basado en los criterios de selección y las restricciones y excitadores que modifiquen la evolución; posteriormente se establecen las variables clave para el futuro que darán paso a la definición de las transiciones tecnológicas, generadas por las influencias potenciales, y la generación de escenarios.

En resumen en esta etapa se definen y enuncian las variables involucradas en el ciclo de vida del producto específico de análisis y las relaciones de influencia-dependencia existentes entre ellas, a fin de obtener una clasificación de variables e identificar las que son clave para el comportamiento del sistema y así, generar el gráfico de influencia dependencia que nos permita identificar los ciclos de retroalimentación presentes y construir un diagrama de causal, que represente de forma apropiada el ciclo de vida del sistema, para simulación(Figura 3.2.1).

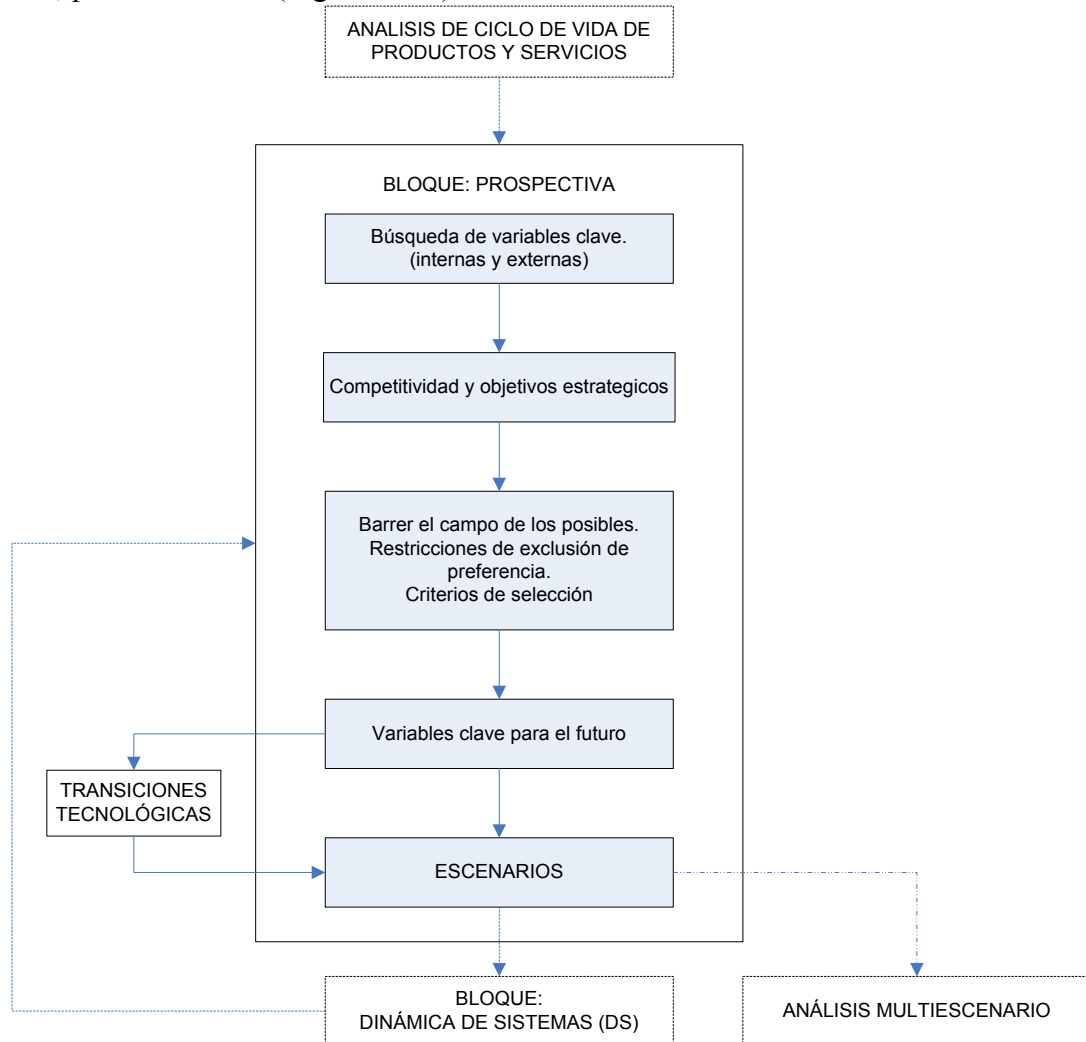


Figura 3.2.1. Prospectiva.

3.3 Dinámica de Sistemas.

En esta etapa se vincula el ciclo de vida y la dinámica de sistemas, la cual se encuentra dada por el tiempo al comparar los ciclos de vida de los procesos y productos que se involucran en el objeto de estudio establecido en las etapas anteriores. Se hace mención de “ciclos de vida” debido a que desde un principio es necesario visualizar que los materiales se encuentran en constante evolución y competencia, ya sea por modificaciones en el proceso de obtención, la sustitución completa o parcial de materiales, o en materiales compuestos a fin de obtener una o varias funciones y características específicas.

La comparación que se lleva a cabo entre los ciclos de vida de los procesos y productos, más que entre los productos o procesos individuales. Recordando que el enfoque que se

tiene en la metodología corresponde al conocido como *de la cuna a la tumba*, cualquier otro enfoque limita los objetivos y alcances de la metodología.

La Figura 3.3.1 presenta de forma esquemática la comparación en el tiempo de los ciclo de vida de los materiales y procesos. Esta comparación se lleva a cabo en el tiempo lo que establece su carácter “dinámico” a fin de evitar la situación mencionada por Ackoff en 2003 “...muchas de las soluciones son para problemas que ya no existen, o por lo menos ya no existen ahora de la forma en que fueron planteados. Como resultados de esto, cada vez uno se va quedando más y más rezagado”, es decir, estas comparaciones en el tiempo son bajo la óptica de “cambiar la foto por la película”.

Para realizar esta etapa de la metodología se requiere el análisis de los ciclos de vida de los materiales y procesos involucrados en el estudio, incluyendo el proceso de obtención de materias primas, la manufactura de los materiales, reciclaje físico y/o químico, si es el caso, y su disposición; la influencia de los materiales en la economía, el costo beneficio y la evaluación económica y ambiental. Con este análisis se busca establecer si la simulación del sistema es *factible*, es decir, que el modelo sea lo más completo posible, dentro de los alcances establecidos para cada análisis.

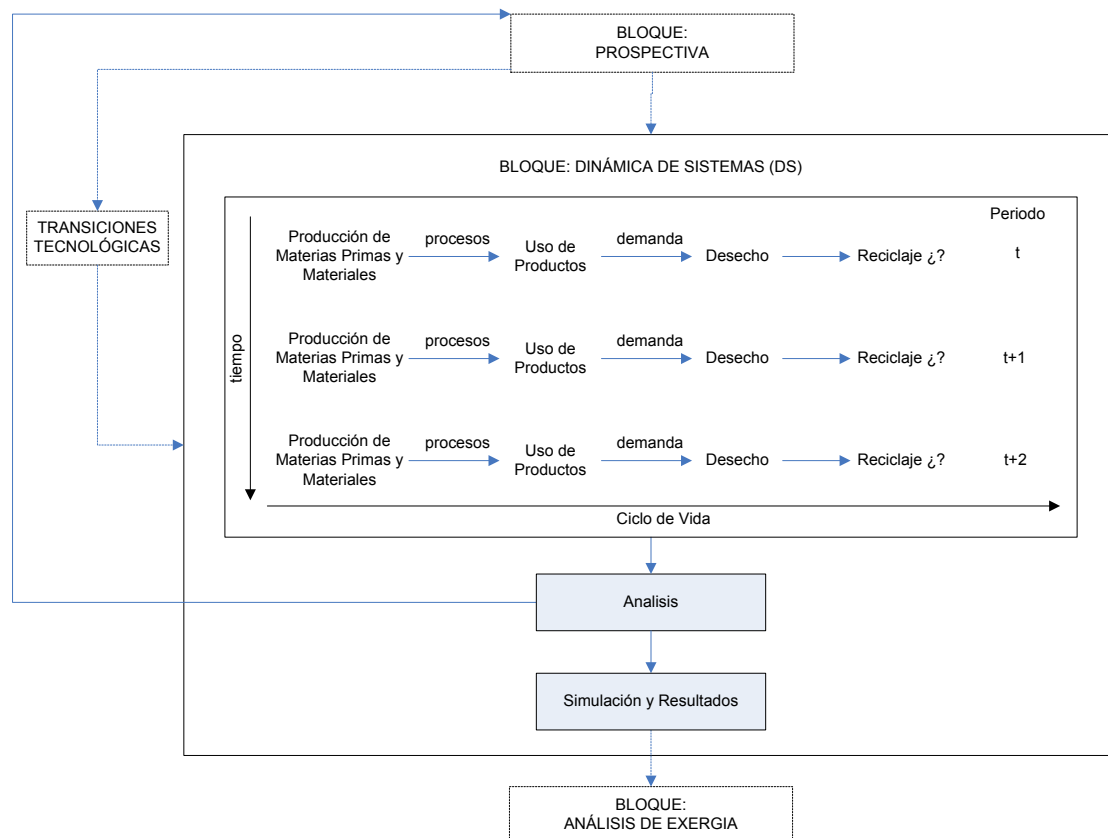


Figura 3.3.1. Dinámica de Sistemas (DS).

Este bloque por si mismo involucra el análisis exhaustivo del modelo y las variables involucradas, lo que implica la constante evaluación, validación y modificación de los modelos de dinámicos generados, y de acuerdo a esto, la posibilidad de retroceder a revisar lo obtenido en el bloque anterior al detectar posibles influencias entre variables que no se hayan detectado previamente, para esto la validación del modelo cobra importancia fundamental ya que esta etapa, dentro del enfoque de la dinámica de

sistemas, es la que nos confirma si el modelo representa de forma adecuada la realidad, con base a la información histórica disponible.

En forma breve, en esta etapa de la metodología se realiza la simulación del sistema representado por el diagrama causal generado en la etapa anterior, su parametrización, validación, evaluación y ajuste mediante el análisis de sensibilidad.

Este enfoque es el utilizado en la presente tesis.

Terminando los ajustes se procede a evaluar y analizar los balances de exergía de los procesos en el siguiente bloque.

3.4 Análisis de Exergía.

En esta etapa de la metodología, se llevará a cabo el análisis de exergía de los diferentes productos y procesos considerados, lo que permitirá tener una medida de la sustentabilidad de cada material y proceso. Este análisis se encuentra representado en la Figura 3.4.1.

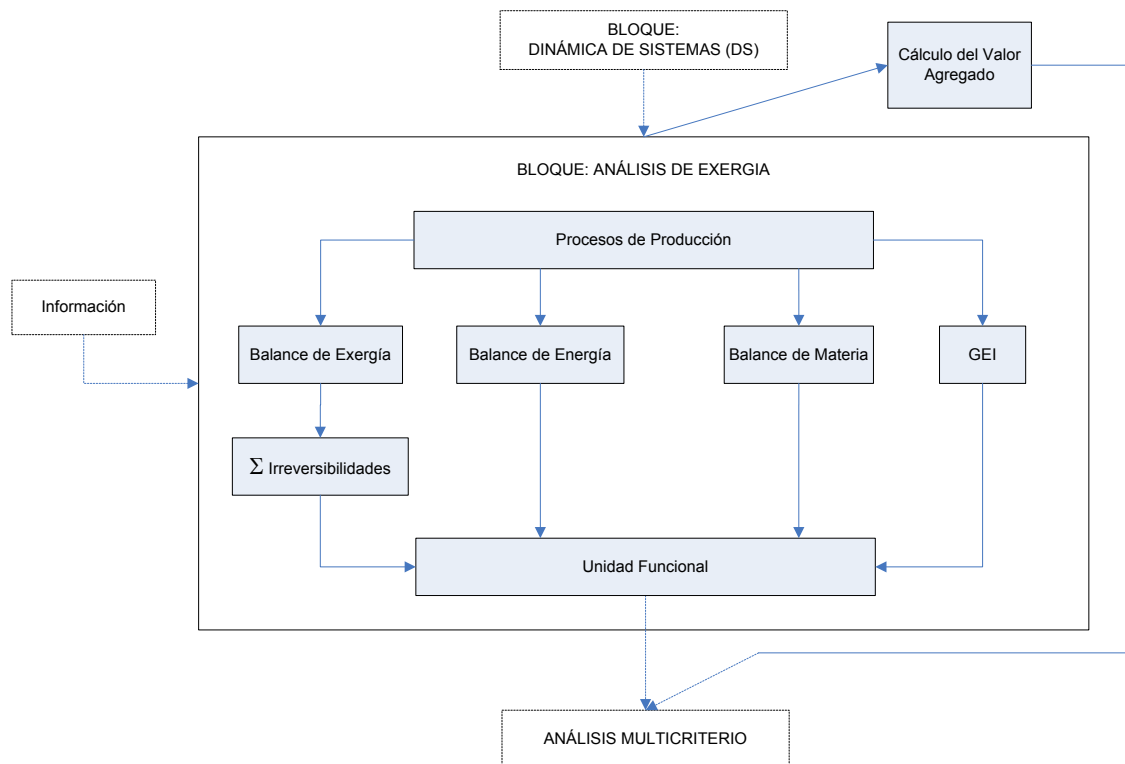


Figura 3.4.1. Análisis de Exergía.

Partiendo de los procesos de producción los resultados de la dinámica de sistemas e información termodinámica adicional, se establecerán los balances de materia, energía, exergía y la cuantificación de las diversas emisiones de los procesos (p.e.gases de efecto invernadero, GEI).

En esta etapa del proceso el balance de exergía será de crucial importancia ya que este balance permite establecer las irreversibilidades de los ciclos de vida considerados.

A la par de los balances antes mencionados y la cuantificación de las irreversibilidades, se realizará el cálculo del valor agregado a los productos. Los resultados obtenidos,

traducidos o no a términos de una unidad funcional permiten la cuantificación de diversos criterios que se aplican al análisis multicriterio y multiescenario en la siguiente etapa de la metodología, donde se jerarquiza y seleccionan las tecnologías y políticas involucradas en la generación de los escenarios.

Destaca en esta parte de la metodología la cuantificación de las irreversibilidades, las cuales permiten identificar zonas de oportunidad para la investigación y desarrollo de nuevas tecnologías en la búsqueda de un mejor aprovechamiento de la energía, lo cual nuevamente presenta una posible retroalimentación hacia la formulación de escenarios en el rubro de las transiciones tecnológicas.

3.5 Análisis Multicriterio y Multiescenario.

Esta es la etapa de la metodología en la que, mediante la aplicación de un análisis multicriterio a los materiales y escenarios (Figura 4.5.1), se aplican los criterios de evaluación cuantitativos y cualitativos, detectados y calculados en las etapas previas de la metodología, se utilizarán para establecer una jerarquización y ordenamiento de acuerdo a preferencias (maximización o minimización del criterio correspondiente) establecidas respecto a los productos y procesos, así como, de los escenarios generados.

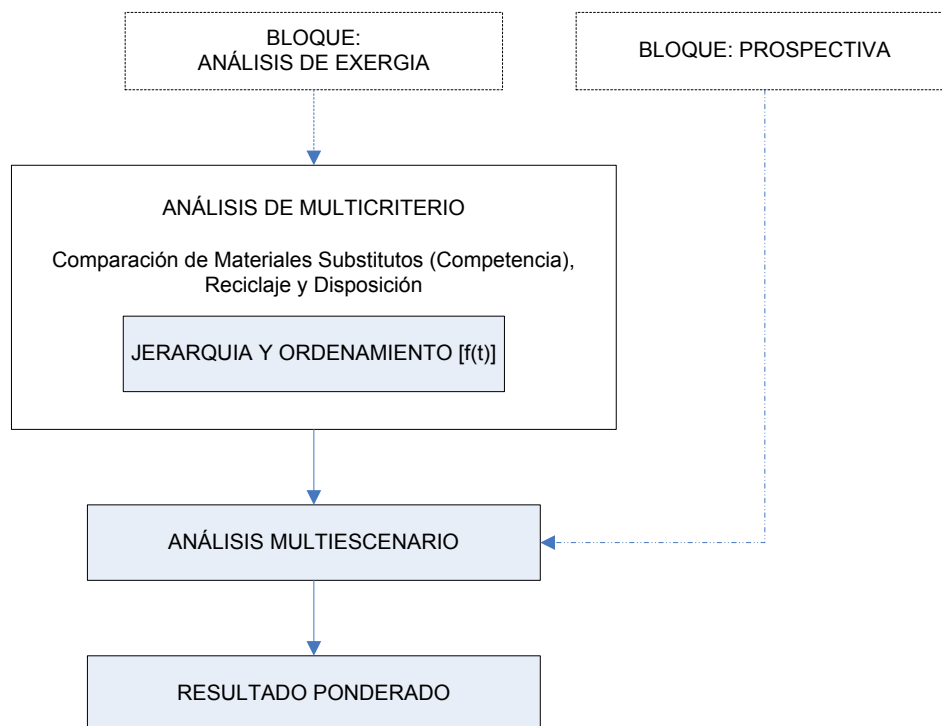


Figura 3.5.1. Análisis Multicriterio y Análisis Multiescenario

El análisis de los resultados de esta última etapa, tienen la posibilidad de retroalimentar a cualquiera de las etapas anteriores de la metodología, de acuerdo a la información obtenida, principalmente en la aparición de incongruencias. Esto implicarealizar nuevos lazos de retroalimentación en la metodología con las modificaciones correspondientes según sea el caso, a fin de poder establecer un resultado robusto de la ponderación de los escenarios.

Durante las diferentes etapas de la metodología será posible realizar análisis de sensibilidad con el enfoque del campo principal del conocimiento involucrado en la etapa correspondiente, con el fin de evitar la necesidad de realizar ciclos de iteración

que regresen a alguna etapa temprana de la metodología. Destacando entre todos estos “filtros” la validación del modelo de simulación en la etapa del bloque de dinámica de sistemas, donde, como ha sido mencionado anteriormente, se busca que el modelo represente adecuadamente la evolución del sistema en un periodo conocido del tiempo.

4. Definición de las variables clave para la generación del diagrama causal aplicable a la dinámica de sistemas.

En este capítulo se discute y definen las variables clave del problema enunciado en el Capítulo 1 para generar a través de ellas el diagrama causal que se aplicará a la dinámica de sistemas. Para ello fue necesario explicar y desarrollar el Método MIC MAC con el fin de obtener las matrices de influencias directas e indirectas de las variables sobre el objetivo del problema planteado.

4.1. Método de análisis estructural.

En el método MICMAC se establece la Matriz de Influencias Directas (MID), también conocida como Matriz de Análisis Estructural, en la cual se establece la influencia de cada variable con respecto a las otras, es decir, la relación que tienen, en una escala cualitativa de influencia, con la posibilidad de identificar las influencias potenciales, dicha escala corresponde a:

- 0: Sin influencia
- 1: Débil
- 2: Influencia moderada
- 3: Influencia fuerte
- P: Influencia potencial

El método de Análisis Estructural cuenta de tres fases:

- 1) Listado o inventario de variables, el cual debe considerar todas las variables (tanto internas como externas) que caractericen al sistema, evitando excluir a priori cualquier camino de investigación. Es esencial que las variables sean explicadas detalladamente para permitir la mejor percepción y comprensión de las relaciones entre las variables en la siguiente etapa;
- 2) Descripción de relaciones entre variables. En una visión sistémica, una variable no existe más que en una red de relaciones con otras variables, por lo que el análisis estructural permite la identificación de estas relaciones en una escala cualitativa, mediante una reflexión completa y sistemática, que permite no solo evitar errores sino también ordenar y clasificar ideas y redefinir las variables refinando así el análisis del sistema;
- 3) Identificación de las variables clave, primero mediante una clasificación directa, y posteriormente por una clasificación indirecta que identifica otras variables mediante la elevación a una potencia de la matriz de relaciones de variables generada en la etapa anterior.

Este proceso de generación de la matriz MID es cualitativo. Para cada par de variables se realiza el siguiente cuestionamiento: “¿Existe una relación de influencia directa entre la variable i y la variable j ?”. Dependiendo de la respuesta se asigna un valor a esa relación de acuerdo a la escala anterior. Esto da que para n variables, se deben realizar $n \times n - 1$ preguntas, de las cuales solo unas cuantas serán tratadas por falta de

tiempo. Este procedimiento sistemático de interrogación permite evitar errores, jerarquizar y clasificar ideas.

Una vez establecida la matriz MID se lleva a cabo las sumatorias renglón a renglón y columna a columna para determinar la influencia, $I (\Sigma_{RENGLONk})$ y dependencia, $D (\Sigma_{COLUMNAk})$ de cada variable k .

$$I_k = \sum_{i=1}^n m_{ki} \quad (k = 1, 2, \dots, n) \quad (4.1.1)$$

$$D_k = \sum_{i=1}^n m_{ik} \quad (k = 1, 2, \dots, n) \quad (4.1.2)$$

Los valores obtenidos de estas sumatorias para cada variable k proporcionan la jerarquización de influencia (σ_I^{MID}) o dependencia (σ_D^{MID}) dependiendo el enfoque deseado. Esta clasificación es un primer indicador de la importancia de cada variable dentro del sistema

Si se considera el valor de dependencia e influencia obtenido para cada variable, y la relación de este con el valor mayor de dependencia e influencia obtenido respectivamente, se generan pares coordenados (*dependencia*: $0 \leq d_k \leq 1$, *influencia*: $0 \leq i_k \leq 1$) con los cuales se pueden identificar la ubicación de cada variable en el plano de influencia-dependencia.

$$d_k = \frac{D_k}{\max(D_j)_{j=1,2,\dots,n}} \quad (4.1.3)$$

$$i_k = \frac{I_k}{\max(I_j)_{j=1,2,\dots,n}} \quad (4.1.4)$$

Al graficar la coordenada obtenida por el cálculo de influencia y dependencia para cada variable y localizar el punto correspondiente, se clasifica la variable de acuerdo a su posición en la plano.

Al aplicar esta metodología a un sistema específico, se clasifican las variables de acuerdo a la descripción anterior (con el apoyo de la relación de influencia-dependencia), identificándose las variables clave correspondientes, para generar a partir de los gráficos de influencias, el diagrama causal para la simulación y análisis del sistema bajo el enfoque de dinámica de sistemas.

De la información obtenida del plano de influencia-dependencia directa, es posible concluir que este tratamiento cualitativo de las variables, permite confirmar la importancia de ciertas variables, pero también identificar aquellas variables que presentan un papel importante en el sistema y no habían sido detectadas previamente

Mediante el uso del software MICMAC© V 6.1.2 es posible visualizar la vinculación de las influencias directas mediante un gráfico de red.

El gráfico de influencias directas será de gran utilidad al avanzar a la etapa de dinámica de sistemas en la metodología que se describió anteriormente, ya que permite la identificación de los ciclos entre las variables, mostrando la estructura compleja del sistema representado y cuyo resultado permite observar la naturaleza dinámica del sistema. En efecto, de acuerdo a D. Quintero y López S. (2010), “...describen la transición a un diagrama causal a partir del gráfico de influencias directas que represente completamente la dinámica del sistema, dado que permite conocer de antemano las relaciones más importantes del sistema por lo que facilita el entendimiento del mismo y una más ágil construcción del diagrama causal asociado a dicho sistema”.

Como la clasificación obtenida por la influencia y dependencia obtenidas a partir de MID esta perturbada por las relaciones de influencia y de dependencia recíprocas, es decir, la influencia de la variable i sobre j e inversamente, la influencia de la variable j sobre la variable i , se busca eliminar estos efectos por medio de la elevación a una potencia superior (δ) de la MID hasta que la clasificación obtenida sea estable, lo que genera la Matriz de Influencias Indirectas (MII).

$$MII = MID^{\delta_m}; \quad \delta_m \begin{cases} (\sigma_I^{MII})_m = (\sigma_I^{MII})_{m-1} \\ (\sigma_D^{MII})_m = (\sigma_D^{MII})_{m-1} \end{cases} \quad (4.1.5)$$

Los valores obtenidos de las sumatorias de influencia y dependencia en la matriz de influencias indirectas para cada variable k , proporcionan la jerarquización de influencia indirecta, (σ_I^{MII}) o dependencia (σ_D^{MII}) . La determinación del valor de δ se realiza mediante un proceso iterativo (Villacorta et al. 2012) hasta que la jerarquización de influencia y dependencia es constante, de acuerdo con Godet (1973), usualmente un valor de δ de 7 u 8 garantiza la convergencia en la jerarquización.

El tratamiento que se realiza a la MID se repite, en este caso para la matriz de influencias indirectas (MII), para obtener la representación en un plano de influencia-dependencia indirecta, al obtener los pares coordenados $(0 \leq d_k^{MII} \leq 1, 0 \leq i_k^{MII} \leq 1)$.

$$d_k^{MII} = \frac{D_k^{MII}}{\max(D_j^{MII})_{j=1, 2, \dots, n}} \quad (4.1.6)$$

$$i_k^{MII} = \frac{I_k^{MII}}{\max(I_j^{MII})_{j=1, 2, \dots, n}} \quad (4.1.7)$$

Las clasificaciones obtenidas por la evaluación de la influencia o dependencia en las matrices MID y MII pueden compararse a fin de observar el cambio en la jerarquía de influencia o dependencia de las variables, al pasar de la MID a MII por la eliminación de las influencias recíprocas entre las variables.

4.2. Diagrama causal.

Para iniciar la etapa de la Dinámica de Sistemas, se utilizó el principio de los diagramas causales, que a su vez son el resultado de Matriz de Influencias Directas (MID) y de Influencias Indirectas (MII).

En la Tabla 4.2.1 se presenta la definición de las variables inicialmente propuestas para evaluar el modelo; la Tabla 4.2.2 muestra la matriz de influencias directas (MID) evaluada para las variables antes descritas;

Nº	Etiqueta	Abreviatura	Descripción
1	Obtención materiales vírgenes	Obt_MVirg	Flujo de obtención de Tereftalato de polietileno virgen.
2	Materiales vírgenes	MVirg	Cantidad de Tereftalato de polietileno virgen en almacén (stock)
3	Manufactura con materiales vírgenes	MVirg_manu	Flujo de material virgen para la obtención de botellas
4	Recolección de material	Recolecc	Ritmo de recolección PET para reciclaje
5	Almacén de reciclaje	Stck_Recic	PET disponible en almacén para ser reciclado
6	Salida de material recuperado	Sal_proc	Flujo de material para reciclaje
7	Retraso en el beneficio	Ret_bene	Tiempo de que tarda en observarse el beneficio de la recuperación de material. Incluye el retorno de la inversión en tecnologías de reciclaje y reconocimiento sociales y gubernamentales.
8	Material Reciclado	Mat_Recic	Material reciclado listo para reincorporarse a la cadena de producción
9	Manufactura con material reciclado	Manu_recic	Flujo de material reciclado para la obtención de botellas
10	Otros usos	Otros usos	Flujo de material reciclado para usos diferentes al de botellas
11	Uso	Uso	Tiempo unitario de consumo y uso de las botellas de PET
12	Material de Importación	Mat_Import	Flujo del material de importación.
13	Transporte	Transporte	Transporte de los materiales
14	Demanda	Demanda	Demanda supuesta del material
15	Vida media	Vida_media	Tiempo de vida media del material (PET).
16	Materiales en la economía	Mat_eco	PET disponible para su recuperación
17	Deposición	Depo	Flujo de deposición de material a rellenos sanitarios
18	Eficiencia de recolección	Ef_reco	Eficiencia de recolección de PET para reciclaje
19	Material recolectado	Mat reco	PET recolectado para reciclaje
20	Tiempo de recolección	T_recol	Tiempo de recolección del material para reciclaje
21	Ritmo actual de reciclaje	A_reci_rtm	Ritmo de reciclaje actual del material
22	Ritmo de reciclaje objetivo	O_reci_rtm	Objetivo de reciclaje del material
23	Tiempo de manufactura	T_manu	Tiempo de manufactura de botellas
24	Inventario de manufactura	Inv_manu	Inventario total de las botellas que corresponden al consumo total del periodo
25	Tiempo de transporte	T_transp	Tiempo de transporte de manufacturas
26	Requerimiento mínimo de material	Reqmin_Mat	Material mínimo requerido para los procesos de manufactura
27	Diferencia en materiales	Dif_Mat	Proporción de uso entre el PET virgen y el reciclado para la producción de botellas

Tabla 4.2.1. Definición de variables (Elaboración propia).

	1: Obt_MVirg	2: MVirg	3: MVirg_manu	4: Recolecc	5: Stck_Recic	6: Sal_proc	7: Ret_bene	8: Mat_Recic	9: Manu_recic	10: Otros usos	11: Uso	12: Mat_Import	13: Transporte	14: Demanda	15: Vida_media	16: Mat_eco	17: Depo	18: Ef_reco	19: Mat_reco	20: T_recol	21: A_reci_rtm	22: O_reci_rtm	23: T_manu	24: Inv_manu	25: T_transp	26: Reqmin_Mat	27: Dif_Mat	
1: Obt_MVirg	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	
2: MVirg	2	0	3	0	0	0	0	0	0	1	3	3	0	3	1	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0
3: MVirg_manu	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4	3	0	0	0	1	0	3	0	0	0	3	0	0	3	0	0	0	
4: Recolecc	4	0	0	0	3	2	0	0	0	3	0	1	0	0	0	0	2	0	0	0	2	1	0	0	0	0	0	
5: Stck_Recic	0	0	0	0	0	3	0	2	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	
6: Sal_proc	0	0	0	0	0	0	0	3	0	1	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
7: Ret_bene	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
8: Mat_Recic	0	0	3	0	0	0	0	0	3	3	2	2	0	1	1	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
9: Manu_recic	0	0	3	0	0	0	0	0	0	3	3	0	0	0	2	0	0	0	0	0	3	0	0	3	0	0	0	
10: Otros usos	1	0	0	2	1	1	0	0	0	0	0	1	0	1	2	0	2	0	0	0	0	0	0	1	0	1	0	
11: Uso	1	0	0	0	0	1	0	0	2	3	0	0	0	2	3	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
12: Mat_Import	2	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	3	2	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
13: Transporte	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3	0	
14: Demanda	2	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	3	0	0	0	0	0	1	2	0	0	2	0	
15: Vida_media	0	0	0	1	0	0	0	0	0	3	3	0	0	1	0	0	3	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	
16: Mat_eco	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	
17: Depo	2	0	0	2	0	0	0	0	0	2	1	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
18: Ef_reco	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	
19: Mat_reco	1	0	0	3	3	3	0	2	0	2	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
20: T_recol	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	
21: A_reci_rtm	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
22: O_reci_rtm	0	0	3	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
23: T_manu	0	0	3	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
24: Inv_manu	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3	
25: T_transp	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
26: Reqmin_Mat	0	0	2	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3	
27: Dif_Mat	0	0	3	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	

Tabla 4.2.2. Matriz de Influencias Directas, MID (Elaboración propia).

La técnica descrita en la sección anterior se aplica a las tablas anteriormente presentadas mediante el uso del software MICMAC© V. 6.1.2-2003/2004, mediante el cual se pudieron construir los gráficos que se encuentran agrupados en la Figura 4.2.1. La Figura 4.2.1.A del lado izquierdo, representa en el plano Influencia-Dependencia, que ayuda a entender el gráfico influencias directas, Figura 4.2.1.B. Por ejemplo, la variable “otros usos” es una variable extremadamente dependiente en el plano y tiene una cierta influencia sobre otras variables menos dependientes como “material reciclado”. Esta falta de coherencia se elimina con la MII.

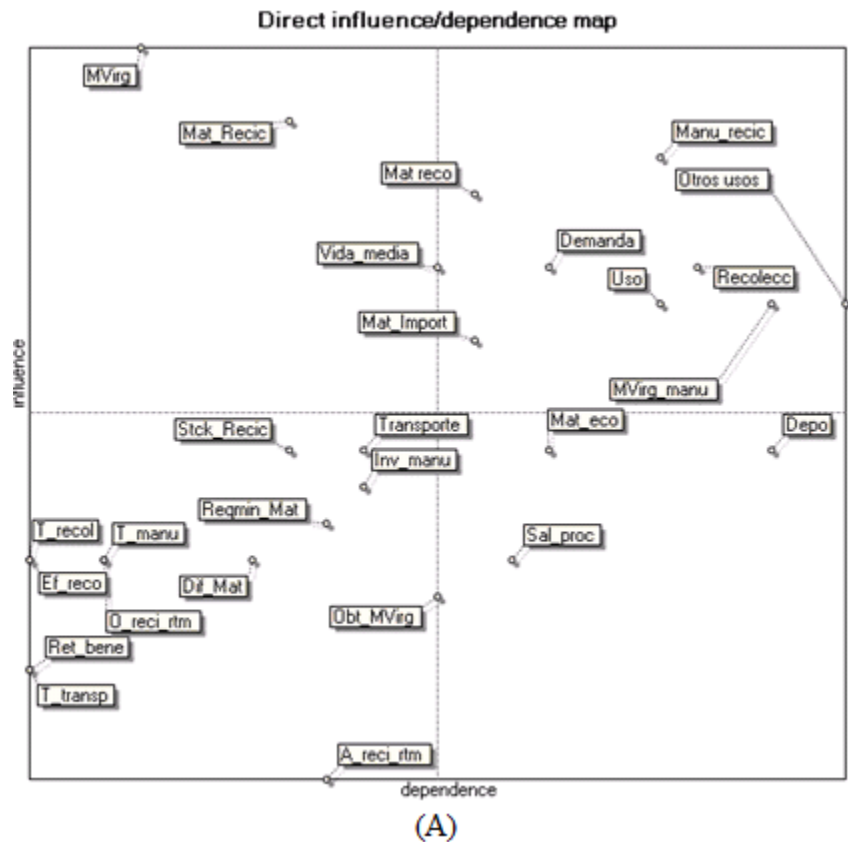
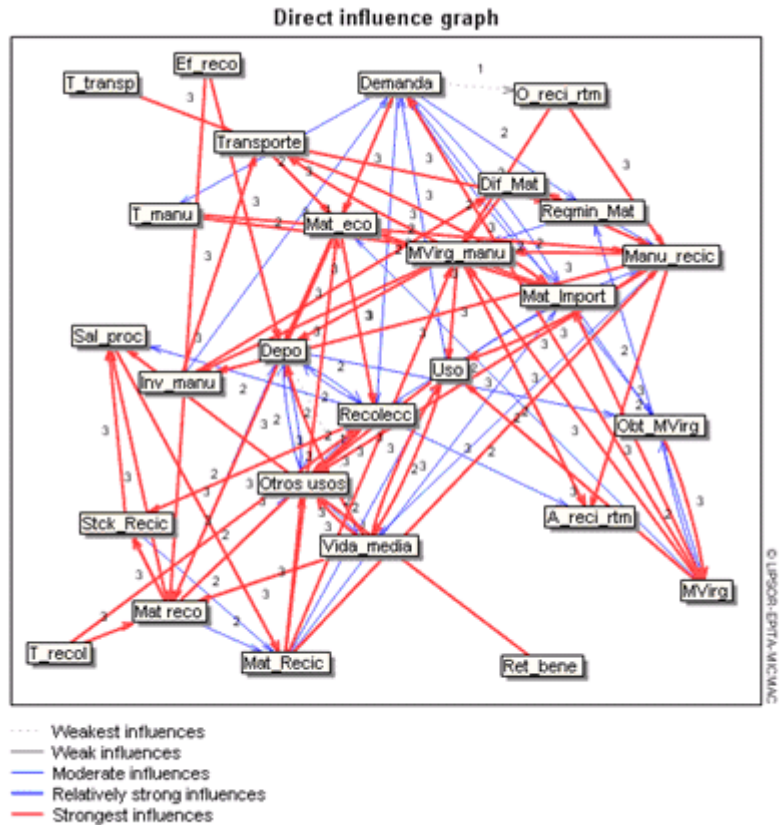


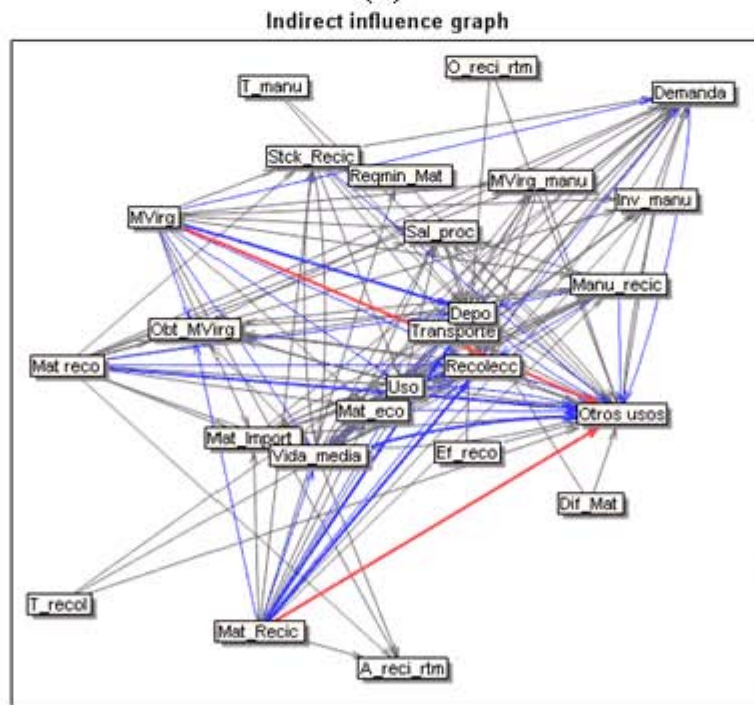
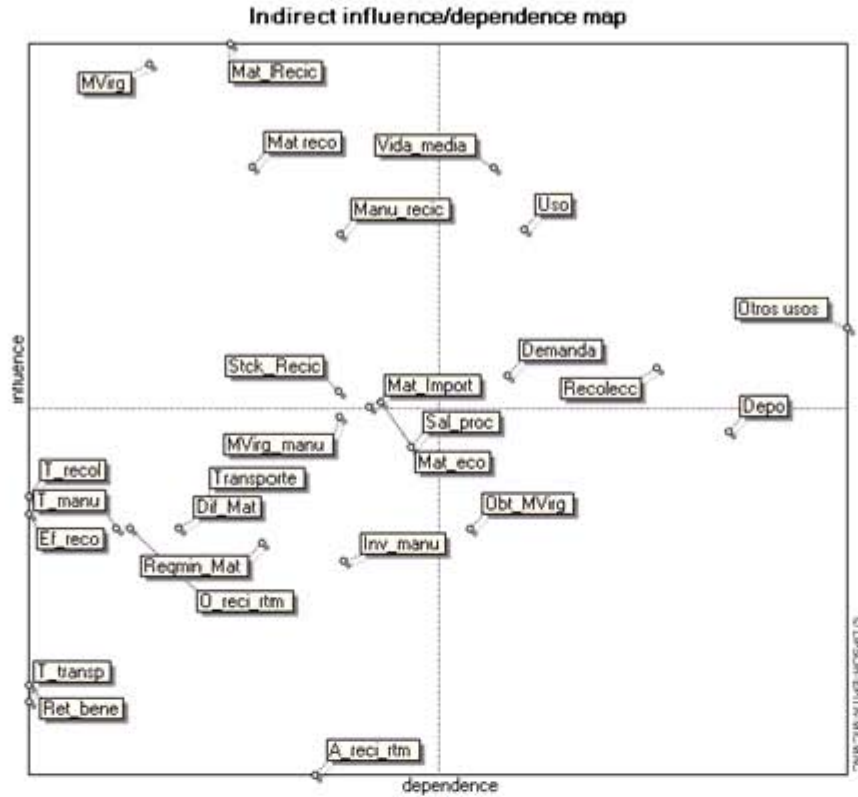
Figura 4.2.1.Gráfico y Diagrama de Influencias Directas(Elaboración propia a través del software MICMAC© V.6.1.2).



(B)

Figura 4.2.1.Gráfico y Diagrama de Influencias Directas.(Elaboración propia a través del software MICMAC© V.6.1.2). Continuación.

También se puede apreciar que el análisis de influencias directas establece que las variables de mayor influencia sobre el sistema corresponden a las cantidades de materiales nuevos o reciclados disponibles (stock). Sin embargo aplicando por su parte la MII, la variable sobre la que tendrán mayor impacto es la conocida como „Otros usos“, la que representa una salida neta del sistema en estudio como se puede apreciar después de haber obtenido la matriz de influencias indirectas (MII), como se aprecia en el gráfico y el plano de influencias indirectas, Figura 4.2.2.A y B, respectivamente.



- Weakest influences
- Weak influences
- Moderate influences
- Relatively strong influences
- Strongest influences

(B)

Figura 4.2.2. Gráfico y Diagrama de influencias indirectas (Elaboración propia a través del software MICMAC© V.6.1.2).

4.3. Generación de diagrama causal y de los ciclos entre variables.

Utilizando la metodología para generar el diagrama causal descrito en 4.1, donde establece el uso del diagrama de influencias directas e indirectas para el planteamiento del diagrama causal de dinámica de sistemas.

La complejidad de los diagramas de influencias resulta muy grande debido al número de variables involucradas y las relaciones entre éstas, a lo cual, para simplificar el diagrama causal obtenido, se involucran principalmente las relaciones de influencia más importantes y la aplicación de los criterios de clasificación sobre las variables de acuerdo a los resultados de los gráficos de influencias a su clasificación a el planteamiento del diagrama causal.

La transición del gráfico de influencias directas al diagrama causal, permite identificar de manera gradual los ciclos entre las variables, con los cuales se visualiza la complejidad de la estructura del diagrama causal y observar la naturaleza dinámica del sistema.

A partir del diagrama de diagrama de influencias directas obtenido del análisis MICMAC se identifican diversos ciclos entre las variables, de los cuales los tres principales se presentan en la Figura 4.3.1.

Con la observación de los diagramas de influencias directas e indirectas y del diagrama causal, se pueden localizar diferentes ciclos. En la Figura 4.3.1.A-C, se encuentran los tres ciclos principales detectados en el diagrama de influencias directas.

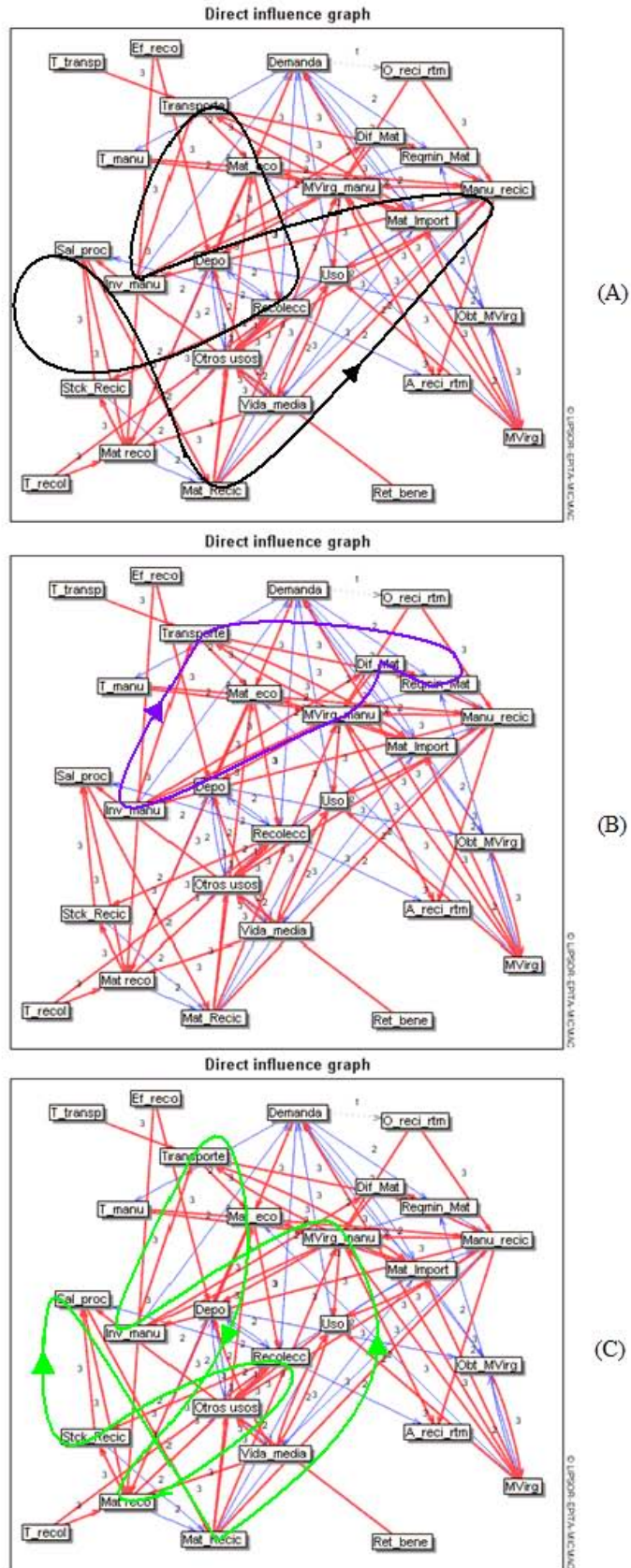


Figura 4.3.1. Ciclos principales detectados en el diagrama de influencias directas (Elaboración propia).

Teniendo como base los ciclos anteriormente mostrados, se procede a desarrollar el diagrama causal del sistema, mismo que se empleara en la simulación en el bloque de dinámica de sistemas. En la Figura 4.3.2, se presenta el diagrama causal obtenido, en el cual ya se definen las variables como parámetros, flujos o niveles de acuerdo a la simbología y el ambiente gráfico, es decir la representación en pantalla, del software Vensim©; también se muestran los ciclos identificados y mencionados anteriormente.

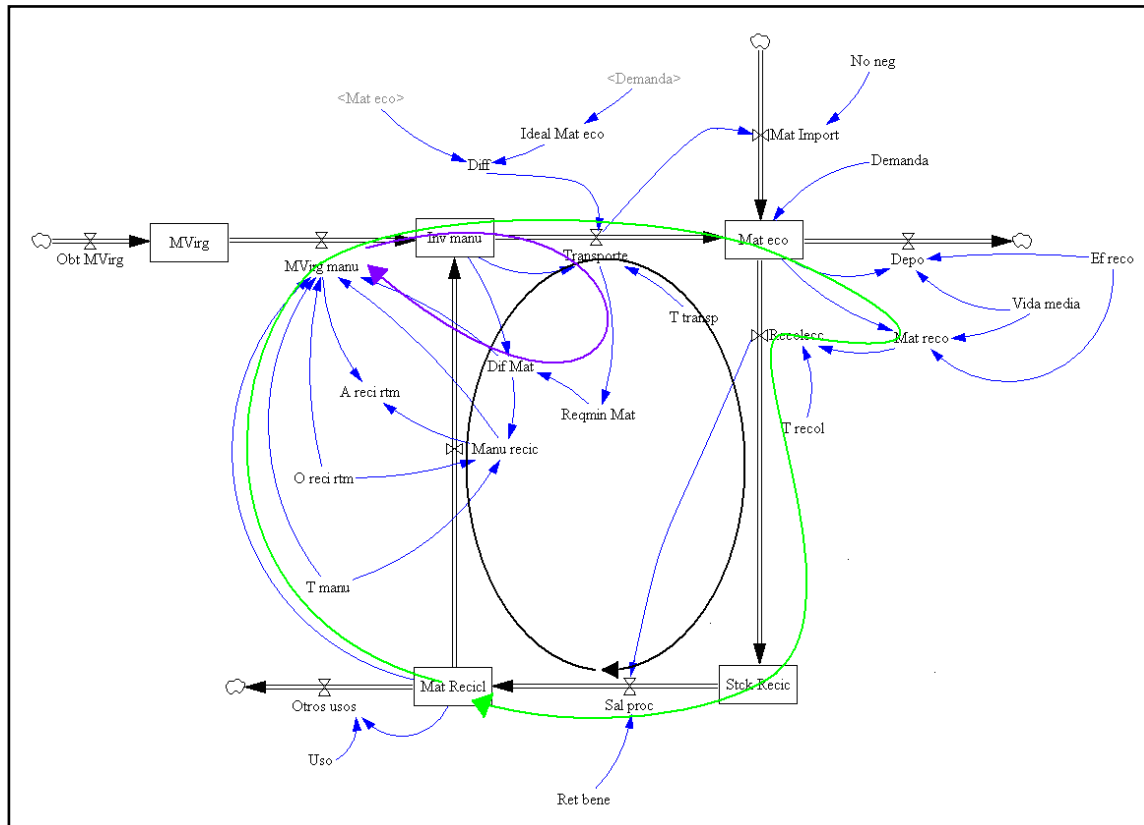


Figura 4.3.2. Diagrama causal y ciclos identificados vía diagrama de influencias directas (Elaboración propia).

El diagrama es consistente con la información obtenida en el análisis de la matriz de influencias indirectas donde, como ya se mencionó, las variables con el mayor impacto sobre el sistema son „Materiales vírgenes“ y „Materiales reciclados“, dicho impacto repercute principalmente sobre las variables „Otros usos“ y „Deposición“, que son las salidas principales del sistema.

El planteamiento de este sistema busca permitir la evaluación de las variables de entrada y los parámetros en las unidades convenientes para el material (PET) en estudio para lo cual será necesario la alimentación al modelo en el software. El módulo de evaluación de las variables de entrada se espera sea afectado por las variables „Demanda“ y los ritmos de reciclaje „actual“ y „objetivo“ principalmente.

Generalizando, la situación actual del modelo corresponde a la etapa de construcción del módulo de evaluación de variables de entrada para los materiales a comparar y el desarrollo del modelo matemático formal y su validación.

Es importante aclarar que de la metodología mostrada en el capítulo 3, acotamos el objetivo de la investigación por ser demasiado extenso y pretencioso por la cantidad de información necesaria y disponible para poder desarrollarlo satisfactoriamente. En este sentido también se encuentra la recomendación que nos hizo el H. Jurado del examen de candidatura.

En cambio, haber delimitado el estudio a las variables producción y almacenamiento de materiales vírgenes de procedencia de fuentes renovables y no renovables y de la posibilidad de reciclamiento de ambas fuentes para satisfacer la producción total de botellas de PET y con ella la demanda esperada, con la posibilidad de utilizar parte de este reciclamiento para otros usos, fue mucho más rico en profundidad gracias a la técnica de la Dinámica de Sistemas, comparada con la de haber realizado los diferentes pasos anunciados en la metodología del capítulo 3, que hubiera sido muy superficial y ambigua.

5. Resultados del caso base utilizando VENSIM® y análisis de sensibilidad.

El diagrama de influencias es esencial para entender las relaciones entre los diferentes elementos del sistema, con el fin de diseñar y controlar las transiciones tecnológicas para un futuro deseable (Ackoff, 1981). El modelo formal de DS se deriva de la representación en el diagrama de influencias. Cuando el modelo se ha establecido, diferentes estrategias se pueden simular, las cuales deben ser evaluadas bajo diversas premisas.

La dinámica de sistemas provee conceptos y herramientas designadas al estudio de los efectos de la acumulación y retroalimentación en sistemas complejos. Estos efectos pueden ocasionar que un sistema complejo se comporte de forma muy diferente de la esperada en la base de un modelo mental lineal o estático (Ashford, 2001; Forrester, 1994). Así, el enfoque de dinámica de sistemas puede estimar el impacto ambiental de un sistema productivo con mayor exactitud que un enfoque donde se asumen parámetros de cálculo fijos. En consecuencia, su uso en estudios de análisis de ciclo de vida (ACV), permite estimar los futuros impactos medioambientales por los cambios en productos (Sandén & Karlström, 2007), la aceptación y éxito debido a estos cambios e identificar las fuentes de incertidumbre a fin de poder buscar una solución más robusta. Esto es porque el ACV tradicional, aún con el enfoque “de la cuna a la tumba”, solo da información estática de los impactos medioambientales de los procesos o actividades, ignorando totalmente los cambios subsecuentes por la retroalimentación de las variables.

La integración de DS al análisis de ciclo de vida, proporciona las características temporales y de retroalimentación que se omiten en el marco de referencia del ACV, donde el tiempo y la evolución del sistema no se toman en cuenta lo que lleva a lo dicho por Ackoff (op. cit.) “...muchas de las soluciones son para problemas que ya no existen, o por lo menos ya no existen ahora de la forma en que fueron planteados...”. El enfoque de DS ayuda a proveer un estimado más completo, sin embargo, siempre está limitado por las simplificaciones y suposiciones del modelo, así como, del conocimiento y comprensión del sistema en la realidad por parte del desarrollador del modelo, así como de las herramientas disponibles para la solución del modelo. Para el presente trabajo se utilizará el programa de simulación Vensim® Professional V. 5.11A de Ventana Systems, Inc., el cual se describe a continuación.

5.1 VENSIM®

Vensim®, es el Ambiente de Simulación de Ventana Systems, Inc., consiste en una herramienta de trabajo integral para conceptualizar, documentar, simular, analizar y optimizar modelos de dinámica de sistemas. Mediante el uso de conexiones de palabras con flechas, las relaciones entre variables del sistema se ingresan y se registran mediante su representación en diagramas causales o diagramas de flujo, como conexiones causales, información que, mediante el Editor de Ecuaciones, completa el modelo de simulación. Permite el análisis del modelo siguiendo el proceso de construcción, observando las causas, usos y lazos relacionados a las variables, lo que permite explorar el comportamiento del modelo.

Vensim® usa una interfase intuitiva tipo “Banco de Trabajo-Caja de Herramientas”, diseñada para permitir la simulación y análisis de los modelos construidos, mediante la combinación de la simplicidad de modelos visuales y el acceso fácil a herramientas de simulación y análisis. Al enfocarse en una o varias variables en particular dentro del modelo, se permite la identificación de la relación entre éstas y los lazos de retroalimentación, así como la visualización de los resultados de la simulación.

Vensim® se encuentra disponible en diversas configuraciones que se ajustan a las diferentes necesidades de simulación por parte del usuario:

- Vensim® PLE (Personal Learning Edition).-Versión del software que ayuda a iniciarse en la construcción de modelos de dinámica de sistemas y de pensamiento sistémico.
- Vensim® Professional.- Los complementos de Vensim® Professional a la configuración estándar de Vensim®, facilitan el desarrollo, calibración y optimización de modelos para la solución de problemas complejos.
- Vensim® DSS.- Incorpora la capacidad de generar “Ambientes de aprendizaje” de los modelos, mediante menús personalizados apropiados a la audiencia objetivo. También permite la vinculación con otros programas mediante la generación de archivos .dll con Vensim® DLL, permitiendo así a otros programas aprovechar las características del programa aplicadas al modelo de la subrutina o macro generada en el archivo .dll.

El trabajo de simulación y validación de DS de los sistemas desarrollados en el presente proyecto, se realizaron con Vensim® Professional.

Este software cuenta con diferentes funciones preestablecidas, entre las que se encuentran: patrones de prueba de entradas, operadores lógicos, generadores de números aleatorios, funciones de pronóstico y suavizado, retrasos continuos y discretos, y funciones científicas. Adicionalmente a estas funciones, permite definir relaciones funcionales a partir de tablas (Lookup tables), gráficos, arreglos y macros. También permite el uso de series de datos externos como entradas exógenas para controlar el modelo o comparar la información obtenida de las corridas, por medio del editor de textos, o la importación (o exportación) a bases de datos u hojas de cálculo.

Se entiende por *simulación*, al proceso de tomar un sistema de ecuaciones y usarlo para generar y poder analizar diversos comportamientos; Vensim® provee un mecanismo simple para introducir y almacenar cambios en las suposiciones a fin de permitir la comparación de las diferentes corridas de simulación.

Por su parte, el método de “rastreo de causas” que es una herramienta de Vensim® a través de la selección de la variable por el analista, permite determinar de forma rápida el origen del comportamiento que presenta el sistema en la simulación, dando lugar al análisis de la estructura mediante el uso una representación gráfica conocida como “árbol de causas”. Por otra parte, el comportamiento del modelo se rastrea mediante “tiras” de gráficos de las variables de entrada (tira de causas, *causal inputs*) a la variable seleccionada para análisis,

hasta localizar la variable causante del comportamiento manifestado. Estas herramientas permiten la exploración y posterior corrección de errores de forma exhaustiva en modelos complejos.

El software permite diferentes modos de simulación adicionales a la simulación estándar que resuelve el modelo del sistema en el intervalo de tiempo y condiciones establecidas inicialmente para el problema en cuestión.

Los diferentes modos de simulación disponibles permiten la visualización y análisis del sistema en tiempo real o en interacción con el modelo durante la simulación, situaciones que se abordan en esta investigación

En Vensim® el modo de simulación SyntheSim® permite usar la simulación para sintetizar la estructura y la conducta de un modelo. Se presentan a menudo los eventos, las conductas y la estructura como una jerarquía de diferentes maneras de observar el mundo, con eventos que surgen de los patrones de conducta subyacentes y el comportamiento debido a la estructura. Los modelos de simulación representan la estructura que, a través de la simulación, genera el comportamiento del sistema. La conexión entre la estructura y el comportamiento es de tal manera sensible, que puede ser difícil conseguir una comprensión de la estructura y las causas del comportamiento. Con SyntheSim® se dispone de una herramienta, con la cual se efectúan cambios, superponiendo el comportamiento en la estructura y actualizando los resultados de la simulación en tiempo real obteniendo una mejor comprensión del modelo y permitiendo así, el proceso de cambio, cálculo y revisión del modelo.

Otro modo de simulación presente en Vensim® es el modo de simulación interactiva (Gaming), el cual permite visualizar paso a paso, en intervalos discretos para realizar cambios en el modelo en cada intervalo de tiempo. Cada modificación realizada en una corrida en modo de simulación interactiva, se registra y está disponible para su posterior análisis y comparación con una simulación estándar. Este modo de simulación permite visualizar el impacto de la modificación de alguna variable sobre el sistema, a través de la interacción con éste, a fin de acelerar o retrasar el cumplimiento de los objetivos previstos en la simulación.

En el desarrollo de un modelo se requiere conocer la sensibilidad del mismo a diferentes perturbaciones. Para ello, se requiere realizar las pruebas de sensibilidad correspondientes. Las pruebas de sensibilidad comprenden el cambio de las suposiciones sobre el valor de las entradas al modelo, llevar a cabo múltiples simulaciones, con el posterior análisis de la incertidumbre en las variables de salida seleccionadas. Este proceso es sencillo de realizar para un número limitado de simulaciones, sin embargo, es impráctico cuando se requiere probar varios parámetros simultáneamente. Las simulaciones Monte Carlo del software Vensim®, también conocidas como Simulaciones de Sensibilidad Multivariable (MVSS), automatizan las pruebas de sensibilidad.

Al realizar las pruebas de sensibilidad primero se obtiene la solución inicial (simulación base o de referencia) del modelo para observar su comportamiento con los valores normales de las constantes o parámetros involucrados, posteriormente se define la distribución en un

rango de los valores con los que el parámetro se evaluará. A estos se les asigna valores máximos y mínimos y la distribución de probabilidad que pueden presentar, esto para finalmente observar su impacto en el comportamiento del modelo.

Los resultados se presentan en gráficos con rangos de confianza, trayectorias de simulación individuales, o histogramas.

5.2 Caso Base.

Después de aplicar el proceso de identificación de variables clave y los ciclos de influencias directas, se ha generado el diagrama causal propio para la simulación del sistema con el enfoque de dinámica de sistemas. La evaluación del diagrama causal requirió la incorporación al modelo de variables adicionales, tanto de proceso, que permitieron la cuantificación de la contribución a la producción total de PET virgen a partir de recursos renovables y No renovables, como de variables auxiliares que facilitarán el acceso a la información en los lazos de retroalimentación. En la Tabla 5.2.1, se definen las variables adicionales a fin de representar con mayor precisión el sistema.

Abreviatura	Descripción
crecimiento anual	Evaluación de la función AGR
F1	Objetivo de producción total de PET virgen para el periodo en evaluación
ajuste a prod STD	Objetivo de producción corregido vía petroquímicos, o recursos No renovables, de PET virgen para el periodo en evaluación
ajuste a prod RENOV	Objetivo de producción corregido vía recursos renovables, de PET virgen para el periodo en evaluación
Prod STD	Producción de PET vía petroquímica
Prod x renov	Producción de PET vía recursos renovables
flujo prod STD	Flujo de producción de PET vía petroquímica
flujo prod renov	Flujo de producción de PET vía recursos renovables
PET total prod	Producción total de PET
O renov inic	Objetivo de participación de recursos renovables en la producción total de PET virgen
O renov rel	Objetivo de participación de recursos renovables en la producción total de PET virgen corregido
A renov rel	Participación de recursos renovables en la producción total de PET virgen
m1	Parámetro de corrección de la función RAMP aplicada en O renov rel
AUXILIAR	Relación de botellas producidas a partir de material reciclado
Auxiliar2	Igual a Inv manu
T asimilación de tecnología	Tiempo de asimilación y maduración de la tecnología de aprovechamiento de recursos renovables
T1	Tiempo unitario de ajuste al objetivo de producción vía petroquímicos
T1A	Tiempo unitario de ajuste al objetivo de producción vía recursos renovables
T2	Tiempo unitario de producción vía petroquímicos
TIMESTEP	Tamaño de paso del método de integración
Time	Tiempo continuo
Uso del producto	Flujo de botellas
T uso del producto	Tiempo unitario de uso de botellas
recic comprobado a botella	Evaluación de la función BUR
T Depo	Tiempo unitario de deposición de PET

Tabla 5.2.1. Variables incorporadas al modelo (Elaboración propia).

Por otra parte, el proceso de generación del modelo, requirió también la eliminación de algunas de las variables descritas en la Tabla 4.2.1, como “Mat_Import” y “Demanda” donde el flujo de PET proveniente del exterior, se encuentra considerado en los flujos totales de material virgen y reciclado, en el caso de “Mat Import”. En la segunda, “Demanda”, el modelo se construye sobre la base de que los flujos de botellas fabricados cubren el total del consumo proyectado en cada periodo de evaluación. Otras variables como “O_reci_rtm” y “Reqmin_Mat” se eliminaron debido a que solo aportaban mayor complejidad al modelo y no se encontró información suficiente para asignarles un valor numérico o algebraico.

Este proceso de incorporación y eliminación de variables deja claro la existencia de una gran cantidad de relaciones de influencia. Udo de Hæs (2004), como se expresó anteriormente, hace énfasis en que intentar tomar en cuenta todos los efectos dinámicos involucrados en el ciclo de vida, vuelve al modelado y la simulación, un trabajo muy complejo y demandante de información. Por lo anterior este autor recomienda el uso de una cantidad adecuada de variables clave.

Para el caso de estudio, el modelo describe las relaciones existentes entre tres líneas tecnológicas que contribuyen a la producción de Tereftalato de polietileno (PET) en su aplicación a botellas para el envasado de bebidas. Las líneas tecnológicas involucradas son: 1) producción de PET virgen vía recursos no renovables (gas y petróleo), 2) producción de PET virgen vía recursos renovables, y 3) reciclaje del PET de cualquier procedencia. El flujo másico anual de PET botella obtenido corresponde a la unidad funcional aplicable al presente estudio.

A través de la producción de PET de las dos primeras rutas tecnológicas, se introduce material al sistema. Por su parte la ruta tecnológica correspondiente al reciclaje, establece un ciclo interno en el modelo del sistema el cual se presenta desde el uso de la botella como envase para bebidas, la recuperación del envase después de ser descartado, el reciclaje en general y la reintegración de una parte a la producción de botellas para la aplicación inicial, este ciclo permite cuantificar el material que permanece dentro del sistema en la aplicación a botella. Por su parte, las salidas del sistema están representadas en el modelo por los flujos definidos como la deposición del material en vertederos y otros usos del material reciclado en aplicaciones de baja exigencia tecnológica y que no requieren dar mayor valor agregado al material recuperado por medio de algún proceso de polimerización en estado sólido (SSP) como lo descrito por Bhatt (2007).

En las Figuras 5.2.1, 5.2.2 y 5.2.3 se muestra la construcción del modelo desarrollado, presentando todas las variables involucradas, donde es posible seguir los ciclos de retroalimentación presentes en el modelo para el sistema PET botella planteado. El diagrama causal (stock-and-flow) se desarrolló con el software Vensim® Professional (V.5.11A)

En la Figura 5.2.1 se encuentran representadas las líneas tecnológicas correspondientes a la producción de PET virgen. La producción de PET virgen vía petroquímicos (o producción estándar), considera a los procesos de producción actualmente en uso como las descritas por Kriegel et al. (2009), Alegría (2011) y Al Munif et al. (2014).

Por su parte la producción vía recursos renovables considera los procesos actualmente en uso y los que se encuentran en desarrollo o prueba, como son los relacionados a las biorefinerías (De Jong et al., 2012; Sun et al., 2014), lo que implica que su aplicación tendrá un retraso en el tiempo para ser completamente operacionales, es decir presenta un tiempo de maduración y asimilación de la tecnología (Changsirivathanathamrong, 2007).

Los flujos de ambas líneas tecnológicas, petroquímica y recursos renovables, se modifican en el tiempo, por el crecimiento anual en el requerimiento del material para la producción de botellas, las existencias (stock) de manufacturas (botellas) y la proporción de los flujos de material virgen tanto vía petroquímica como vía recursos renovables. Esta proporción afecta a los flujos ya que se establece un objetivo del 10 % de la producción total de PET sea obtenida vía recursos renovables que se ha de cumplir entre los flujos de material virgen.

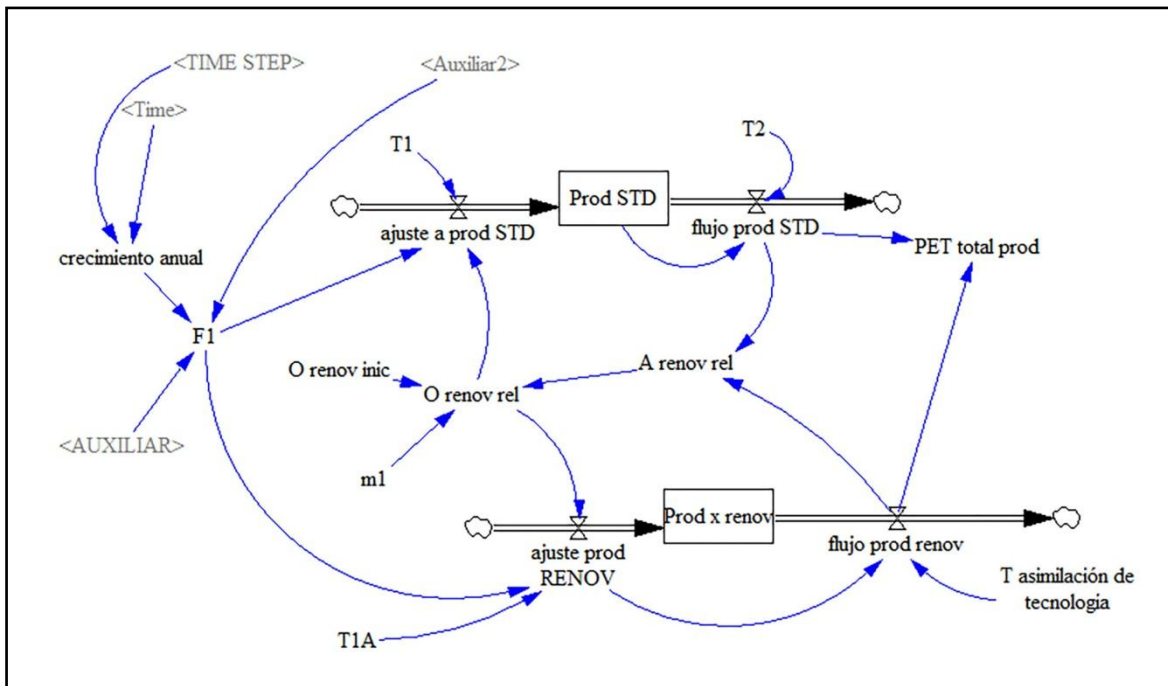


Figura 5.2.1. Modelo dinámico del ciclo de vida del PET botella. Líneas tecnológicas de producción de material virgen (Elaboración propia).

La Figura 5.2.2 muestra la obtención de envases a partir del material virgen y material recuperado y reciclado para la aplicación de envases. Ambos flujos contribuyen a las existencias totales de botellas manufacturadas que se usaran como envases de bebidas, estas existencias corresponden a las botellas consumidas en el periodo de evaluación, por lo que es a estas existencias, a las que se les aplica el crecimiento anual correspondiente al periodo de evaluación. La relación de los flujos de manufacturas a partir de material virgen y reciclado se monitorea para evitar una sobreproducción de material virgen, siendo esta sobreproducción la obtenida del reciclaje de éste.

En la Figura 5.2.2 se aprecia también la línea tecnológica correspondiente al reciclaje, la cual suministra material tanto para la aplicación de alto desempeño (botellas) como para

otros niveles de desempeño o uso, que hemos llamado “de bajo rendimiento tecnológico”. Esta línea tecnológica se alimenta de la recuperación que se realice de las botellas de PET, principalmente de vertederos de residuos sólidos, Figura 5.2.3.

Los problemas logísticos y de mano de obra para el acopio del material generan retrasos en la obtención del material reciclado para su procesamiento en aplicaciones de diferente nivel de desempeño; este retraso es considerado para el cálculo del flujo de material reciclado listo para la manufactura de diversos productos.

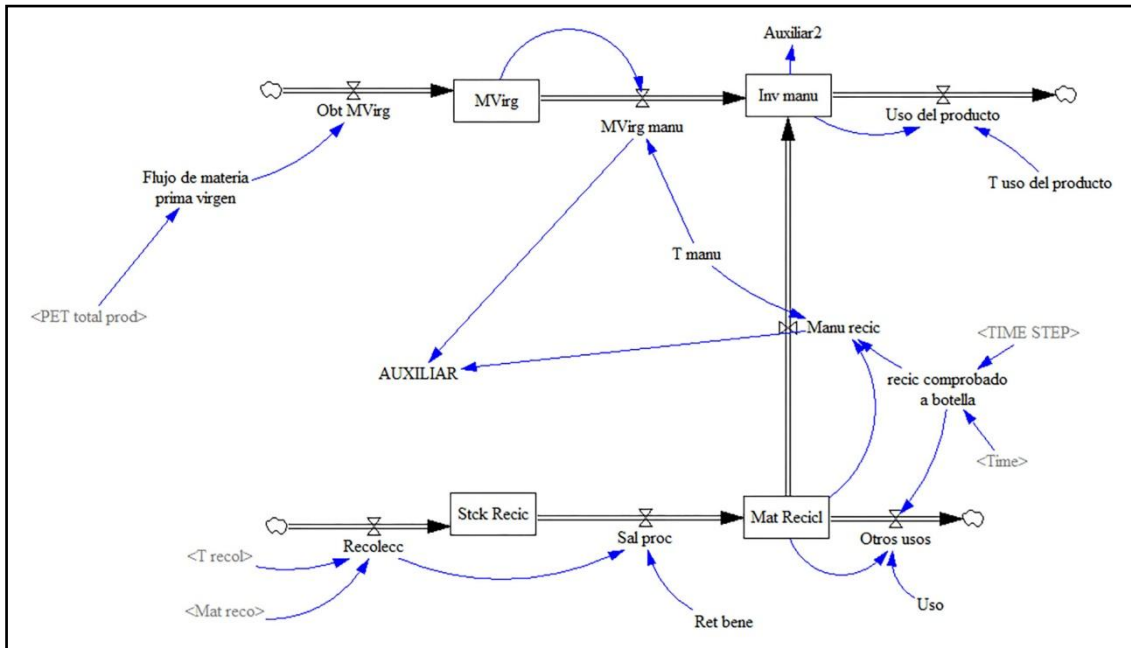


Figura 5.2.2. Modelo dinámico del ciclo de vida del PET botella (continuación). Reciclaje de material para aplicaciones de alto desempeño (botellas) y otros usos de bajo desempeño (Elaboración propia).

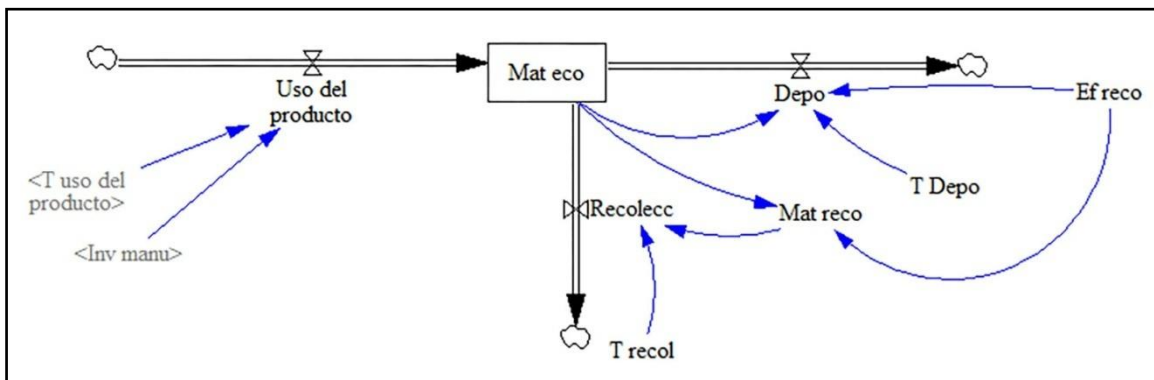


Figura 5.2.3. Modelo dinámico del ciclo de vida del PET botella (continuación). Recuperación de material para reciclaje y deposición (Elaboración propia).

La información necesaria para el cálculo de la tasa de crecimiento anual y el uso de material reciclado en aplicación para botella, se obtuvieron de los reportes anuales generados por NAPCOR, National Association for PET Container Resources. A partir de esta información se obtuvieron las ecuaciones 5.2.1 y 5.2.2, las cuales son las correlaciones históricas para la tasa de uso de PET reciclado para aplicación a botella (PET Bottle

Utilization Rate, BUR) y el crecimiento anual en el consumo de PET (Annual Growth Rate, AGR),

$$BUR = 0.049442x^{0.541451}. \quad (5.2.1)$$

$$AGR = \frac{0.17972}{x^{0.508789}}. \quad (5.2.2)$$

$$x = time + TIMESTEP. \quad (5.2.3)$$

Donde el tiempo x se compone de $time$ que corresponde al tiempo continuo y $TIMESTEP$ al tamaño de paso del método de integración seleccionado, la incorporación del tamaño de paso de integración a las ecuaciones elimina problemas de indeterminación en la simulación, en particular sobre la evaluación del modelo en el tiempo cero.

En la Figura 5.2.4 se muestra el comportamiento de la tasa anual de crecimiento (Annual Growth Rate, AGR), en el consumo de PET, donde se aprecia claramente un consumo intensivo de botellas de PET; sin embargo, este crecimiento es reducido principalmente por la optimización del diseño de los envases, que implica por lo tanto, un menor consumo del material polimérico para la fabricación del mismo tipo de envase, incluyendo su recuperación y reciclaje.

Por otra parte, la tasa de uso de PET reciclado para aplicación a botella (PET Bottle Utilization Rate, BUR), muestra un constante crecimiento en la cantidad de PET reciclado que se reincorpora para la producción de botellas, ocasionado por el creciente interés y los beneficios asociados al reciclaje y el incremento en el valor agregado del PET reciclado por medio de tecnologías de extensión de cadena.

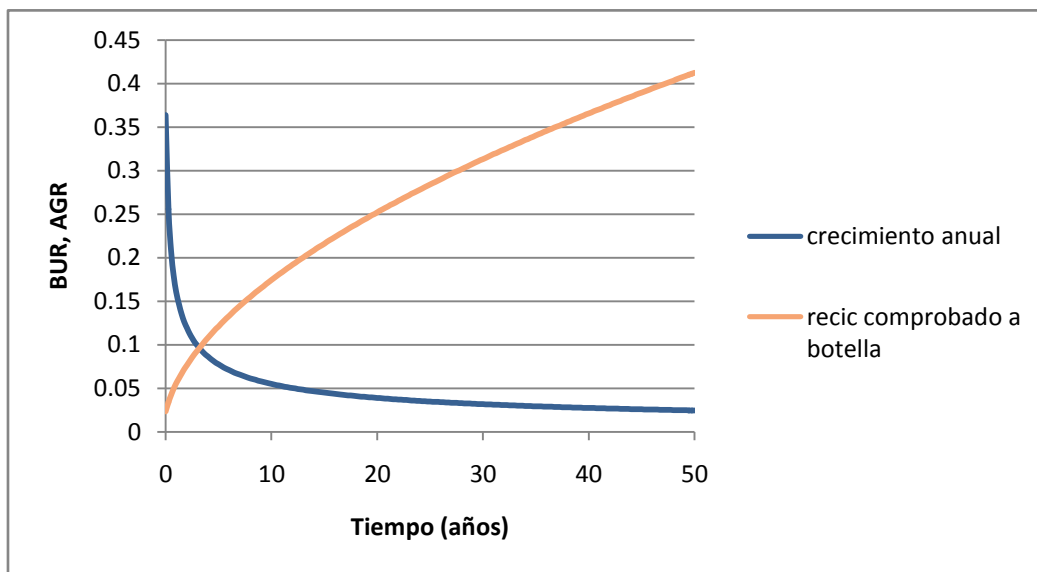


Figura 5.2.4. Funciones de crecimiento anual y tasa de recuperación y uso en botella (Elaboración propia).

Como ya ha quedado establecido, la presente investigación se enfoca en el impacto de la producción de PET vía recursos renovables en el ciclo de vida del PET botella y el incremento en la incorporación de PET reciclado en el mercado, dentro de un horizonte de planeación en el largo plazo (50 años); es en este horizonte de planeación donde se observa

como el crecimiento en la producción de PET virgen presenta un comportamiento asintótico, el cual se justifica por una recuperación alta del material y la proporción alta de este material se reincorpora a la producción de botellas que se incrementa de forma constante en el tiempo, como se muestra en la Figura 5.2.4. Este material reincorporado a la producción de botellas es aquel que permanece en el ciclo interno de reciclaje del modelo descrito anteriormente.

Este enfoque llevó a incorporar al modelo parámetros de control como la proporción de los flujos del PET virgen obtenido de materias primas petroquímicas o renovables, y la eficiencia de recuperación de PET reportada por organismos especializados como NAPCOR, una vez descartado y acopiado para su posterior reciclaje, dentro de los ciclos de retroalimentaciones principales, recuperación y reciclado de material y producción de material virgen vía recursos renovables.

El bucle de retroalimentación referente a la recuperación de material y su reciclado, se desactiva, si la eficiencia de recuperación, “Ef reco”-que corresponde a la proporción que se recupera o acopia del total de botellas que se envía a los vertederos-tiene un valor de cero; si este lazo de retroalimentación está activo, la eficiencia de recuperación se considera que tiene un valor de 30%. (NAPCOR).

Por otra parte, la producción de material virgen vía recursos renovables está sujeto a la definición de un porcentaje objetivo de participación, “O renov inic”, en la producción total de PET virgen para la producción de botellas. Por lo tanto la participación en la producción de PET virgen por ambas vías tecnológicas se monitorea en tiempo real para ajustar la contribución de cada ruta tecnológica a fin de cumplir con el objetivo establecido.

El porcentaje de participación permite, dentro del modelo, desactivar este proceso de producción vía renovables, de ser necesario. En el presente trabajo de investigación el objetivo de participación se considera del 10% de acuerdo a una investigación preliminar llevada a cabo por el autor de la presente tesis.

El modelo considera que la producción de material virgen vía petroquímicos se mitiga por la contribución de la producción vía recursos renovables y el material reciclado para aplicación a la producción de botellas, es decir, mediante el reciclaje y el uso de recursos renovables se evita el consumo de recursos no renovables, es decir de petroquímicos, cumpliendo con la demanda correspondiente al periodo de evaluación.

Adicionalmente a los parámetros antes mencionados, se incorporaron al modelo otros parámetros, principalmente tiempos unitarios, los cuales al ser evaluados y estudiados con la herramienta de simulación SyntheSim® de Vensim®, se encontró que de éstos, el tiempo de asimilación de la tecnología, el tiempo de recolección y el tiempo retención del beneficio presentaron impactos considerables en el comportamiento del sistema, por lo que fueron consideradas para el análisis de sensibilidad.

Los valores de los parámetros principales para la evaluación del caso base se muestran en la Tabla 5.2.2.

Parámetro	Valor
Eficiencia de recuperación	30%
Objetivo de producción vía renovables	10%
Tiempo de asimilación de la tecnología	1 año
Tiempo de recolección	1 año
Tiempo de retención del beneficio	4 años

Tabla 5.2.2. Parámetros principales(Elaboración propia).

En la Figura 5.2.5 se muestran los perfiles de la producción de Tereftalato de polietileno virgen para botella. Los flujos corresponden a la producción vía recursos renovables, “flujo prod renov”; producción vía petroquímicos, “flujo prod STD”; así como la producción total, “PET total prod”.

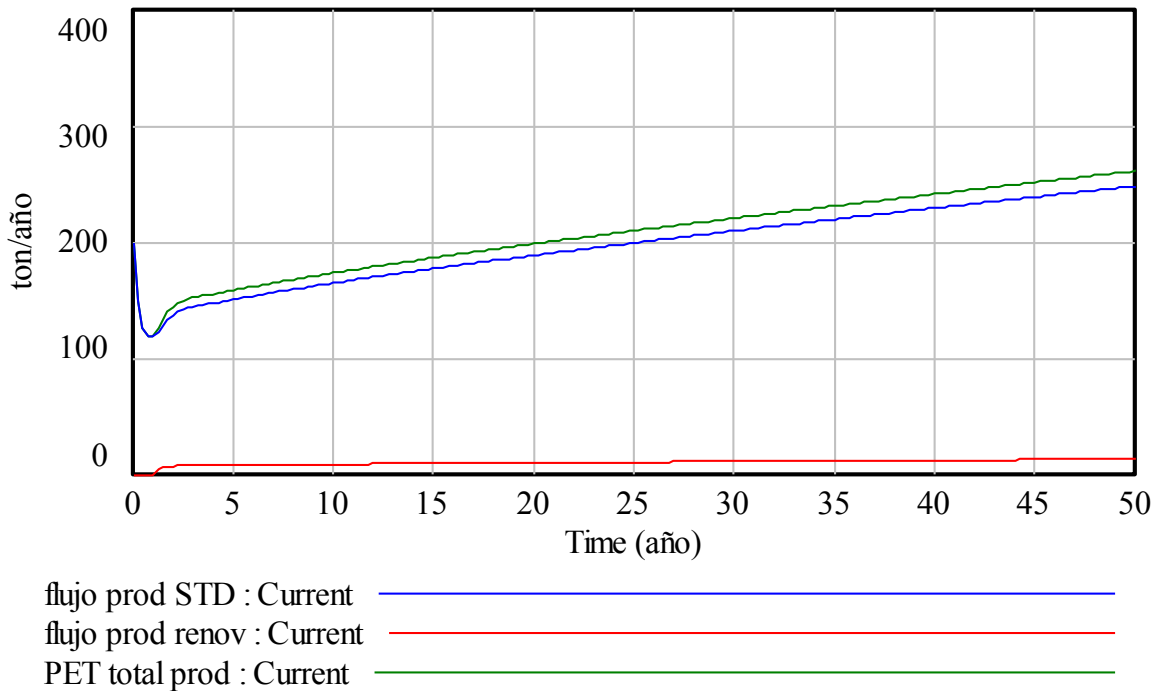


Figura 5.2.5. Perfiles de producción de PET virgen para aplicación a botellas(Elaboración propia a través del Software Vensim® V 5.11A).

Por otra parte, la Figura 5.2.6 corresponde al material reciclado y la distribución de este para la producción de botellas en su aplicación de alto desempeño y otros usos o aplicaciones de bajo desempeño, en las que las especificaciones del material no son tan exigentes tales como textiles, embalaje y escobillones, por ejemplo.

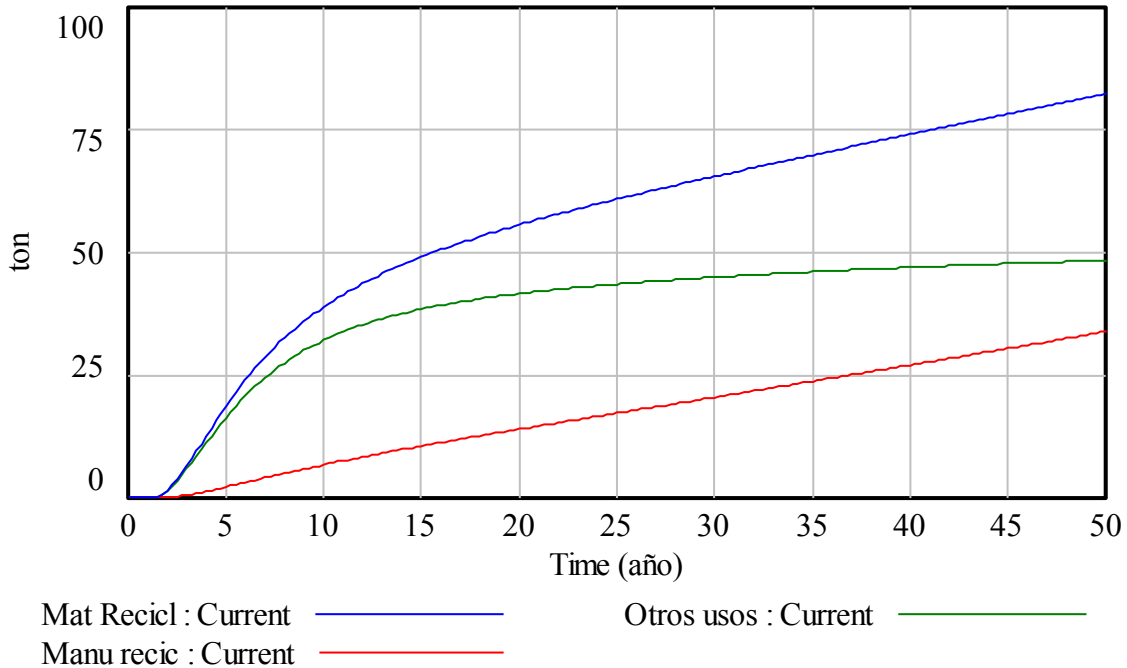


Figura 5.2.6. Producción de PET reciclado y su distribución para aplicación a botellas y aplicaciones de bajo desempeño (Elaboración propia a través del Software Vensim® V 5.11A).

5.3 Análisis de sensibilidad.

Para detectar los parámetros con mayor influencia sobre el modelo, se utilizó el modo de simulación SyntheSim® del software Vensim®, el cual, como se mencionó anteriormente, permite la modificación en tiempo real de los parámetros definidos en el modelo y su impacto en la simulación.

En la Figura 5.3.1 se muestra el cambio de uno de estos parámetros, (Objetivo de participación de recursos renovables en la producción total de PET virgen, “O renov inic”), y el cambio en los perfiles de producción de material virgen, donde es clara la reducción de la brecha entre la producción vía renovables y la vía de los no renovables.

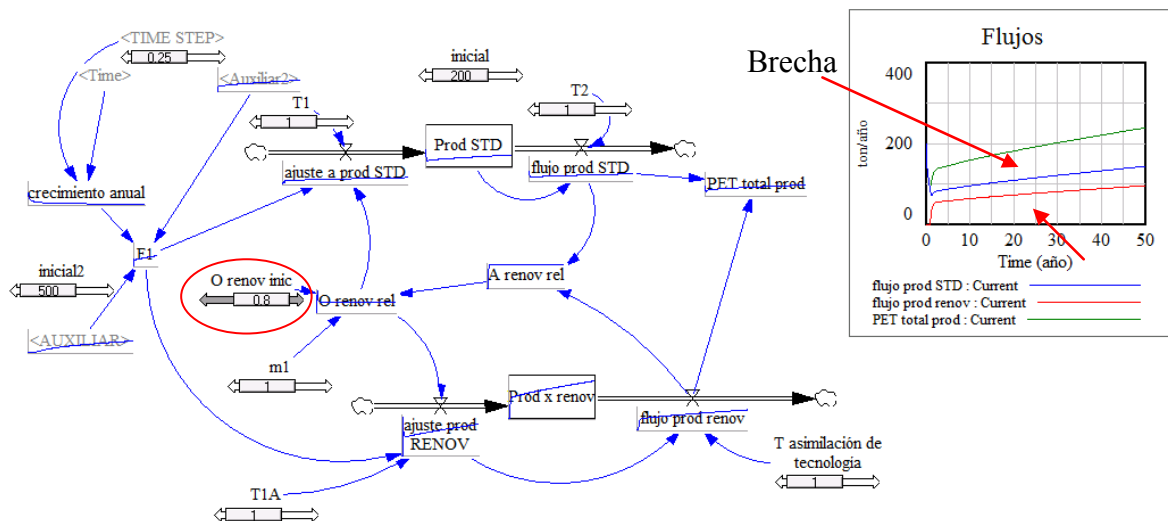


Figura 5.3.1. Impacto sobre los perfiles de producción por la variación de un parámetro usando SyntheSim®. Ver Figura 5.2.1.

Mediante el uso del modo de simulación SyntheSim® con el que se realizaron diferentes corridas cambiando los parámetros, se encontró el rango de valores en el cual los parámetros principales del modelo son válidos, es decir, que le proporcionan a éste un sentido físico a los resultados de las simulaciones y mejoran la estabilidad dinámica del modelo. En la Tabla 5.3.1 se muestran los rangos correspondientes a los parámetros principales del modelo

Parámetro	Rango
Eficiencia de recuperación	0-1
Objetivo de producción vía renovables	0-1
Tiempo de asimilación de la tecnología	0.5-10
Tiempo de recolección	1-5
Retención del beneficio	0.1-20

Tabla 5.2.1. Rango de valores para los parámetros principales del modelo (Elaboración propia).

El análisis de sensibilidad requiere la definición del método de muestreo para la evaluación de los parámetros. En el presente trabajo se aplicó una distribución aleatoria uniforme de acuerdo a lo recomendado en el manual de Vensim®, quedando definido el análisis de sensibilidad como se muestra en la Figura 5.3.2, que corresponde a la ventana de definición del modo de análisis de sensibilidad del software Vensim®.

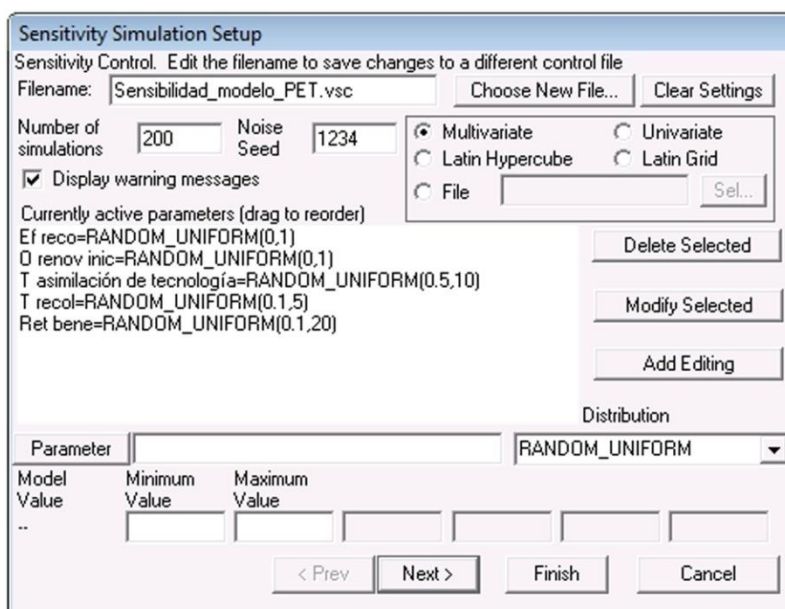


Figura 5.3.2. Ventana de definición del análisis de sensibilidad en Vensim®.

Parte de los resultados obtenidos del análisis de sensibilidad multivariable aplicado al modelo se presentan en la Figura 5.3.3, donde se describen los comportamientos en el tiempo de diferentes flujos de PET de acuerdo a la evaluación, donde „Virgin Materials From No renewables” and „Virgin Materials From Renewables” son los flujos de producción de PET nuevo vía petroquímica y recursos renovables, respectivamente, „Other Uses” corresponde al PET reciclado que se usa en aplicaciones de bajo desempeño; y „Disposal” es el PET que termina su ciclo de vida en los vertederos o rellenos sanitarios.

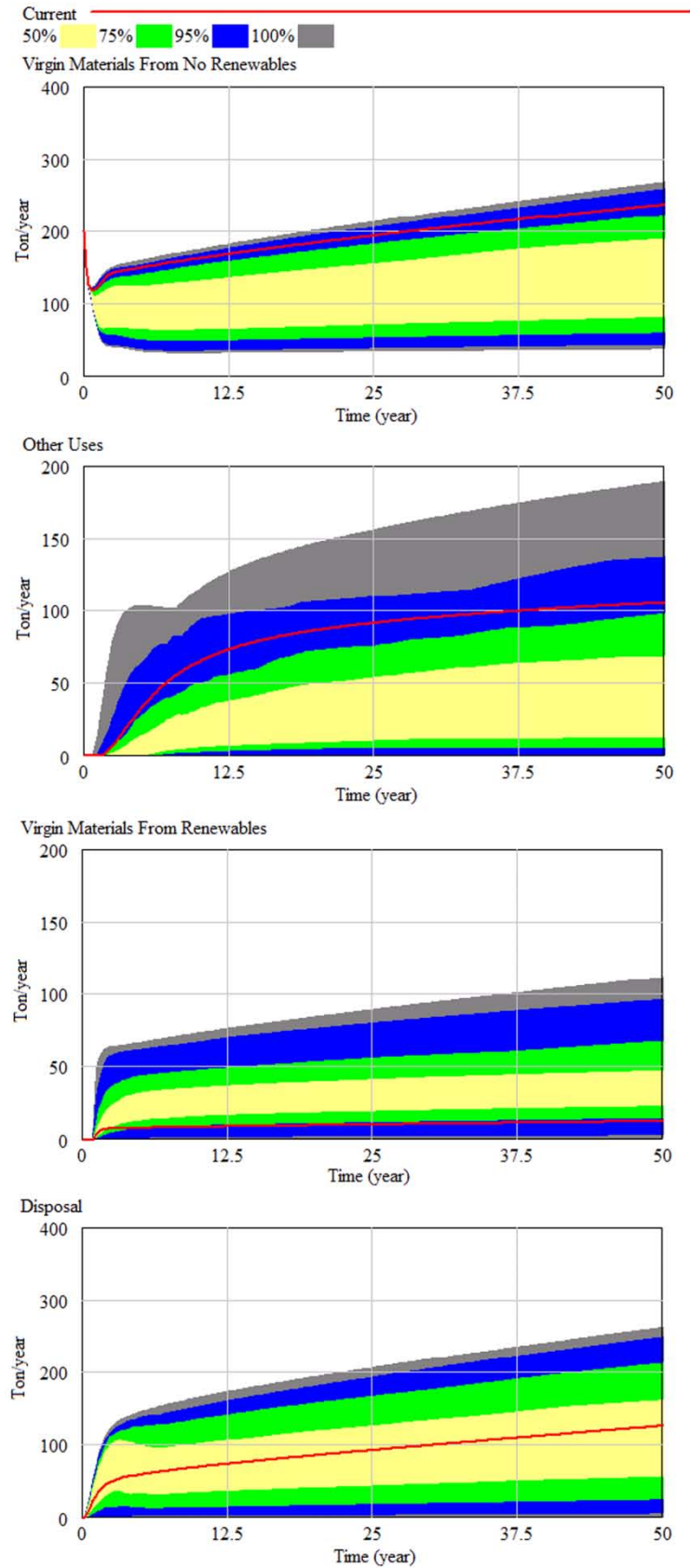


Figura 5.3.3. Perfiles de sensibilidad para diferentes flujos de PET (Elaboración propia a través del Software Vensim® V 5.11A).

Las bandas azules, grises y amarillas presentes en los gráficos corresponden a los rangos de probabilidad de los flujos de PET en el horizonte de planeación a 50 años, en el cual se aplicó la distribución aleatoria uniforme para la evaluación de los parámetros del modelo.

Por ejemplo, el área entre las zonas verdes, la cual incluye a las zonas verde + amarilla representa el 75% de los perfiles de flujo de PET en el horizonte de planeación. „Current“ representa el perfil de los flujos obtenidos de la evaluación del modelo bajo las premisas y el valor de los parámetros establecidos para el caso base en la sección anterior.

En el Apéndice 7 se presentan los gráficos individuales de los flujos de PET principales del modelo.

6. Construcción de escenarios considerando el probable agotamiento del petróleo y el incremento de los materiales vírgenes con recursos renovables en conjunto con el reciclaje.

El pico petrolero (o cenit petrolero), definido como el momento en el cual se alcanza la tasa máxima de extracción del petróleo global y tras la cual la tasa de producción entra en un declive terminal (Hubbert, 1956), plantea un problema de administración de riesgo sin precedente, principalmente porque no existe acuerdo entre los investigadores sobre cuando se presentará debido a la falta de intercambio de información y la fiabilidad de la misma. Conforme se acerca el pico la volatilidad de los precios se incrementa y, sin la mitigación oportuna, los costos económicos, políticos y sociales aumentan a una magnitud sin precedente. Sin embargo existen opciones de mitigación del impacto del pico petrolero. Para tener un impacto de mitigación considerable, estas acciones se deben iniciar al menos una década antes del pico petrolero.

Entre las principales estrategias de mitigación se encuentran a) la conservación de los recursos, la cual debe entenderse como la implementación de tecnologías de eficiencia energética que impacten en los procesos de gran escala, reduciendo significativamente el consumo materias primas petroquímicas y, b) la recuperación mejorada de petróleo (Improved Oil Recovery, IOR) que debe considerar los diferentes aspectos de la administración del yacimiento a lo largo de su vida útil, cuya adaptación y posterior aplicación sea particular para cada tipo de yacimiento.

La implementación de las estrategias de mitigación arriba mencionadas y otras disponibles, son costosas y se asocian a un tiempo de implementación largo. Se debe considerar que aún con la disponibilidad de recursos, no existe certeza de que los proyectos propuestos se lleven a cabo (Hirsch et al., 2005).

El reporte desarrollado por Hirsch et al., 2005 para el Laboratorio Nacional de Tecnología en Energía (National Energy Technology Laboratory, NETL), establece que cualquier mejora en los procesos petroquímicos, en particular los correspondientes a la obtención de combustibles líquidos, requiere de un esfuerzo de décadas ya que implica la construcción de nuevas plantas y sustitución de viejas tecnologías; en el reporte se recomienda que la implementación de estas mejoras y modificaciones debe realizarse a lo largo de las dos décadas precedentes al pico petrolero a fin de mitigar los impactos del declive.

En el presente trabajo, se establecieron tres escenarios, se considera inminente el pico petrolero y por consiguiente el declive en la disponibilidad de los recursos petroquímicos para la producción de diferentes materiales, entre ellos el Tereftalato de polietileno, PET. Dentro del horizonte de planeación en la simulación de 50 años, se supone que el pico petrolero global se presenta en el año 30, 5 años después de los que Hirsch calculó. La simulación de los escenarios se llevóa cabo en el modo de simulación interactiva de Vensim®.

Los parámetros principales modificados en la simulación para generar los escenarios son: el objetivo de participación de recursos renovables en la producción total de PET virgen(O renov inic) y el parámetro de corrección de la función RAMP, que representa el acercamiento entre la relación entre la producción de PET renovable y no renovable a través de O renov rel; $m1$ representa el ritmo de implementación de las tecnologías de aprovechamiento de recursos renovables para fomentar el cumplimiento del objetivo de participación.

Por lo anterior, los tres escenarios generados a partir del modelo el ciclo de vida del PET botella(bPET) bajo el enfoque de la dinámica de sistemas se han identificado como:

- **Escenario 1:** Aplicación de medidas 10 años antes del declive.
- **Escenario 2:** Aplicación de medidas al inicio del declive.
- **Escenario 3:** Aplicación de medidas a partir del año 5 del horizonte de planeación.

En la figura 6.1, en rojo, se muestra el crecimiento de la contribución de las tecnologías para la producción de bPET vía recursos renovables. Esta tecnología se considera viable para su implementación 10 años antes del declive en la disponibilidad de materias primas petroquímicas, en el escenario 1. Los parámetros principales se modificaron durante la simulación de acuerdo a lo que muestra la figura 6.2, de tal forma que cuando se inicia el declive petrolero, la contribución en la producción de bPET virgen por parte de las fuentes renovables alcanza un 50%, teniendo como objetivo el 100% de la producción.

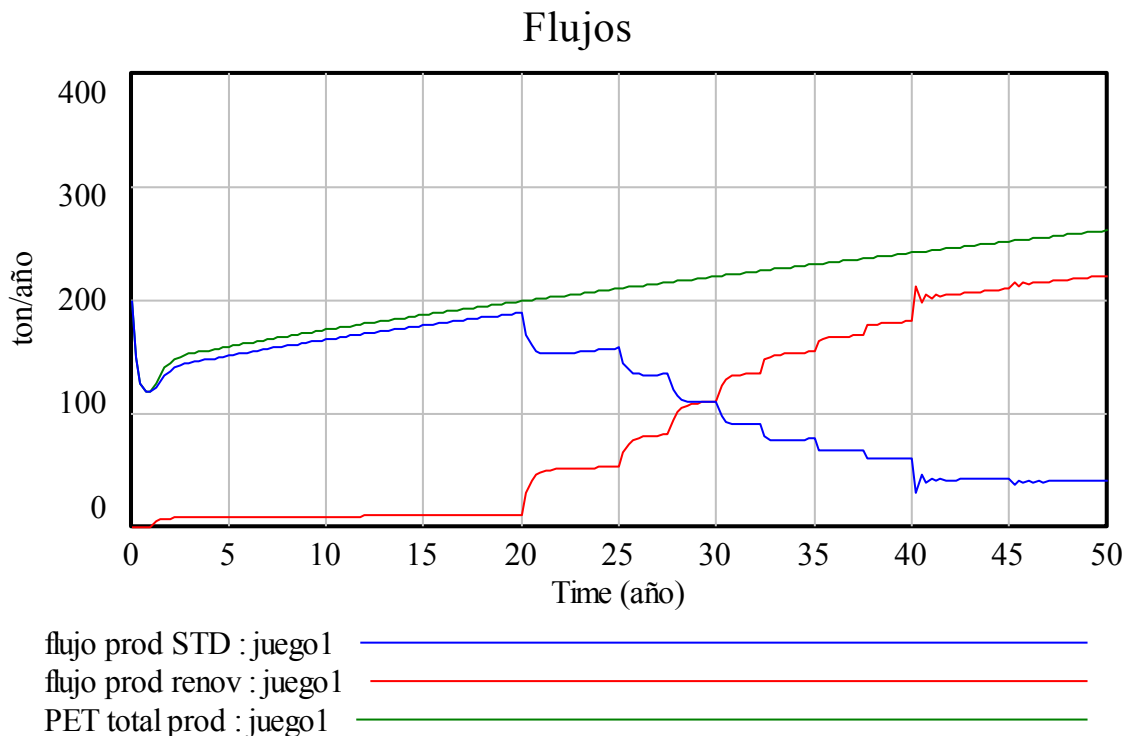


Figura 6.1. Escenario 1: Aplicación de medidas 10 años antes del declive(Elaboración propia a través del Software Vensim® V 5.11A).

Las funciones representadas en la figura 6.2 tienen un carácter discreto el cual está dado por la perturbación del parámetro correspondiente en el tiempo de evaluación; por ejemplo, a

“*m1*” se le asignó un valor de 2 en el año 35.25 y a “*O renov inic*” un valor de 1, conservando estos valores durante 2.5 años, tiempo en el cual los perfiles de producción de bPET virgen se estabilizan, permitiendo nuevamente perturbar el valor de los parámetros, a fin de incentivar una mayor contribución de la fuentes renovables a la producción de bPET virgen. El periodo de tiempo en el que el sistema se estabiliza después de perturbar los parámetros mencionados no es constante y se realizaron los cambios conforme se apreció la estabilidad del sistema al avanzar en los periodos de evaluación del modelo, cuando *m1* se perturba.

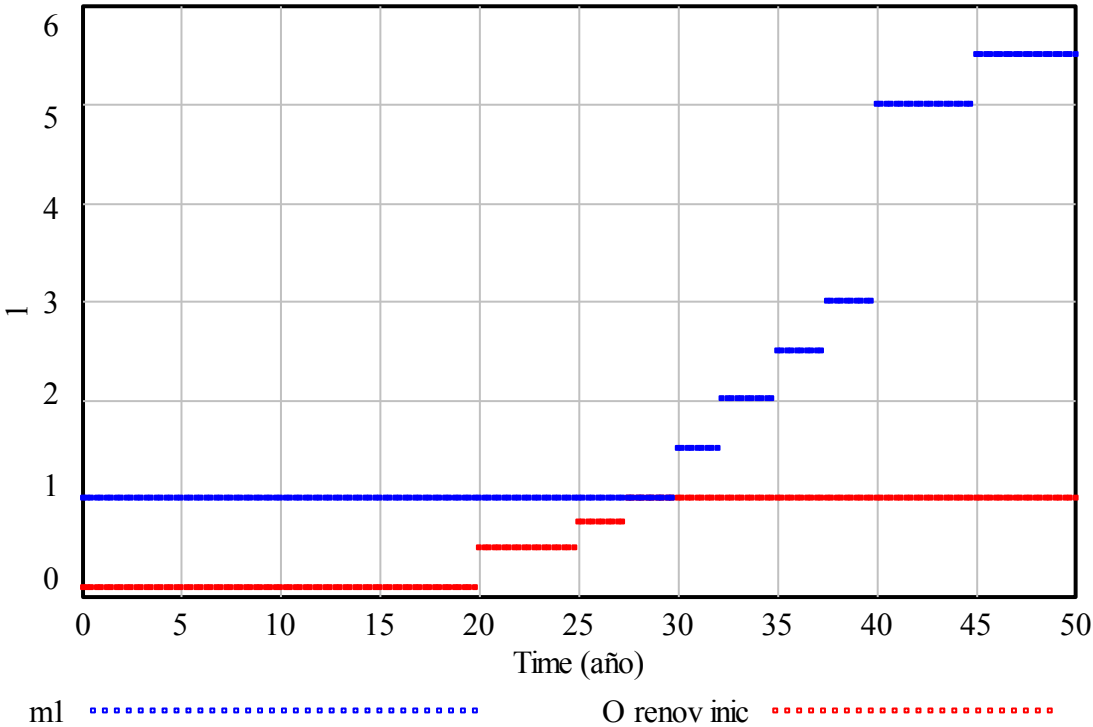


Figura 6.2. Escenario 1: Aplicación de medidas 10 años antes del declive. Modificación de parámetros durante la simulación (Elaboración propia a través del Software Vensim® V 5.11A).

La intersección entre la producción vía petroquímicos y la producción vía recursos renovables que se aprecia en la Figura 6.1, tiene como consecuencia la aplicación de políticas y acciones que rompan la intersección a favor de la producción por renovables. Estas acciones, representadas por “*m1*”, requieren la totalidad de los 50 años del horizonte de planeación para alcanzar niveles de un 80% de contribución a la producción total de bPET virgen por medio de recursos renovables.

La oferta total en el escenario 1, compuesta por el total de bPET virgen producido y el total del PET reciclado para aplicación a botellas, al final del horizonte de planeación se constituye por un 89.3% (259,000 ton) de material virgen y 10.7% (33,900 ton) de material reciclado.

El *Escenario 2: Aplicación de medidas al inicio del declive* se representa en la figura 6.3; la tecnología de producción de bPET a partir de recursos renovables se considera para su implementación cuando se da el declive en la disponibilidad de materias primas

petroquímicas, sin haber establecido medidas de mitigación previas como es el caso del escenario 1. Esto sucede, aún si dicha tecnología se encuentra disponible antes del pico petroquímico (año 30 de la simulación) de tal modo que las contribuciones a la producción total de bPET virgen en el pico petrolero, son del 94.9% de fuentes petroquímicas y solo 5.1% de biomateriales.

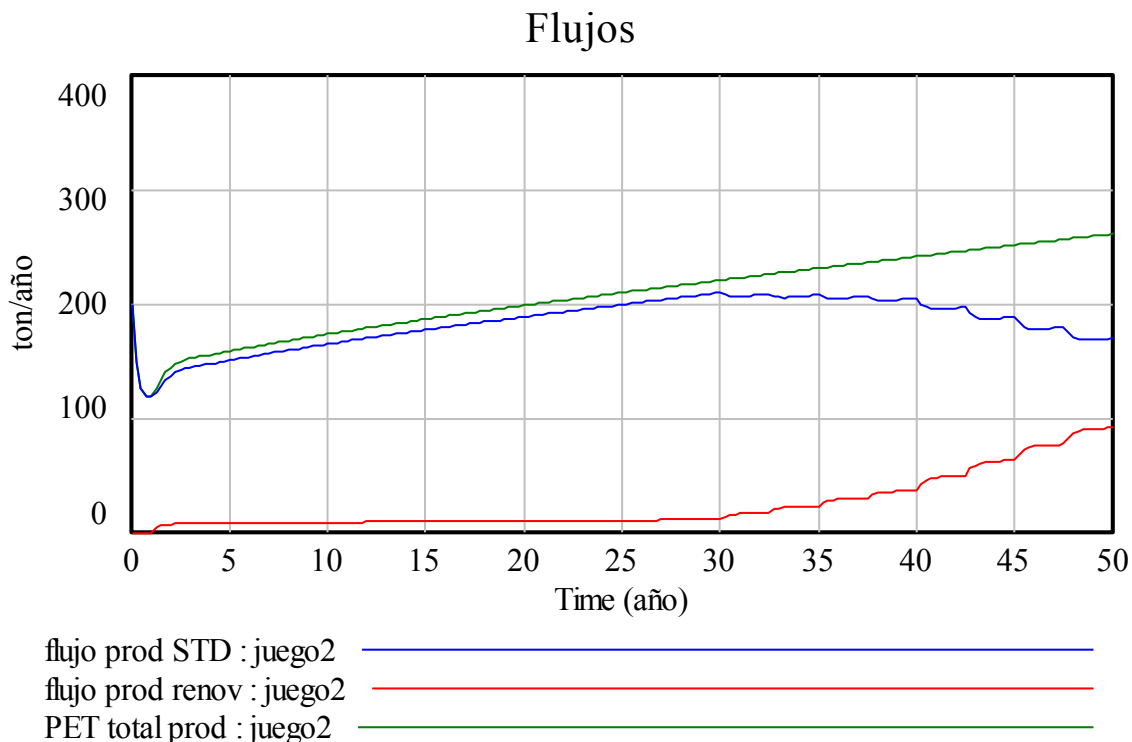


Figura 6.3. Escenario 2: Aplicación de medidas al inicio del declive (Elaboración propia a través del Software Vensim® V 5.11A).

La brecha entre las tecnologías de producción de bPET virgen se reduce en el horizonte de planeación sin alcanzar una proporción de 1:1 en la contribución a la producción total por la implementación tardía de las políticas y acciones a favor de las tecnologías de aprovechamiento de recursos renovables. En la Figura 6.4 se observa el perfil de las perturbaciones a los valores de los principales parámetros. Bajo este escenario, la contribución a la producción total de bPET virgen procedente de materias primas petrolera y renovables es de 65.1% y 34.9% respectivamente.

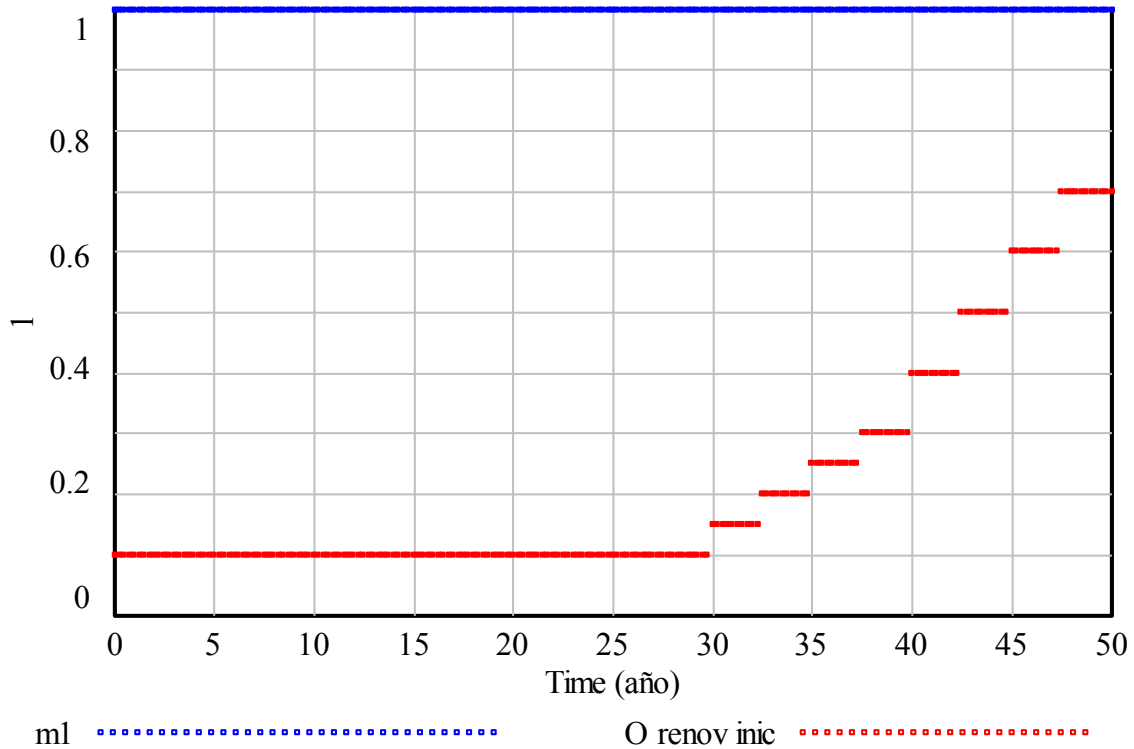


Figura 6.4. Escenario 2: Aplicación de medidas al inicio del declive. Modificación de parámetros durante la simulación (Elaboración propia a través del Software Vensim® V 5.11A).

En el tercer escenario, se lleva a cabo la aplicación de medidas de mitigación a partir del año 5 del horizonte de planeación, (figura 6.5), mediante la aplicación de las políticas y acciones a través de la perturbación de los parámetros “*O renov inic*” y “*ml*” como se muestra en la figura 6.6, en la simulación de este escenario. El pico petrolero se mantiene en el año treinta, obteniendo una contribución del 70% a la producción de bPET virgen a partir de recursos petroleros y, por consiguiente un 30% proveniente de recursos renovables en ese año. Hagamos notar que el procedimiento para los tres escenarios es el mismo con el que se detalló el escenario 1.

La brecha entre las vías de producción de bPET virgen se reduce hacia el horizonte de planeación (año 50), ya que la aplicación de las políticas y acciones que incentivan las tecnologías de aprovechamiento de los recursos renovables para la producción de bPET, se han implementado en forma paulatina a lo largo del horizonte de planeación. Esto permite la mitigación en el ritmo de agotamiento de los recursos no renovables (Hirsch, Op cit.).

Flujos

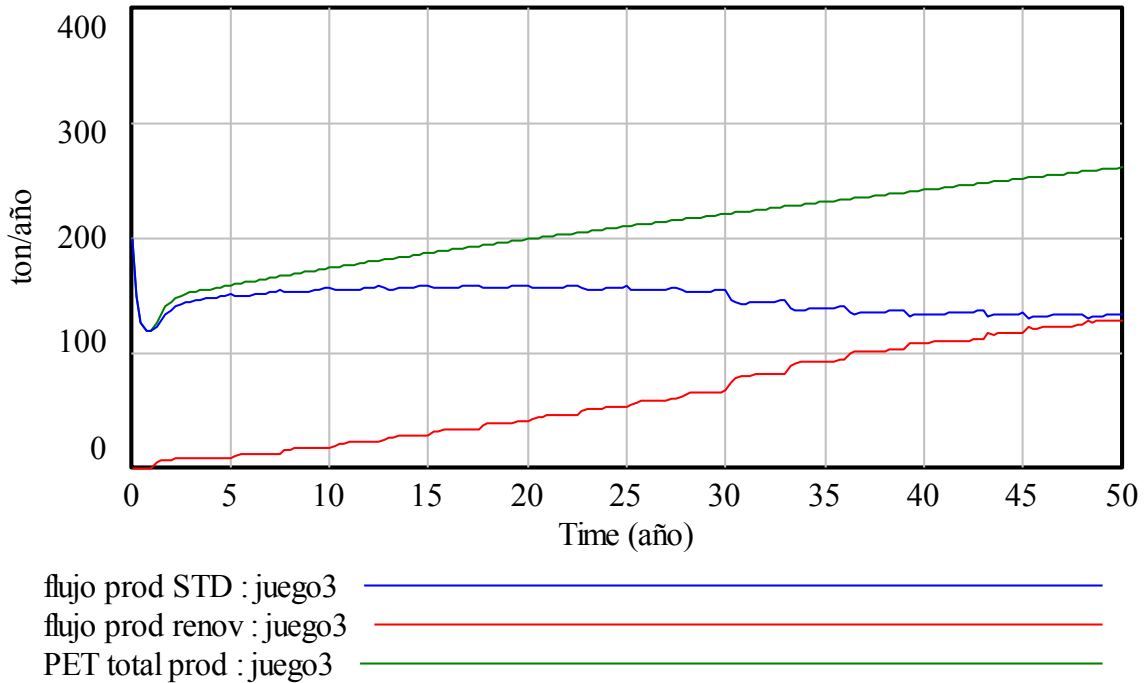


Figura 6.5. Escenario3: Aplicación de medidas a partir del año 5 del horizonte de planeación (Elaboración propia a través del Software Vensim® V 5.11A).

La aplicación de medidas adicionales para invertir la contribución a la producción de bPET virgen, se pueden establecer para un segundo horizonte de planeación, en donde se deberán incorporar los efectos de mitigación acumulados durante el primer periodo de implementación de políticas de aprovechamiento y fomento de tecnologías renovables para la producción de bPET.

En los tres escenarios la producción de Tereftalato de polietileno reciclado para botella presenta el mismo perfil de evolución a lo largo de todo el horizonte de planeación como lo muestra la figura 6.7, donde al final del horizonte de planeación de las 290,000 toneladas de botellas de PET, 31,000 toneladas corresponden a la contribución por reciclaje (10.6%) al total del bPET. Este perfil se mantiene sin cambio en los tres escenarios planteados ya que no depende de los parámetros modificados y está definido principalmente por la función BUR (ecuación 5.2.1).

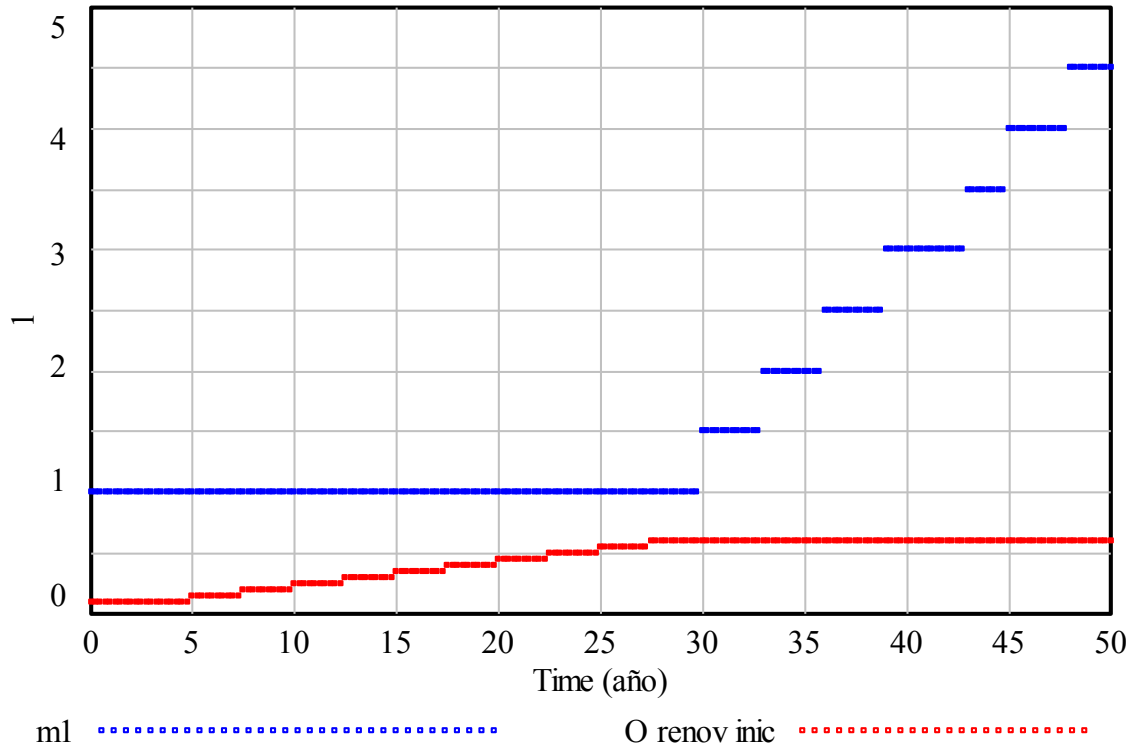


Figura 6.6. Escenario 3: Aplicación de medidas a partir del año 5 del horizonte de planeación. Modificación de parámetros durante la simulación (Elaboración propia a través del Software Vensim® V 5.11A).

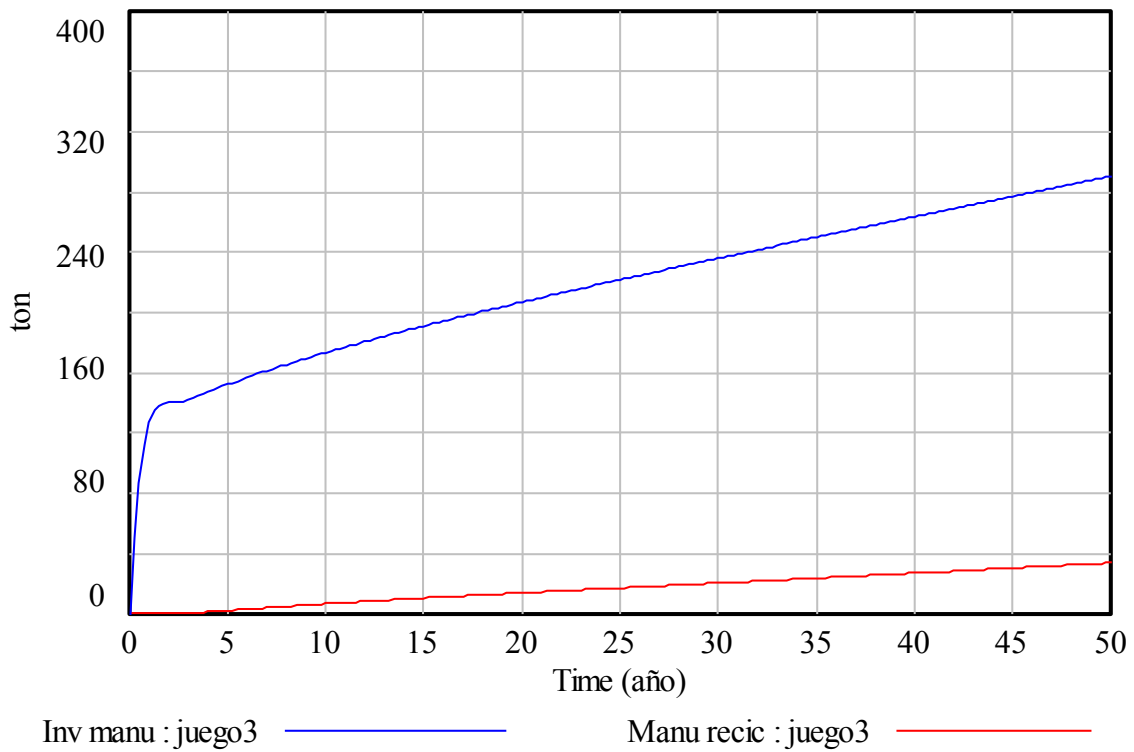


Figura 6.7. Perfil de evolución de la producción de bPET reciclado (Elaboración propia a través del Software Vensim® V 5.11A).

7. Conclusiones y recomendaciones.

La metodología aquí propuesta ha dado lugar, en el curso del desarrollo del presente trabajo de tesis, a diferentes publicaciones tales como:

- Cámara, A., Escobar, C., Rigaud, N. (2014) Metodología para evaluar el desarrollo sustentable de productos industriales con criterios múltiples. Fundación Gómez Pardo.
- Anistro J., P.A. and Escobar T., C.E. (2015) System Dynamics Approach in LCA for PET-Renewable Raw Materials Impact. American Journal of Operations Research, 5, 307-316. <http://dx.doi.org/10.4236/ajor.2015.54024>.
- Alegria, L., Escobar, C., Ramírez, B. (2012) Decision Making in Sustainable Development: Some Methods to Evaluate Energy and Nonrenewable Resources Waste When Using Some Plastics. American Journal of Operations Research, 2, 399-407. <http://dx.doi.org/10.4236/ajor.2012.23048>.
- Escobar, C., Mareschal, B. (2015) Energy Efficiency, Sustainable Development and Natural Resources Conservation: Multicriteria Life-cycle Analysis of Daily-Used Materials with a Long-term Vision. British Journal of Applied Science & Technology 6(1): 34-48, Article no.BJAST.2015.065. ISSN: 2231-0843.

El proceso de modelado del ciclo de vida bajo el enfoque de dinámica de sistemas, es en sí mismo, un proceso que considera *altiempo* una variable que juega un papel preponderante en el sistema estudiado. Este enfoque, requiere el ajuste de la estructura del modelo de acuerdo a la información obtenida del modelado inicial del problema, a través de simulaciones de prueba y por lo tanto de la interpretación, representación y congruencia con el comportamiento histórico observado del sistema que se quiere representar.

La etapa de simulación del ciclo de vida bajo el enfoque de la dinámica de sistemas, en la metodología propuesta, permite la obtención de información en función de un conjunto de decisiones, políticas y acciones para establecer una serie de escenarios posibles a evaluar en la etapa de selección multicriterio y multiescenario.

En el presente trabajo se ha presentado el análisis del ciclo de vida del Tereftalato de polietileno de aplicación en empaque para bebidas, bajo el enfoque de la Dinámica de Sistemas, tomando en cuenta la producción de PET vía recursos renovables, como una contribución a la metodología de toma de decisiones.

Los resultados muestran la utilidad de la dinámica de sistemas para representar el comportamiento de los materiales plásticos, en particular de PET utilizado para fabricar botellas. Se ha incluido así mismo la producción de PET en el ciclo de vida, a partir de fuentes renovables, lo cual presenta un impacto significativo a la producción total del material. En la dinámica del sistema, la utilización de fuentes renovables no es inmediata,

lo cual es atribuible al retraso en la asimilación de la tecnología y por lo tanto, a la contribución en la producción total.

El reemplazo con materiales renovables tiene un límite, el cual está definido por la eficiencia de la tecnología disponible en ambos casos –con recursos no-renovables y renovables- considerando el tiempo requerido para la obtención de una unidad de material virgen. Entonces, la contribución para la obtención de PET a partir de fuentes no renovables, conservara su magnitud, mientras continua el desarrollo y optimización de las tecnologías para el aprovechamiento de las fuentes renovables.

Las herramientas de software para el análisis de sensibilidad y la simulación interactiva, probaron ser de utilidad para la generación de escenarios bajo diferentes premisas de políticas y acciones, que incorporadas a los parámetros requeridos por el modelo, hicieron asequible el análisis prospectivo de los escenarios.

Es posible reducir la contribución a la producción de Tereftalato de polietileno grado botella, vía las tecnologías de gas y el petróleo, pero sin excluirla de la cadena de producción de ambas tecnologías, mediante la generación e implementación de políticas apropiadas que incentiven la investigación y desarrollo de nuevas tecnologías de síntesis de PET, aprovechando ambas fuentes de recursos, renovables y no renovables, así como aquellas para el reciclaje químico de la resina de PET botella.

Para que las políticas mencionadas tengan el impacto deseado sobre el comportamiento del material, las políticas deben tomar en cuenta la prospectiva de crecimiento de la industria de las bebidas, de manera tal que el objetivo de producción con el uso de las tecnologías de aprovechamiento de ambas fuentes, se consideren en la primera parte de la simulación de los escenarios, una vez construido el modelo. Para dar lugar a la evolución de las preferencias, políticas y de disponibilidad de recursos, se debieron revisar los resultados y ajustar los parámetros de la simulación.

En el horizonte de planeación, el declive en la producción de polímeros petroquímicos deberá ser el incentivo mayoritario en el impulso de las políticas de las políticas de producción de biopolímeros y reciclaje para el suministro del PET a consumirse en el horizonte de planeación.

El incremento en la eficiencia tecnológica se encuentra correlacionada a diferentes campos del conocimiento como la biotecnología, la ingeniería de procesos y la biorefinación.

El reciclaje de las botellas para producir otras botellas a partir del Tereftalato de polietileno está en constante crecimiento, especialmente por las políticas medioambientales implementadas por diferentes corporaciones, que han generado diversos casos exitosos. Un ejemplo de estos es el arranque, en 2014, de la expansión de la planta de reciclaje de PETStar® con una capacidad de producción total de 50,000 ton/año en Toluca, Edo. Mex., México; ejemplos como el anterior son mencionados en los reportes anuales publicados por la National Association for PET Container Resources.

Incrementar la recuperación de botellas de Tereftalato de polietileno desechado y la optimización de los procesos para la mejora del valor agregado de la resina PET reciclada, tienen importantes efectos en la producción total de envases. Conforme el sector del reciclaje continua consolidándose, los resultados muestran que es necesario maximizar la eficiencia en la recuperación y la adición de valor agregado al PET para aplicaciones de alto desempeño, puede contribuir a minimizar los requerimientos de PET virgen.

Las actividades de recolección y acopio constituyen primeramente un problema de logística para garantizar el suministro de material a las plantas de reciclaje debido a la alta fragmentación de los centros de acopio. Esto representa verdaderamente un problema para el funcionamiento del modelo y sus resultados. Sin un acopio substancial y eficiente, los resultados de las simulaciones son muy inestables y por lo tanto, la producción de PET botella sólo se llevaría a cabo con los materiales vírgenes obtenidos de las dos fuentes de recursos.

Bajo otras premisas, consideraciones y preferencias, actualmente se llevan a cabo otros trabajos de investigación semejantes al presente, considerandola metodología y el modelo aquí propuesto, se recomienda someter el modelo al estudio y la aplicación con otros materiales, ante la posibilidad de hacer del modelo propuesto, un modelo generalizado.

Como ya se ha explicado, en el primer escenario, la cantidad de PET virgen en el momento en que ocurre la intersección entre la producción vía petroquímicos y la producción vía recursos renovables, tiene como consecuencia que la aplicación de políticas y acciones, rompen esta intersección a favor de la producción de renovables. Estas acciones, requieren la totalidad de los 50 años del horizonte de planeación para alcanzar niveles de un 80% de contribución a la producción total de PET virgen por medio de recursos renovables.

La oferta total en el escenario 1, compuesta por el total de PET virgen producido por ambas vías y el total del PET reciclado al final del horizonte de planeación, se constituye por un 89.3% (259,000 ton) de material virgen y 10.7% (33,900 ton) de material reciclado.

En el Escenario 2, la tecnología de producción de PET a partir de recursos renovables se lleva a cabo cuando se da el declive en la disponibilidad de materias primas petroquímicas, sin haber establecido medidas de mitigación previas como es el caso del escenario 1. Esto sucede, aún si dicha tecnología se encuentra disponible antes del pico petroquímico (año 30 de la simulación) de tal modo que las contribuciones a la producción total de PET virgen, son del 94.9% de fuentes petroquímicas y solo 5.1% de biomateriales.

La brecha entre las tecnologías de producción de PET virgen se reduce en el horizonte de planeación sin alcanzar una proporción de 1:1, por la implementación tardía de las políticas y acciones a favor de las tecnologías de aprovechamiento de recursos renovables. Bajo este escenario, la contribución a la producción total de PET virgen procedente de materias primas petrolera y renovables es de 65.1% y 34.9%, respectivamente.

En la simulación del tercer escenario, se lleva a cabo la aplicación de medidas de mitigación a partir del año 5 del horizonte de planeación. Los resultados muestran que en el pico petrolero se obtiene una contribución del 70% a la producción de PET virgen a partir

de recursos petroleros y, por consiguiente un 30% proveniente de recursos renovables en ese año.

De los resultados obtenidos, la brecha entre las vías de producción de PET virgen se reduce hacia el horizonte de planeación en el año 50 debido a la implementación paulatina de la aplicación de las políticas y acciones que incentivan las tecnologías de aprovechamiento de los recursos renovables para la producción de PET, aportando así a la mitigación del ritmo del agotamiento de los recursos no renovables.

La aplicación de medidas adicionales para revertir la contribución a la producción de PET virgen, se pueden establecer para un horizonte de planeación más amplio, en donde se deberán incorporar los efectos de mitigación acumulados durante el primer periodo de implementación de políticas de aprovechamiento y fomento de tecnologías renovables para la producción de PET.

En los tres escenarios, la producción de Tereftalato de polietileno reciclado para botella presenta el mismo perfil de evolución a lo largo de todo el horizonte de planeación, donde al final del horizonte de planeación de las 290,000 toneladas de botellas de PET, 31,000 toneladas corresponden a la contribución por reciclaje (10.6%) al total del PET. Este perfil se mantiene sin cambio en los tres escenarios planteados ya que no depende de los parámetros modificados.

Considerando los objetivos particulares y las hipótesis establecidas para la presente tesis, se ha presentado el estudio del ciclo de vida del PET bajo el enfoque de la dinámica de sistemas y la prospectiva, donde se han identificado las transiciones tecnológicas de mayor impacto en la producción de botellas.

Las transiciones tecnológicas a las que se hace mención consisten en las tecnologías para la producción de PET virgen a partir de recursos renovables (drop-in solution) y las tecnologías de reciclaje. El análisis de los escenarios propuestos, permite la visualización de los efectos de las acciones y políticas, que aplicadas al sistema y, en consecuencia para visualizar una planeación más robusta, considerando la existencia del llamado “pico petrolero” que llevará al consiguiente agotamiento de los recursos no renovables para la producción de PET. Para ello, se estudió y se implantó que la producción de PET virgen fuera también a partir de recursos renovables como otra de las opciones de transición tecnológica para la producción de PET virgen en sustitución de los procesos que consumen recursos no renovables. Por su parte el reciclaje del PET para aplicaciones de alto desempeño tecnológico (botellas) actúa como un amortiguador (“buffer”) en la producción de botellas; su papel de sustitución del material virgen, depende de la capacidad de acopio del material desechado y de los incentivos para la implementación de las tecnologías de reciclaje y, por lo tanto de las políticas tecnológicas de las empresas embotelladoras.

Por lo anterior, los bloques de prospectiva y dinámica de sistemas de la metodología propuesta, resultan fundamentales para la construcción y análisis del sistema estudiado.

La realización de las etapas posteriores descritas en la estructura de la metodología, han de continuarse en posteriores trabajos, considerando la disponibilidad de la información requerida y el análisis intensivo de los impactos ambientales como criterios fundamentales en la toma de decisiones sobre la selección de tecnologías y políticas aplicables a la mitigación de las alteraciones ambientales, el pico petrolero u otras problemáticas que puedan definirse en un futuro cercano.

APÉNDICES.

A.1 Dinámica de Sistemas.

El análisis de sistemas se centra en las interrelaciones existentes entre los componentes de un sistema en lugar de observar cada componente de forma aislada. El mejor entendimiento de la complejidad de las interacciones entre los elementos que componen el sistema a menudo redundan en mejores pronósticos acerca del comportamiento del mismo.

La dinámica de sistemas es un modelo de retroalimentación que usa técnicas de simulación para examinar el comportamiento del sistema bajo condiciones variables. Se enfoca en la estructura y comportamiento del sistema, compuesto y caracterizado por la interacción de lazos de retroalimentación

Los modelos de dinámica de sistemas presentan una gran diferencia respecto a otros modelos de equilibrio y optimización, al enfocarse en la dinámica del no-equilibrio y la complejidad de la retroalimentación, a través de reglas de decisión, almacenamientos y flujos. Su aplicación ha sido amplia, desde sistemas de control electromecánico, hasta aplicaciones en fisiología y estudios de políticas energéticas (Sastray & Sterman, 1992).

Principios fundamentales.

La técnica de dinámica de sistemas fue desarrollada en el Massachusetts Institute of Technology (MIT) bajo la dirección de Jay Forrester, quien diseñó inicialmente un prototipo de programa informático (World 1), en respuesta a la demanda, del Club de Roma, de interconexión entre las tendencias y problemas globales; posteriormente lo rediseñó, dando lugar al World 2, modelo documentado y descrito por Forrester (1971) en su obra *World Dynamics*.

El ejemplo más conocido de aplicación de dinámica de sistemas a un estudio prospectivo, lo podemos encontrar en “Los límites del crecimiento: Informe al Club de Roma sobre el Predicamento de la Humanidad”, y publicado por D. H. Meadows y colaboradores del MIT en 1972.

En lugar de definir un sistema como un conjunto de funciones separadas, la dinámica de sistemas lo concibe como un conjunto de flujos (de información, materiales, capital, dinero, energía, etc.). Busca determinar modelos formales sin pretender explicar qué ocurre, sino establecer declaraciones condicionales (basadas en relaciones causa-efecto) que permitan la búsqueda de políticas dirigidas a aumentar la probabilidad de ocurrencia de resultados deseables.

El desarrollo de un modelo de dinámica de sistemas ha de seguir, de acuerdo a Forrester, las siguientes premisas expresadas de forma jerárquica:

- 1) *Límites* bien definidos; es decir, que quede claramente definido lo que es interno y lo que es externo al sistema.

- 2) Definir los *bucles de retroalimentación* (las relaciones causales circulares) que configuran la referencia estructural de los procesos de decisión.
- 3) Definir los *niveles* referidos a “variables estado” o “almacenamientos”; éstos pueden ser medidos o contados en cada instante de tiempo. Se hallan, al igual que las razones de cambio (ratios), contenidos en los bucles.
- 4) Definir las *razones de cambio* (ratios), esto es, las variables que influyen los niveles y constituyen posibilidades de decisión. Representan la actividad del sistema. Una declaración de intenciones (un sistema de políticas) tiene una importante subestructura contenida en él: hay un objetivo, hay una condición observada, y hay una discrepancia entre estas dos que sugiere una acción deseada.

La fortaleza de la DS está en su habilidad para examinar como la estructura del sistema tiene influencia en las decisiones y como el sistema reacciona a estas decisiones en el tiempo.

Con la DS se desarrolló as, una teoría de retroalimentación y control de la información, como medio para evaluar contextos socioeconómicos principalmente. Cuando se conectan dichos elementos, pueden formar flujos de retroalimentación positiva o negativa, que aumentan o disminuyen la sinergia entre los elementos del sistema.

El modelado de sistemas socio-económicos pertenece al tipo de problemas complejos o hipercomplejos. Un problema es de tipo complejo si el modelo cuantitativo requiere un infinito número de ecuaciones interrelacionadas para representar adecuadamente la situación del mundo real. Será de tipo hipercomplejo cuando cada sistema colindante vecindad diferencial es en sí un sistema complejo, y todos los sistemas colindantes son, además, parcialmente independientes.

El comportamiento de sistemas complejos está gobernado por dos procesos fundamentales: la acumulación y la retroalimentación. La acumulación es el proceso de incremento o decremento de los inventarios o “stocks” que opera a ritmos definidos, ocasionando así una respuesta del sistema (retraso) a los cambios naturales y la intervención humana. Estos retrasos son fuentes de inercia en los sistemas complejos y también introducen incertidumbre en el diseño e implementación de acciones administrativas.

La retroalimentación es un mecanismo de causa y efecto, poderoso y penetrante, que opera cuando un cambio en la acumulación puede, en torno a un lazo de causa y efecto, ya sea amplificar o soportar (resistir) el cambio original. El término de retroalimentación “positiva” es usado para describir el mecanismo que amplifica el cambio, y el término de retroalimentación “negativa” se refiere al mecanismo que resiste el cambio.

Las ideas aunque muy básicas, consideran que una situación es compleja en términos de sus flujos entendidos como las relaciones entre elementos del un sistema. Todos los elementos que influyan en el sistema deben considerarse dentro de los límites del mismo. Al conectarse dichos elementos pueden formar redes retroalimentadas y por lo tanto retroalimentar los comportamientos de dichos elementos. La modelación de este tipo de sistemas es importante para la toma de decisiones. En efecto, la diversidad de elementos y

sus relaciones deben considerarse dentro de un modelo de tipo causal analizando causas y efectos dentro de una trayectoria cerrada de acciones e información.

Los modelos combinan técnicas de *adquisición de información*, como las propuestas de inteligencia tecnológica y de minería de datos, simulación numérica y control. Se desarrollan considerando la información como determinística e invariante en el tiempo. De aquí que una definición sobre la DS sea, de una teoría sobre la estructura de los sistemas y su comportamiento dinámico. La estructura no se refiere solamente a los aspectos físicos o fisicoquímicos de un proceso sino también se refiere a las políticas, tangibles e intangibles que dominan la toma de decisiones sobre tales sistemas. De aquí la importancia de la DS en las transiciones tecnológicas, pues un modelo que utiliza la base teórica de la DS, trata de representar, predecir y explicar tales fenómenos.

La dinámica de sistemas ayuda a entender como los cambios en ciertos elementos del sistema de producción tienen influencia en los demás elementos y en el sistema de producción, como un todo. Esta información es valiosa para el rediseño del sistema -sea en la introducción de nuevas tecnologías, enfoque administrativo, o aplicación de políticas- en la medida que permita, a las intervenciones de gestión, ser estratégicamente aplicadas en puntos conocidos de alto apalancamiento.

La caracterización de las transiciones tecnológicas, parte de la complejidad de la estructura de sus elementos y las retroalimentaciones que puedan existir en sus elementos. La salida de uno de los elementos (una tecnología) se vuelve la alimentación de otro y, entonces, los intercambios podrían explicar el cambio del fenómeno, es decir de la transición tecnológica.

Debido a que se pueden determinar los cambios estructurales del modelo y controlar las entradas (perturbaciones del modelo), se está en posición de probar nuevas tecnologías, para simular futuros resultados (salidas). Considerando que se tiene un objetivo y un marco conceptual del presente, se podrá conocer, incorporando las nuevas tecnologías, las implicaciones preferidas y las no deseables para un futuro.

Por lo anterior se puede enunciar como objetivos de la dinámica de sistemas las siguientes premisas:

- Simular en el tiempo el comportamiento de alguna realidad socioeconómica por medio de la integración numérica de un sistema.
- Entender las relaciones causales y las estructuras internas responsables del comportamiento de la trayectoria observada. Para ello se construyen redes con retroalimentaciones positivas y negativas que afectan dicho comportamiento.
- Identificar y entender las llamadas zonas sensibles cuyo comportamiento perturba notablemente al desempeño del sistema.
- Intentar influenciar el comportamiento del sistema actuando sobre las zonas de presión de tal manera de alcanzar el o los objetivos para los que el sistema fue creado.

Con esto, la dinámica de sistemas es un instrumento de ayuda para establecer políticas y estrategias de desarrollo de operación y control del sistema en estudio, ayudando así, a la toma de decisiones en el contexto de las transiciones tecnológicas. En otras palabras, el propósito es ayudar a los tomadores de decisiones a expresar la *representación mental* del sistema bajo estudio, para estructurarlo, e integrarlo a un diagrama causal.

Existen siete pasos para la modelación de un proceso de dinámica de sistemas:

1. Identificación y definición del problema, el cual consiste en describir los comportamientos observados del sistema y sus principales síntomas aparentes en sus modos de comportamiento dinámicos.
2. Conceptualización del sistema que consiste en la identificación de las principales variables, las interrelaciones causales entre ellas y la existencia de retroalimentaciones que explicarían la trayectoria de los comportamientos sintomáticos y evidenciándolos en un diagrama representativo de las retroalimentaciones (loops), llamado el *diagrama de influencias*.
3. La formulación del modelo utilizando el concepto de flujos, la validación de los parámetros, la definición de las ligas causales entre las variables. La no-linealidad causada por las retroalimentaciones positivas, producen un crecimiento exponencial o una declinación hasta un cierto punto en el tiempo futuro.
4. Análisis del comportamiento del modelo, normalmente utilizando integración numérica con software especializado.
5. Evaluación del modelo.
6. Análisis de las políticas resultantes
7. Utilización del modelo e implementación práctica de éste.

El proceso general de modelado en dinámica de sistemas y todas sus etapas son iterativas ya que el modelo debe revisarse y adaptarse continuamente al problema real.

Validación de los modelos.

Los modelos de DS, como todo modelo, son representaciones de la realidad o de la percepción que se tenga de la realidad. En el desarrollo de un modelo, como es sabidose requiere validar y/o ajustar los parámetros del modelo mediante la comparación del comportamiento del modelo con datos históricos, aplicando técnicas, formales o informales, de comparación entre las mediciones y el comportamiento del modelo.

La comparación del comportamiento del modelo con los datos históricos se puede automatizar mediante el ajuste de los parámetros, especificando las series de datos que se quieren comparar y los parámetros a modificar. Vensim® usa la tecnología Reality Check® para probar los modelos de simulación contra la comprensión que se tenga de la realidad. Usando afirmaciones sobre los condicionales y las consecuencias que deben seguir, bajo el esquema “*Para que un modelo o submodelo sea razonable, cuando X debe pasar Y*”. Reality Check® provee una forma sencilla y automatizada de poner a prueba las suposiciones contra el comportamiento del modelo generado, resaltando cualquier violación, lo que mantiene al modelo acoplado a la realidad. Permite así la validación del modelo en base a los datos históricos mediante la obtención del mejor ajuste de los parámetros seleccionados, que cumple con las restricciones establecidas en el proceso.

Con esta herramienta se facilitará visualizar, validar y obtener información sobre el comportamiento del modelo y migrar esta misma información hacia su tratamiento y análisis bajo el enfoque de las sinergias que se identifican en la siguiente sección y que se aplican en la metodología que se desarrolla más adelante.

A.2 Exergía

Exergía y eficiencia exergética.

El fundamento de la termodinámica se encuentra definido en la primera y segunda ley. La primera ley describe la conservación de la energía, mientras que la segunda ley se emplea para la descripción de la calidad de la energía y los materiales. La combinación de estas dos leyes se describe en el concepto del análisis exergía.

La exergía se define como el máximo potencial de trabajo de un material o forma de energía en relación con su medio ambiente. Este potencial de trabajo puede obtenerse por medio de procesos reversibles, sin embargo, en la realidad sólo se encuentra en procesos irreversibles.

El ambiente de referencia se considera tan grande que, sus parámetros no se ven afectados por la interacción con el sistema bajo consideración. El estado de referencia definido (Szargut et al. 1988), presenta 293.15 K y una presión de 1 atm, a menos que se especifiquen otras condiciones.

Transferencia de exergía con interacción de trabajo. Asociada con el ritmo de transferencia de trabajo o trabajo de flecha. Como la exergía está definida como el máximo trabajo posible, es equivalente a la exergía en cualquier aspecto.

Transferencia de exergía con interacción de calentamiento. El ritmo de transferencia de exergía (E) asociado al ritmo de transferencia de energía (Q_i) puede ser calculado mediante:

$$E = \int_A \left(\frac{T - T_0}{T} \right) Q_i dA \quad (\text{A.2.1})$$

Donde A es el área de transferencia de calor, T_0 es la temperatura del ambiente, T es la temperatura a la que se lleva a cabo la transferencia de energía. Cuando existe una distribución uniforme de temperatura $\int Q_i dA = Q_A$ y la ecuación 3.1.1 se convierte a:

$$E = Q_A \left(1 - \frac{T_0}{T} \right) \quad (\text{A.2.2})$$

Transferencia de exergía asociada a corriente de materiales - Exergía física. La exergía física es el trabajo obtenible al someter una sustancia a un proceso reversible desde un estado inicial de presión P y temperatura T , hasta un estado determinado por la presión P_0 y temperatura T_0 del ambiente. Esto puede ser calculado con:

$$E_{ph} = H - H_0 - T_0(S - S_0) \quad (\text{A.2.3})$$

Donde H es la entalpía y S la entropía. La exergía física puede dividirse en un componente térmico y un componente de presión, también llamado componente mecánico.

Usando las leyes del gas ideal en (3.2.3) y considerando una capacidad calorífica isobárica constante (c_p),

$$e_{ph} = c_p \left\{ (T - T_0) - T_0 \ln \frac{T}{T_0} \right\} + RT_0 \ln \frac{P}{P_0} \quad (\text{A.2.4})$$

Para líquidos y sólidos se puede obtener la siguiente formula, considerando constante el calor específico (c):

$$e_{ph} = c \left\{ (T - T_0) - T_0 \ln \frac{T}{T_0} \right\} + v_m (P - P_0) \quad (\text{A.2.5})$$

Donde, v_m es el volumen específico determinado a la temperatura T_0 .

Transferencia de exergía asociada a corriente de materiales - Exergía química. La exergía química es igual a la cantidad máxima de trabajo obtenida cuando la sustancia en consideración se lleva del estado ambiental, definido por T_0 y P_0 , hasta el estado de referencia mediante procesos que involucran transferencia de calor e intercambio de materiales solo con el ambiente.

Para el cálculo de la exergía química de los gases de referencia, que forman en su conjunto la atmosfera de referencia, el trabajo para llevarlos a la presión estándar a partir de la presión parcial del estado de referencia, se debe determinar, mediante:

$$e_{ch} = RT_0 \ln \frac{P_0}{P_{00}} \quad (\text{A.2.6})$$

Donde, P_{00} es la presión parcial del componente en el estado de referencia.

Para componentes puros *no* de referencia la exergía química puede determinarse con la siguiente ecuación:

$$e_{ch} = -\Delta G_0 - \sum_i x_i e_{ch,i}^{in} + \sum_i x_i e_{ch,i}^{out} \quad (\text{A.2.7})$$

Con la función de formación de Gibbs (ΔG_0), la cual puede ser calculada mediante la relación general:

$$\Delta G_0 = \sum_{prod} v_k \Delta g_k - \sum_{react} v_j \Delta g_j \quad (\text{A.2.8})$$

Donde, ν_k , ν_j y Δg_k , Δg_j son los coeficientes estequiométricos y la función molar de formación de Gibbs, respectivamente, j es el j -ésimo co-reactante y k el k -ésimo producto. Para mezclas la exergía química se puede calcular como:

$$e_{ch, mix} = \sum_i x_i e_{ch, i} - RT_0 \sum_i x_i \ln \gamma_i x_i \quad (A.2.9)$$

Donde, x_i la fracción mol del i -ésimo componente, R la constante molar de los gases y γ_i el coeficiente de actividad. Para soluciones ideales el coeficiente de actividad es igual a uno.

Para diversos combustibles la estructura química es desconocida. Para solventar este problema la exergía química para estos combustibles se estima en base al calor neto de combustión (NCV). La relación entre el NCV y la exergía química es:

$$e_{ch} = \phi \cdot NCV \quad (A.2.10)$$

Donde, ϕ puede calcularse con formulas basadas en la composición atómica. Para diversos combustibles y crudos ϕ tiene un valor entre 1.04 y 1.08.

Irreversibilidad.

La irreversibilidad, también llamada destrucción de exergía o perdida de exergía, es calculada mediante el planteamiento del balance de exergía y tomando la diferencia entre todos los flujos de exergía de entrada y salida.

$$I = \sum_{in} E_i - \sum_{out} E_i \quad (A.2.11)$$

Otra forma de cálculo de la irreversibilidad es mediante la ecuación de Gouy-Stodola, en la que el incremento de entropía se multiplica por la temperatura ambiental.

$$I = T_0 \left(\sum_{out} S_j - \sum_{in} S_i \right) = T_0 \Delta S \quad (A.2.12)$$

Eficiencias exergéticas propuestas en la literatura.

Las eficiencias exergéticas a continuación definidas, están acotadas a procesos en estado estacionario en sistemas abiertos. Para el uso apropiado de las eficiencias, las fronteras del sistema deben ser claramente definidas y deben ser elegidas para incluir todas las irreversibilidades asociadas al proceso en consideración.

Eficiencia simple. La forma más sencilla de eficiencia es la eficiencia simple, para su formulación el balance de exergía para los flujos de entrada y salida es definido, donde I es la irreversibilidad.

$$E_{in} = E_{out} + I \quad (A.2.13)$$

La eficiencia simple es la relación de flujo total de exergía de salida y el flujo de exergía total de entrada:

$$\eta = \frac{E_{out}}{E_{in}} \quad (\text{A.2.14})$$

Esta es una definición no ambigua y puede usarse para todas las plantas o unidades de proceso. Desafortunadamente, esta eficiencia da una buena impresión de la perfección termodinámica de un sistema solamente cuando la totalidad de los componentes del flujo de exergía entrante se transforman a otros componentes, como en el caso de las estaciones de potencia. Cuando este no es el caso, los componentes sin transformar dan la falsa impresión del desempeño de la planta o unidad de proceso. La sensibilidad de la eficiencia simple a cambios en las plantas o unidades de proceso se reduce con el incremento en la cantidad de los componentes no transformados.

Eficiencia racional. Esta forma de eficiencia es definida por Kotas (1995) como la relación de la salida de exergía deseada y la exergía usada.

$$\Psi = \frac{E_{desired\ output}}{E_{used}} \quad (\text{A.2.15})$$

$E_{desired\ output}$ es la suma de toda la exergía transferida del sistema, la cual debe ser considerada como la salida deseada, adicionando cualquier subproducto, que sea producido por el sistema. La salida deseada es determinada por medio de examinar la función del sistema E_{used} es la entrada de exergía requerida para que el proceso se lleve a cabo. Si E_{used} y $E_{desired\ output}$ son correctamente identificados en relación a una superficie de control, la que abarca completamente *todas* las irreversibilidades relacionadas al proceso en consideración, entonces, juntas, deberán justificar todas las transferencias de exergía. En otras palabras, no debe existir términos de transferencia de exergía en los balances de exergía que no puedan ser incluidos, ya sea en E_{used} o $E_{desired\ output}$, si existen dichas transferencias serán resultado de irreversibilidades externas, las cuales son excluidas a priori. Por lo que se puede escribir:

$$E_{used} = E_{desired\ output} + I \quad (\text{A.2.16})$$

La ecuación anterior puede ser de ayuda en revisar la selección de los términos para la exergía usada y la salida deseada. Usando (1.4.16) en combinación con (1.4.15) se puede obtener una forma alternativa de la eficiencia racional:

$$\Psi = I - \frac{I}{E_{used}} \quad (\text{A.2.17})$$

La eficiencia racional puede ser aplicado a cualquier sistema, excepto a sistemas estrictamente disipativos, ya que en estos casos no se puede definir el producto deseado.

Eficiencia con exergía en tránsito. Esta forma de eficiencia exergética, fue introducida por Kostenko y ha sido desarrollada por Brodyansky, Sorin y Le Goff (1994). Consiste en una mejora de la eficiencia simple, ya que sustrae los componentes no transformados de las corrientes de entrada y salida. La eficiencia con exergía en tránsito se define como sigue:

$$\eta_e = \frac{E_{out} - E_{tr}}{E_{in} - E_{tr}} \quad (\text{A.2.18})$$

Donde, E_{tr} es la exergía en tránsito. Como explica Sorin et al. (1994) “la exergía en tránsito puede ser considerada como la parte de la exergía que atraviesa un sistema sin tomar parte en ningún cambio mecánico, térmico o químico que se lleve a cabo en el sistema. Hasta cierto punto, la exergía en tránsito es análoga a las especies inertes que atraviesan un reactor químico sin estar involucrados en las reacciones que se llevan a cabo en el reactor (para que la analogía sea totalmente exacta, el reactor debe ser isotérmico e isobárico). La cantidad de exergía en tránsito no afectara la eficiencia termodinámica del proceso y deberá ser sustraída de los flujos de exergía de entrada y salida antes de que la eficiencia se calculada”. Si (1.4.18) es especificada para los diferentes componentes de exergía,

$$\eta_e = \frac{\sum_q (E_{out,q}^Q - E_{tr,q}^Q) + \sum_w (E_{out,w}^W - E_{tr,w}^W) + \left[\sum_b \sum_j (E_{out,b}^{o,j} - E_{tr,b}^{o,j}) \right] + \sum_b (E_{out,b}^{\Delta p, \Delta T} - E_{tr,b}^{\Delta p, \Delta T})}{\sum_q (E_{in,q}^Q - E_{tr,q}^Q) + \sum_w (E_{in,w}^W - E_{tr,w}^W) + \left[\sum_b \sum_j (E_{in,b}^{o,j} - E_{tr,b}^{o,j}) \right] + \sum_b (E_{in,b}^{\Delta p, \Delta T} - E_{tr,b}^{\Delta p, \Delta T})} \quad (\text{A.2.19})$$

Donde, q y w son índices de flujo de calor y flujos, del mismo tipo, de trabajo, respectivamente, j es el índice de todos los componentes materiales del sistema y b es el índice de las partes de las corrientes de materia en las entradas y salidas del sistema.

Para obtener la exergía en tránsito de un flujo de energía dado (Q , W) se debe considerar el mínimo de la exergía global del tipo dado de entradas y salidas del sistema.

$$E_{tr,q}^Q = \min [E_{in,q}^Q; E_{out,q}^Q] \quad (\text{A.2.20})$$

$$E_{tr,w}^W = \min [E_{in,w}^W; E_{out,w}^W] \quad (\text{A.2.21})$$

Donde la notación $\min[x; y]$ significa que se usa el valor mínimo de los flujos de exergía x o y , el que resulte más pequeño de los dos.

Para definir la exergía en tránsito en cada flujo de material es necesario identificar las partes de las corrientes de materia a la entrada del sistema a partir de la cual se forman las corrientes de salida como resultado de la división y separación o a la salida del sistema en caso de mezclado. La exergía química en tránsito está definida por la sumatoria de la exergía química de los componentes materiales que existen simultáneamente en los flujos a la entrada y salida del sistema. Para la exergía química en tránsito tenemos,

$$\sum_b E_{tr,b}^o = \sum_b \sum_j E_{tr,b}^{o,j} = \sum_b M_b \left(\sum_j \min[e_{in,b}^{o,j}; e_{out,b}^{o,j}] \right) \quad (A.2.22)$$

Los componentes mecánicos y térmicos de los flujos de exergía se definen como

$$E_{tr,b}^{\Delta p, \Delta T} = M_b \min[e_{in,b}(p_{\min}, T_x); e_{out,b}(p_{\min}, T_x)] \quad (A.2.23)$$

Donde $x = \min$, cuando $T_{in}, T_{out} \geq T_0$; $x = \max$, cuando $T_{in}, T_{out} \leq T_0$ y $x = T_0$, cuando $T_{in} \leq T_0$, $T_{out} \geq T_0$ ó $T_{in} \geq T_0$, $T_{out} \leq T_0$. Cuando no se lleva a cabo una división del componente físico en un componente térmico y un componente de presión, se puede usar la siguiente formula:

$$E_{tr,b}^{ph} = \min[E_{in,b}^{ph}; E_{out,b}^{ph}] \quad (A.2.24)$$

Por lo anterior, la eficiencia simple es de uso limitado para plantas y unidades de proceso y puede llevar a falsas conclusiones. Sin embargo, puede ser útil para el diseño de productos, como es el caso del cálculo del grado de perfección acumulativo, cuando todo el flujo de exergía entrante es transformado en los productos deseados. (En este caso la eficiencia racional y la eficiencia con exergía en tránsito, se reducen a la eficiencia simple).

La eficiencia racional es una forma de eficiencia, fácil de aplicar y que da una buena visión interna del proceso. Para definir la salida deseada y el uso de la exergía para una unidad es necesario ser claros sobre la función de la unidad en el contexto de la planta.

La eficiencia con exergía en tránsito es un método directo para una apropiada definición de eficiencia, que da una respuesta no ambigua. Sin embargo, los cálculos pueden volverse muy complejos.

El cálculo de la exergía permite la identificación de las irreversibilidades presentes en un proceso y la medición adecuada de la eficiencia del mismo, esto da lugar a poder cuantificar un variable de toma de decisión para un problema complejo que puede ser, por ejemplo, la selección de rutas tecnológicas, donde los métodos multicriterio permiten enlazar este criterio, la exergía, a otras variables de tipo tecnológico, económico, o incluso, social.

A.3 Métodos Multicriterio.

Los métodos multicriterio son herramientas desarrolladas en el campo de la teoría de decisiones como ayuda a la toma de decisiones. Estas técnicas implican el modelado sistemático de las preferencias para resolver en forma explícita la selección entre diversas opciones que involucran un cierto número de objetivos usualmente en conflicto. Buscan proveer una base racional para la clasificación de opciones mediante la agregación de información dispar en una base de evaluación común (World Bank).

Los métodos multicriterio abarcan una gran familia de métodos con diversos enfoques, desde los sistemas más simples hasta aquellos de alta complejidad. El razonamiento común

de estos métodos es el establecer un amplio marco de trabajo para la evaluación del impacto de una decisión, simplificando esta decisión a sus elementos constituyentes. En la mayoría de los casos se requiere el desarrollo de una serie de alternativas de solución (las opciones) al problema en cuestión, evaluando toda la información relevante sobre el desempeño de los criterios que juzgan el valor o utilidad de la opción, y comparando la importancia relativa de los criterios involucrados para resolver el problema.

Estas técnicas proveen lo necesario para la incorporación de intangibles, permitiendo la consideración de criterios cualitativos y cuantitativos en el mismo modelo, y a asistir a la estructuración y compensación de criterios en conflicto por naturaleza en la toma de decisiones complejas

Enfoques con decisiones multicriterio.

Los principales beneficios de los métodos Multicriterio, descritos en la literatura, son su conveniencia y fácil uso, ya que proporcionan una forma eficiente para resolver problemas que involucran diversos criterios a considerar.

Las técnicas de métodos multicriterio se clasifican en tres grupos:

- Teoría de la utilidad de múltiples criterios (MAUT) (por sus siglas en inglés).
- Métodos de sobre clasificación OM (Outranking Methods).
- Métodos interactivos.

Teoría de la utilidad de múltiples criterios (MAUT). Consisten en la agregación de factores desde el punto de vista de una función objetivo a optimizar. La función objetivo, para el tomador de decisiones, es el punto principal para el análisis. Los procedimientos para construir la función objetivo, consumen tiempo y requieren de un análisis cuidadoso y consistente sobre las preferencias del tomador de decisiones. La suposición que subyace, es que las funciones son restrictivas. Sin embargo, si la función de utilidad está disponible para el tomador de decisiones, el problema se reduce a un simple caso de maximización directa de la función objetivo.

MAUT, esta soportada por paquetes de computo, tales como: “Logical Decision”; para Análisis Jerárquico Multicriterio (AHP).

En el Análisis Jerárquico Multicriterio (Analytic Hierarchy Process, AHP), el problema es estructurado como una jerarquía donde el objetivo general se divide en los criterios que lo constituyen. Estos criterios deben dividirse en criterios de bajo nivel hasta que la jerarquización resultante provea una representación detallada de las prioridades (Saaty, 1980).

En otras palabras, tiene por objeto la descomposición del problema en niveles jerárquicos para determinar en forma clara, a través de la síntesis de los valores de los agentes de decisión, una medida global para cada una de las alternativas, priorizándolas o clasificándolas hasta el final.

La obtención de las preferencias se lleva a cabo mediante la determinación de los pesos locales para cada criterio. Específicamente, si el criterio C_j y C_k son estructurados bajo el mismo criterio de alto nivel, al demandado se le solicita dé su juicio, considerando la importancia relativa de estos dos criterios con respecto al de mayor nivel. Este juicio es modelado en una escala verbal, la cual se le asigna un valor numérico entero a_{jk} . Por construcción la importancia relativa del criterio C_k sobre el criterio C_j está definida como el recíproco de a_{jk} , es decir, $a_{kj} = 1/a_{jk}$. La comparación por pares define una matriz A a partir de la cual los pesos locales $w = (w_1, \dots, w_n)$ se obtienen mediante cálculos con el eigenvector.

Una vez que los pesos locales han sido determinados, los pesos de los criterios se calculan por medio de la distribución de peso del objetivo mayor (el cual, por definición, es igual a uno) disminuyendo en proporción a los pesos locales. Esto es, si, v_k denota el peso del criterio C_k y w_{kj} es el peso local de su subcriterio C_j , el peso de C_j es $v_j = \sum w_{kj} v_k$ donde la sumatoria se lleva a cabo sobre el criterio C_k bajo el cual se estructura C_j . Los pesos para las alternativas se obtienen de forma análoga, a excepción aquellos pares de importancia relativa que sean interpretados como comparaciones de desempeño.

La popularidad del AHP radica en su simplicidad, flexibilidad, carácter intuitivo, y la habilidad para el manejo de criterios cualitativos y cuantitativos en el mismo ámbito de trabajo, a pesar de presentar deficiencias teóricas y prácticas, como la a) „jerarquización reversible“ (Belton & Gear, 1983; Dyer, 1990; Salo & Hämäläinen, 1997), donde al introducir nuevas alternativas puedan cambiar los resultados a aplicar en otras alternativas en base los juicios iniciales.; y b) „gran número de comparación de pares“, completar la comparación de pares requiere de una gran cantidad de juicios subjetivos.

Aún con estas importantes deficiencias, se han desarrollado una gran cantidad de aplicaciones de AHP en predicción (Saaty & Vargas, 1991), priorización tecnológica (Prasad & Somasekhara, 1990; Hartwich & Jansen, 2001), administración de agendas de I&D (Lockett et al., 1986) y estrategias de desarrollo tecnológico (Ramanathan, 1999). Este análisis también se soporta por el desarrollo de paquetes de cómputo tales como “Expert Choice” y “Criterium decision Plus” (Saaty, 1994).

Métodos de sobre clasificación (OM). Estos métodos se construyen, generalmente, a través de una relación de sobre clasificación, la cual representa las preferencias del tomador de decisiones. Los métodos de sobre clasificación, suponen que el tomador de decisiones puede, quiere y sabe definir los cambios entre los objetivos (Roy et al, 1993), esto implica que la no agregación de la función de utilidad puede derivarse. Los rangos entre los cuales se analizan los criterios, estarán en base a la comparación entre pares de éstos.

Los paquetes de cómputo que utilizan este tipo de metodología son: PROMCALC-GAIA (Brans and Vincke, 1985), ELECTRE (Roy, 1973), MACBETH (Bana e Costa, 1997), entre otros.

Los OM, operan con funciones escalares entre las posibles alternativas de cada criterio, cuando el tomador de decisiones proporciona pesos a los criterios. El tomador de decisiones

juega y analiza con un número dado de parámetros los cuales establecen las relaciones de sobre clasificación. En general una metodología OM consiste en: la construcción de la relación de sobre clasificación seguida de la explotación de estas relaciones.

Entre otras ventajas de los métodos multicriterio, se encuentra que: se pueden manejar relaciones complejas y se pueden utilizar variables cualitativas en el problema de toma de decisiones.

Los alcances comunes en esta categoría de modelos incluyen la incorporación de varias metas y/o criterios. Las metas múltiples se alcanzan ya sea simultánea o secuencialmente utilizando una estructura priorizada a varios niveles. Este tipo de modelos, debe considerarse como una importante aportación de la escuela francesa, que tienen por característica las nociones de sobre clasificación que representan las preferencias establecidas claramente por el tomador de decisiones, considerando la información de la que dispone. La relación puede no ser ni completa ni transitiva. Inmediatamente después, la segunda etapa consiste en operar estas relaciones de sobre clasificación. Dentro de esta escuela, también pueden considerarse métodos que requieren de información complementaria sobre las preferencias del tomador de decisiones.

Así, la ayuda multicriterio a la toma de decisiones no consiste solamente en una familia de técnicas de agregación de preferencias consideradas sobre un conjunto dado. Se trata de modelar las preferencias y definir un conjunto de decisiones.

Ambos metodologías ayudan a que los tomadores de decisión, relacionen los factores intangibles o cualitativos a tangibles, de lo subjetivo a lo objetivo ligando ambos para sus diferentes propósitos. También ofrece una manera de integrar la complejidad, con objetivos factibles, estableciendo sus prioridades y determinando un valor global para cada alternativa de solución. Utiliza bases matemáticas que utilizan la consistencia de los juicios involucrados en la selección final.

La metodología PROMETHEE, que pertenece a los métodos OM, por su parte toma en cuenta varias condiciones que son (Brans, 2002, 1995, 1992, 1984):

- Consideración de las diferencias entre las evaluaciones de las acciones de cada criterio.
- Eliminación de los efectos de escala entre criterios enunciados de manera subjetiva u objetiva.
- Incomparabilidad admitida. Conceptualizando las comparaciones de sobre clasificación en: preferencia estricta, indiferencia e incomparabilidad que permitirá la búsqueda de información y las funciones de utilidad para y del tomador de decisiones.
- Aportación de información suplementaria.
- Aspectos considerados en conflicto de los criterios.
- Interpretación correcta de los pesos o importancia de cada criterio

Tanto que con los métodos mencionados anteriormente es posible abordar la evaluación de problemas de decisión complejos, los cuales presentan la estructura general, de lo que se ha llamado “El problema multicriterio”; considerando el siguiente problema:

$$\max \{g_1(a), g_2(a), \dots, g_j(a), \dots, g_k(a) | a \in A\}, \quad (\text{A.3.1})$$

Donde, A es un conjunto finito de alternativas $\{a_1, a_2, \dots, a_i, \dots, a_n\}$ y $\{g_1(\cdot), g_2(\cdot), \dots, g_i(\cdot), \dots, g_n(\cdot)\}$ un conjunto de criterios de evaluación. No existe objeción en considerar maximizar unos criterios y minimizar otros. La expectativa del tomador de decisiones es identificar una alternativa que optimice todos los criterios.

Regularmente este es un problema matemático con más de una solución, ya que no existen alternativas para optimizar todos los criterios simultáneamente, a estas soluciones se les llama óptimos de Pareto. Sin embargo la mayoría de los problemas humanos tienen una naturaleza de multicriterio.

De acuerdo con la variedad de las aspiraciones humanas, no tiene sentido, y a menudo es injusto, tomar una decisión en base a un solo criterio de evaluación. En la mayoría de los casos, al menos los criterios tecnológicos, económicos, ambientales y sociales deben ser siempre tomados en cuenta. Por lo tanto los problemas multicriterio son de gran importancia y requieren un tratamiento apropiado.

La información básica de un problema multicriterio (A.3.1) consiste en la evaluación de la Tabla A.3.1.

a	$g_1(\cdot)$	$g_2(\cdot)$	\dots	$g_j(\cdot)$	\dots	$g_k(\cdot)$
a_1	$g_1(a_1)$	$g_2(a_1)$	\dots	$g_j(a_1)$	\dots	$g_k(a_1)$
a_2	$g_1(a_2)$	$g_2(a_2)$	\dots	$g_j(a_2)$	\dots	$g_k(a_2)$
\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots	\ddots	\vdots
a_j	$g_1(a_j)$	$g_2(a_j)$	\dots	$g_j(a_j)$	\dots	$g_k(a_j)$
\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots	\ddots	\vdots
a_n	$G_1(a_n)$	$g_2(a_n)$	\dots	$g_j(a_n)$	\dots	$g_k(a_n)$

Tabla A.3.1 Información básica del problema multicriterio

Al no existir una solución que optimice todos los criterios, será seleccionada una solución de *compromiso*. La mayoría de los problemas multicriterio presentan esta naturaleza.

La solución de un problema multicriterio no solo depende de la información básica incluida en la tabla de evaluación, sino también, del tomador de decisión en si mismo, lo que implica que la mejor solución comprometida dependerá de las *preferencias* de cada tomador de decisiones.

En consecuencia, se requiere *información adicional* que represente estas preferencias que ayuden al tomador de decisiones.

La relación natural de dominación asociada al problema multicriterio está definida como:

Para cada $(a, b) \in A$:

$$\begin{cases} \forall j : g_j(a) \geq g_j(b) \\ \exists j : g_j(a) > g_j(b) \end{cases} \Leftrightarrow aPb, \\ \forall j : g_j(a) = g_j(b) \Leftrightarrow aIb, \\ \begin{cases} \exists s : g_s(a) > g_s(b) \\ \exists r : g_r(a) < g_r(b) \end{cases} \Leftrightarrow aRb \end{cases} \quad (\text{A.3.2})$$

Donde, P , I y R representan la *preferencia*, *indiferencia* e *incomparabilidad* respectivamente. Una alternativa es mejor que otra si por lo menos es tan buena como la otra en todos los criterios. Si una alternativa es mejor en el criterio s y la otra es mejor en el criterio r , es imposible decidir cuál es la mejor sin información adicional. Ambas alternativas son, por lo tanto, incomparables.

Las alternativas que no son dominadas por ninguna otra son llamadas soluciones eficientes. Dada una tabla de evaluación para un problema multicriterio en particular, la mayoría de las soluciones (comúnmente todas) son eficientes. La relación de dominio es muy pobre en P e I . Cuando una alternativa es mejor en un criterio, la otra es regularmente mejor en otro. En consecuencia, la incomparabilidad se presenta para la mayoría de comparaciones en pares, por lo que es imposible decidir sin información adicional. Esta información puede incluir por ejemplo:

- Pesos que representen la importancia relativa de los criterios;
- Preferencias asociadas a cada comparación entre criterios;
- Umbrales que determinan los límites de preferencia;
- Etc.

PROMETHEE (Preference Ranking Organization METHod for Enrichment Evaluation)

La información adicional que se requiere para emplear PROMETHEE es particularmente clara y entendible, ésta consiste en: Información entre los criterios e Información dentro de cada criterio.

Información entre los criterios. Se debe completar la Tabla A.3.2, donde $\{w_j, j = 1, 2, \dots, k\}$ representa los pesos de importancia relativa de los diferentes criterios. Estos pesos deben ser números positivos, e independientes de las unidades de medición de los criterios.

$g_1(\cdot)$	$g_2(\cdot)$...	$g_j(\cdot)$...	$g_k(\cdot)$
W_1	W_2	...	w_j	...	w_k

Tabla A.3.2 Pesos de relativa importancia

El peso más elevado, representa el criterio con mayor importancia. Estos pesos deben estar normalizados, es decir:

$$\sum_{j=1}^k w_j = 1 \quad (\text{A.3.3})$$

Información dentro de cada criterio. La estructura de preferencias de PROMETHEE está basada en la comparación de pares de alternativas, evaluadas en los criterios. Se considera la desviación entre las evaluaciones de dos alternativas. Para desviaciones pequeñas, el tomador de decisiones asignará una preferencia pequeña para la mejor alternativa, e incluso puede considerar que no hay preferencia alguna si considera que la desviación es insignificante. A mayor desviación, mayor preferencia. PROMETHEE considera que las preferencias son números reales que varían entre 0 y 1

Clasificación PROMETHEE I y II. El método PROMETHEE está basado en la comparación entre pares. Definir los índices de preferencia agregada y flujos de sobre clasificación
Sobre los índices de preferencia agregada, sean $(a, b) \in A$, y

$$\begin{cases} \pi(a, b) = \sum_{j=1}^k P_j(a, b)w_j \\ \pi(b, a) = \sum_{j=1}^k P_j(b, a)w_j \end{cases} \quad (\text{A.3.4})$$

Donde $\pi(a, b)$ expresa en qué grado a tiene preferencia sobre b en todos los criterios y $\pi(b, a)$ como b tiene preferencia sobre a . En la mayoría de los casos hay criterios para los cuales a es mejor que b , y criterios para los cuales b es mejor que a , en consecuencia, $\pi(a, b)$ y $\pi(b, a)$ son usualmente positivos. Las propiedades que aplican para $(a, b) \in A$

$$\begin{cases} \pi(a, a) = 0, \\ 0 \leq \pi(a, b) \leq 1, \\ 0 \leq \pi(b, a) \leq 1, \\ 0 \leq \pi(a, b) + \pi(b, a) \leq 1 \end{cases} \quad (\text{A.3.5})$$

Es claro que:

$$\begin{cases} \pi(a, b) \approx 0 \text{ implica débil preferencia global de } a \text{ sobre } b \\ \pi(a, b) \approx 1 \text{ implica fuerte preferencia global de } a \text{ sobre } b \end{cases} \quad (\text{A.3.6})$$

Cada alternativa se enfrenta a $(n-1)$ alternativas en A . Definiendo los dos flujos de sobre clasificación:

- Flujo positivo de sobre clasificación

$$\phi^+(a) = \frac{1}{n-1} \sum_{x \in A} \pi(a, x) \quad (\text{A.3.7})$$

- Flujo negativo de sobre clasificación

$$\phi^-(a) = \frac{1}{n-1} \sum_{x \in A} \pi(x, a) \quad (\text{A.3.8})$$

El flujo de sobre clasificación positivo expresa como la alternativa *atiene prioridad sobre* las otras. A mayor $\phi^+(a)$, mejor la alternativa.

El flujo de sobre clasificación negativo expresa como la alternativa *a es superada* por las otras, A menor $\phi^-(a)$, mejor la alternativa.

PROMETHEE I. Clasificación parcial. La clasificación parcial PROMETHEE (P^I, I^I, R^I) se obtiene a partir de los flujos de sobre clasificación positivos y negativos. De ambos flujos no necesariamente se obtiene el mismo ordenamiento. PROMETHEE I es la intersección de estos flujos,

$$\left\{ \begin{array}{l} aP^I b \text{ si } \left\{ \begin{array}{l} \phi^+(a) > \phi^+(b) \text{ y } \phi^-(a) < \phi^-(b), \text{ ó} \\ \phi^+(a) = \phi^+(b) \text{ y } \phi^-(a) < \phi^-(b), \text{ ó} \\ \phi^+(a) > \phi^+(b) \text{ y } \phi^-(a) = \phi^-(b); \end{array} \right. \\ aI^I b \text{ si } \phi^+(a) = \phi^+(b) \text{ y } \phi^-(a) = \phi^-(b); \\ aR^I b \text{ si } \left\{ \begin{array}{l} \phi^+(a) > \phi^+(b) \text{ y } \phi^-(a) > \phi^-(b), \text{ ó} \\ \phi^+(a) < \phi^+(b) \text{ y } \phi^-(a) < \phi^-(b). \end{array} \right. \end{array} \right. \quad (\text{A.3.9})$$

Donde, P^I, I^I, R^I hacen referencia a la preferencia, indiferencia e incompatibilidad respectivamente.

Cuando $aP^I b$, un „poder“ mayor de a es asociado a una debilidad menor de a con respecto a b . La información de ambos flujos de sobre clasificación es consistente y debe considerarse como certera.

Cuando $aI^I b$, ambos flujos son iguales.

Cuando $aR^I b$, una influencia mayor de una alternativa está asociada a una debilidad menor de otra. Esto sucede cuando a es buena en un conjunto de criterios en los que b es débil y viceversa, b es buena en unos criterios en los que a es débil. En estos casos la información proveniente de los flujos no es consistente.

PROMETHEE II. Clasificación completa. PROMETHEE II consiste en (P^II, I^II) la clasificación completa, la cual puede considerarse como el *flujo neto* de sobre clasificación,

$$\phi(a) = \phi^+(a) - \phi^-(a) \quad (\text{A.3.10})$$

El cuál es el balance entre los flujos de sobre clasificación positivo y negativo. A mayor flujo neto de sobre clasificación, mejor la alternativa, es decir,

$$\begin{cases} aP^II b \text{ si } \phi(a) > \phi(b) \\ aI^II b \text{ si } \phi(a) = \phi(b) \end{cases} \quad (\text{A.3.11})$$

Cuando se considera la clasificación de PROMETHEE II, todas las alternativas son comparables. No permanecen las incomparabilidades, pero la información resultante puede ser más discutible, ya que se pierde mayor cantidad de información.

Las propiedades que permanecen son,

$$\begin{cases} -1 \leq \phi(a) \leq 1, \\ \sum_{x \in A} \phi(a) = 0. \end{cases} \quad (\text{A.3.12})$$

En las aplicaciones a desarrollarse se recomienda llevar acabo ambos análisis, PROMETHEE I y PROMETHEE II. La clasificación total es de uso fácil, pero el análisis de incomparabilidades regularmente ayuda a la toma de una decisión apropiada.

Los métodos multicriterio pueden ser analizados respecto a diversas características, como su dominio de aplicación, la incorporación de la información de preferencias, el uso de procedimientos y derivación de resultados. En general es posible anticipar que no existe un método “ideal”, que cubra todos los requerimientos relevantes, debido a los inevitables intercambios que se requieren entre la transparencia de la metodología, el reconocimiento de incertidumbres y la habilidad para considerar la eficiencia relativa de la las alternativas en función del consumo de recursos y producción de salidas.

A.4 Intersecciones entre disciplinas

Dinámica de sistemas y análisis de ciclo de vida.

Como se ha mencionado la dinámica de sistemas es un modelo de retroalimentación que usa técnicas de simulación para examinar el comportamiento del sistema cuando este está sometido a condiciones variables, se enfoca en la estructura y comportamiento del sistema compuesto por la interacción lazos de retroalimentación. Estos modelos son diferentes de otros modelos de equilibrio y optimización al enfocarse en la dinámica del no-equilibrio y la complejidad de la retroalimentación, por medio de reglas de decisión, almacenamientos y flujos. Su gran fortaleza radica en su habilidad para examinar como la estructura del sistema influye en las decisiones y como el sistema reacciona a estas decisiones con el tiempo.

Por su parte el análisis de ciclo de vida ha ganado aceptación como un método que permite la cuantificación de impactos ambientales y la evaluación de opciones de mejora a lo largo del ciclo de vida de los procesos, productos o actividades. Históricamente, el análisis de ciclo de vida ha sido aplicado a productos; sin embargo, se han empleado de forma reciente en la identificación de opciones sustentables en la selección, diseño y optimización de procesos. La SETAC (Society for Environmental Toxicology and Chemistry) define al análisis del ciclo de vida como: “un proceso para evaluar las cargas ambientales asociadas a un producto, proceso o actividad mediante la identificación y cuantificación de la energía y materiales usados, y los desechos emitidos al ambiente; para evaluar el impacto del uso de esa energía, materiales y emisiones en el ambiente; y para identificar y evaluar las oportunidades de mejoras ambientales” (Consoli et al. 1993). La norma ISO 14040:2006 da una definición sintética: “compilación y evaluación de entradas, salidas y el potencial de impacto ambiental de un producto a lo largo de su ciclo de vida” y aclaran que si bien se establece una normatividad, esta no es rígida por lo que permite la incorporación de técnicas adicionales para fortalecerla.

A partir de esta aclaración que se hace en la norma ISO 14040, si consideramos lo dicho por Ackoff (2003) “...muchas de las soluciones son para problemas que ya no existen, o por lo menos ya no existen ahora de la forma en que fueron planteados. Como resultados de esto, cada vez uno se va quedando más y más rezagado”, se ve clara la necesidad de vincular y fortalecer la evaluación y enfoque de problemas mediante la vinculación de técnicas provenientes de diversos campos del conocimiento.

En los párrafos anteriores, se han mencionado dos campos, iniciales, a vincular para dar una fortaleza mayor a los resultados obtenidos de forma independiente, dinámica de sistemas y análisis de ciclo de vida. Si contrastamos los enfoques de cada área es posible apreciar cómo se complementan, situación que se manifiesta casi de forma inmediata, esto es, el análisis de ciclo de vida presenta la situación, impactos y oportunidades de un proceso, producto o actividad, en un momento dado, sin embargo, como lo menciona Ackoff, las soluciones que se pueden proponer corren el riesgo de ser invalidas por la evolución del sistema en el tiempo, que es precisamente el enfoque de la dinámica de sistemas, es decir, el estudio de la evolución en el tiempo de los sistemas.

Exergía y análisis de ciclo de vida. Ciclo de vida Exergético (ELCA).

El concepto de exergía, relacionado a la disponibilidad, es la herramienta termodinámica que expresa la calidad de la energía: es la cantidad de trabajo que puede ser obtenido de un estado de no equilibrio con respecto a un estado de equilibrio con el ambiente, mediante un proceso reversible inicialmente adiabático hasta T_0 , isotérmico hasta P_0 y finalmente a las condiciones del ambiente.

En otras palabras, la exergía es la máxima cantidad de trabajo que se puede producir por una corriente de materia, energía ó trabajo, mientras alcanza el equilibrio con el ambiente de referencia; esta puede vincularse con los impactos ambientales mediante el análisis exergético debido a que las irreversibilidades en el proceso pueden ser conocidas y como consecuencia, pueden ser encaminadas a un mejor comportamiento para incrementar su eficiencia energética. De lo anterior se observa que es un aspecto importante en el desarrollo

sustentable, “la minimización de las irreversibilidades ocasionadas por el uso de recursos no renovables”.

En general, el cálculo de la eficiencia exergetica, en alguna de sus definiciones, permite el diagnóstico del uso de los flujos y reservas de recursos en los procesos, esto es conocido como análisis de exergía, con el cual se busca la minimización del consumo de recursos lo que de forma evidente maximiza la eficiencia y sustentabilidad de los procesos.

El análisis de exergía y el análisis del ciclo de vida se han desarrollado, en general, de forma separada. El análisis de exergía al no estar dentro del marco de referencia descrito por Consoli et al, (1993), se le puede considerar como una omisión por parte del LCA, ya que existe una relación directa entre la exergía y el problema medio ambiental del agotamiento de los recursos, ya que, la irreversibilidad en todo ciclo de vida permite evaluar el grado de perfección termodinámica (Cornelissen, 1997; Exergetic Life Cycle Analysis). Como ya se ha mencionado anteriormente, para el desarrollo sustentable, la destrucción de las reservas de exergía de los recursos naturales debe minimizarse a un nivel en el cual no exista daño al ambiente y se garantice el suministro de exergía a las generaciones futuras, por lo tanto, el concepto de exergía tiene la capacidad de servir como base para calificar la sustentabilidad del aspecto tecnológico dentro del desarrollo sustentable debido a que todos los flujos pueden ser evaluados en la misma escala, por lo que es posible afirmar que la exergía es primordial en la medición de la sustentabilidad de la tecnología como ejemplifican Gong y Wall (2001), o incluso puede ser considerada como la forma de medición del aspecto tecnológico del *desarrollo sustentable*.

En este sentido, Dewulf et al. estudió y cuantificó los flujos de exergía, y por lo tanto la evaluación de la sustentabilidad de diversos materiales, tecnologías y procesos, en términos de la eficiencia exergetica (Dewulf et al., 2000, 2001, 2004).

En general, la evolución del análisis de ciclo de vida a *análisis de ciclo de vida exergetico* genera un enlace entre la forma de cuantificar del desarrollo sustentable, que está cobrando mayor fuerza con el tiempo, mediante el uso del balance y análisis de exergía, con la dinámica de sistemas. Esto es, bajo el mismo argumento establecido para la vinculación entre DS y ACV, se sustituye o mejor dicho, evoluciona el ACV por la metodología establecida por Cornelissen, ELCA.

Dinámica de sistemas y Análisis Multicriterio.

Brans et. al., (1997) presentó una metodología para el control de estructuras (sistemas) socioeconómicas complejas e hipercomplejas. Una estructura es socioeconómica se considera compleja si el modelamiento cuantitativo requiere un número infinito de ecuaciones para representar adecuadamente la situación real. El problema es hipercomplejo cuando cada vecindario diferencial es un sistema complejo, siendo cada uno parcialmente independientes. En esta metodología el proceso de control iterativo, combinando los principios de la dinámica de sistemas, la teoría de control y los métodos de ayuda a la toma de decisiones identifican que el análisis de la información recolectada provee de los valores correctos de los parámetros e interacciones entre variables en el periodo de observación, sin embargo, los modelos fallan en cuanto son usados para la predicción, debido a los rápidos cambios en las estructuras socioeconómicas. Por otra parte, establecen que la combinación

de dinámica de sistemas con métodos de criterios múltiples, por ejemplo el método PROMETHEE, apoyados en un adecuado modelado y simulación puede contribuir significativamente al control de sistemas socioeconómicos, donde, el diagrama causal es esencial para entender las relaciones entre los diferentes elementos del sistema, con el fin de diseñar y controlar el sistema hacia un futuro deseable. De esta representación se establece el modelo formal de DS, en el cual se pueden simular diferentes estrategias, las cuales deben ser evaluadas en diversos criterios, para seleccionar la mejor estrategia para controlar el sistema. El enfoque del modelo debe evolucionar en forma iterativa e interactiva para permitir dar realce a intervalos regulares de tiempo la visión de futuro. Lo que es posible mediante el monitoreo continuo del sistema. En cada revaloración, la representación mental, el diagrama de influencias y el modelo cuantitativo puede ser modificado.

Prospectiva: Su papel en relación con el ciclo de vida, la dinámica de sistemas y la exergía.

En las secciones anteriores, se ha puesto de manifiesto la sinergia existente entre, el análisis de ciclo de vida, la dinámica de sistemas y la exergía, estableciendo para estas sinergias la DS como elemento de estructura, sin embargo, no se ha mencionado como se establecen las relaciones entre las variables que constituyen el modelo de simulación y los criterios de evaluación.

Es en esta sinergia donde se manifiesta la vinculación con la prospectiva, la cual como ha sido establecido anteriormente, tiene como objetivo la generación de escenarios posibles y probables mediante la identificación de las relaciones entre las variables del sistema y sus tendencias, minimizando la influencia en el sistema de la incertidumbre y el azar.

Lo anterior se representa claramente cuando, a partir del gráfico de influencias (representación gráfica de los diversos tipos de relación que tienen las variables entre sí) para un sistema dado, se puede generar el diagrama causal (el cual es una representación de los elementos claves del sistema, las relaciones entre ellos y los bucles de retroalimentación del sistema) necesario para la simulación en dinámica de sistemas. A esto hay que agregar la identificación de las variables clave, aquellas que son esenciales para la evolución de un sistema, las cuales permiten visualizar donde establecer los controles necesarios para la estabilidad del sistema en los diversos escenarios a evaluar posteriormente mediante la evaluación con criterios múltiples.

En resumen, y bajo la idea de que todas las propiedades de un sistema dado no pueden ser completamente determinadas o explicadas por las partes que lo componen, se ha presentado una visión de las sinergias entre las principales áreas del conocimiento involucradas en la presente investigación -prospectiva, dinámica de sistemas, exergía y métodos multicriterios- que tienen como fin la generación y aplicación de una metodología de carácter más incluyente para la evaluación del ciclo de vida, tomando las ventajas y así, mitigar las deficiencias de cada disciplina en particular, lo cual permite visualizar el principio general del holismo, resumido por Aristóteles: *“El todo es mayor que la suma de sus partes”*.

A.5 Aplicaciones desarrolladas

A cada una de las disciplinas descritas en la sección anterior, de forma individual se les considera metodologías completas bajo su marco de referencia o enfoque, sin embargo son empleadas con un objetivo en común que es el desarrollo sustentable.

Así se encuentran aplicaciones de administración y planeación de recursos como el trabajo desarrollado por Wang X. et. al. (2010) en el cual hacen notar la complejidad de las interacciones de los ciclos de retroalimentación en el aprovechamiento del agua en el entorno urbano; Li Fu Jia, Dong Suo Cheng y Li Fei proponen un método de análisis (aplicando dinámica de sistemas) del efecto ambiental y económico de la eco-agricultura y visualizando su tendencia mediante la simulación del sistema en el largo plazo; la inclusión de consideraciones adicionales como la realizada por Montero (2006), la cual incorpora al análisis de exergía el factor de toxicidad y contaminación de efluentes a fin de determinar el potencial de mejoramiento exergoecológico; en la optimización de procesos como el realizado por Fonteix et. al. (2004) para el proceso de polimerización por emulsión y el trabajo de Benyahia et. al. (2010) en un reactor de copolimerización en emulsión, particularmente para estireno y acrilato de butilo en presencia de mercaptano bajo el enfoque de la evaluación de criterios múltiples, implementando experimentalmente la mejor solución validando los resultados obtenidos; y la evaluación de proyectos energéticos (p.e. Cavallaro & Ciraolo, 2005).

La combinación de metodologías también ha sido abordada en diferentes temas. Estas aplicaciones combinan por lo regular un par de las disciplinas descritas, como es el caso de la metodología desarrollada por Brans et. al., incorpora métodos de criterios múltiples, en particular el método PROMETHEE, con dinámica de sistemas; en esta línea Kunsch y Springael (2005) aplican el desarrollo metodológico de Brans en el análisis de aplicación de políticas de impuestos para la reducción de CO₂ en el sector residencial considerando la incertidumbre del futuro. Vancronenburg (2007) analiza un modelo de dinámica de sistemas del sistema de transporte de pasajeros incorporando las transiciones tecnológicas y jerarquiza los escenarios mediante análisis multicriterio. García, Mareschal y Escobar (2010) presentan un desarrollo metodológico para la selección de rutas tecnológicas, incorporando planeación multinivel, técnicas de redes, análisis multicriterio y programación mixta entera lineal, logrando reducir la complejidad del problema combinatorio de toma de decisión para la selección de las mejores configuraciones tecnológicas en la industria petroquímica.

Changsirivathanathamrong (2007) integra la dinámica de sistemas y el análisis de ciclo de vida, logrando una herramienta que considera los impactos, económicos, sociales y ambientales, que puede aplicarse para mejorar los procesos de toma de decisiones e implementación de políticas, como lo demuestran en el caso del reciclaje de vidrio en Sydney, Australia, en donde se presenta un monoposonio, es decir, existe solo un comprador significativo.

Diversas aplicaciones que involucran la prospectiva y el análisis multicriterio se han desarrollado y publicado, por citar algunas, Xu Bing y Jammal Ouenniche (2012) proponen como adaptar el análisis de decisiones multicriterio (MCDA, por sus siglas en inglés) a

modelos de predicción en competencia sobre los precios del petróleo crudo; por otra parte, Martínez, Lambert y Karvetski aplican MCDS a portafolios de inversión en el sector energético ante múltiples escenarios emergentes.

Keppo y Strubegger (2010) proponen un marco de trabajo alternativo, flexible y dinámico, al implementar una ventana móvil de prospectiva en la que las decisiones pueden reconsiderarse conforme surge nueva información en el tiempo.

En el desarrollo de estas metodologías combinadas también está presente la combinación de métodos multicriterio y el análisis de ciclo de vida (LCA), ó, en su incorporación del concepto de exergía, análisis de ciclo de vida exergético (ELCA), en la evaluación de tecnologías energéticas como celdas de combustible (Raugei et al., 2005), el proceso de producción de hidrógeno(Ozbilen et al.,2012), manejo de residuos y la evaluación de productos plásticos de uso final como bolsas de polietileno (Ramírez, 2010), envases de Tereftalato de polietileno y vasos de poli estireno (Alegría, 2011), por citar solo unas aplicaciones. En las cuales se analiza el desempeño e impacto ambiental de equipos y procesos, bajo el enfoque de la exergía como medida de la calidad de la energía y como variable de cuantificación del desarrollo sustentable junto a otros criterios, económicos y tecnológicos principalmente.

En lo correspondiente materiales, se encuentran trabajos enfocados principalmente a la optimización de los procesos de obtención y la toma de decisión para la implementación de rutas de procesamiento del producto fase experimental o planta piloto, pe. Benyahia, B. (2010); Al-Salem, S. M. (2009) vuelve a considerar el análisis de las rutas de aprovechamiento de los desechos plásticos de acuerdo al LCA aplicado a diversas clases de rutas de procesamiento de los desechos mencionados. Por su parte Dewulf et. al. (2004) se enfoca en la optimización, por medio del análisis de exergía, del ciclo de vida de los diferentes plásticos, polietileno (PE), polipropileno (PP), poli estireno (PS), tereftalato de polietileno (PET), y cloruro de polivinilo (PVC), tomando en cuenta, dentro del ciclo de vida, rutas de tratamiento de los materiales una vez depuestos (reciclaje, incineración en cogeneración de calor y electricidad, relleno sanitario con recuperación de biogás para cogeneración y deposición sin recuperación de materiales o energía) para la obtención de bienes y servicios.

Simões, et. al. (2008) plantean la aplicación de métodos multicriterio para la evaluación del reciclaje de plásticos y la construcción de plantas de reciclaje, donde, en el primer caso, la reutilización y el reciclaje mecánico resultaron ser las opciones favorecidas por las preferencias y los criterios evaluados; en la segunda, demuestran la utilidad de la aplicación de los métodos multicriterios en la evaluación del rendimiento de las instalaciones de reciclaje en operación, la factibilidad técnica y financiera de nuevos proyectos, así como, la reducción del riesgo de dichos proyectos.

Como se aprecia en los documentos citados, en general se establecen combinaciones entre dos metodologías o campos del conocimiento, lo que si bien fortalece determinados aspectos del análisis del sistema en estudio, conserva otras deficiencias propias de las metodologías usadas, por ejemplo, en el caso de estudios que involucran las técnicas multicriterio, los resultados obtenidos se encuentran por lo general acotados al umbral del

corto plazo, o a la selección de una ruta tecnológica entre varias ya conocidas. Al respecto del enfoque en el corto plazo, las metodologías que involucran prospectiva y/o dinámica de sistemas, esta deficiencia (el umbral del corto plazo) se ve sustituida por la existencia de incertidumbre que genera una amplia complejidad en el estudio de los sistemas.

Es oportuno considerar los retos que se genera al desarrollar metodologías integradoras, que menciona y describe Markus Schwaninger (1997), los cuales están en la implementación, creación y validación de las metodologías, alientan al desarrollo de nuevas propuestas metodológicas, ya que la integración transdisciplinaria busca lograr un carácter más robusto por la participación de disciplinas que regularmente solo se acoplan en pares.

A.6 Ecuaciones asociadas al modelo.

- (01) $A \text{ renov rel} = \text{flujo prod renov} / (\text{flujo prod renov} + \text{flujo prod STD})$
Units: ton/ton
- (02) $\text{ajuste a prod STD} = F1 * (1 - O \text{ renov rel}) / T1$
Units: ton/año
- (03) $\text{ajuste prod RENO} = \text{ACTIVE INITIAL} (\text{STEP}(F1 * O \text{ renov rel} / T1A, T1A), 0)$
Units: ton/año
- (04) $\text{AUXILIAR} = (\text{Manu recicl} / (\text{Manu recicl} + M \text{Virg manu}))$
Units: **undefined**
- (05) $\text{Auxiliar2} = \text{Inv manu}$
Units: **undefined**
- (06) $\text{crecimiento anual} = 0.17972 / ((\text{Time} + \text{TIME STEP})^{(0.508789)})$
Units: **undefined**
- (07) $\text{Depo} = \text{Mat eco} * (1 - \text{Ef reco}) / T \text{ Depo}$
Units: ton/año
- (08) $\text{Ef reco} = 0.3$
Units: ton/ton [0,1,0.001]
- (09) $F1 = (\text{Auxiliar2}) * (1 + \text{crecimiento anual}) * (1 - \text{AUXILIAR})$
Units: ton
- (10) $\text{FINAL TIME} = 50$
Units: año
- (11) $\text{Flujo de materia prima virgen} = \text{PET total prod}$
Units: ton/año
- (12) $\text{flujo prod renov} = \text{SMOOTH}(\text{ajuste prod RENO}, T \text{ asimilación de tecnología})$

- Units: ton/año
- (13) flujo prod STD=Prod STD/T2
Units: ton/año
- (14) inicial=200
Units: **undefined**
- (15) inicial2=500
Units: **undefined**
- (16) INITIAL TIME = 0
Units: año
- (17) Inv manu= INTEG (Manu recic+MVirg manu-Usos del producto,0)
Units: ton
- (18) m1= GAME (1)
Units: **undefined**
- (19) Manu recic= ACTIVE INITIAL (recic comprobado a botella*Mat Recicl/T manu, 0.01)
Units: ton/año
- (20) Mat eco= INTEG (Usos del producto-Depo-Recolecc,Usos del producto)
Units: ton
- (21) Mat Recicl= INTEG (Sal proc-Manu recic-Otros usos,0.001)
Units: ton
- (22) Mat reco=Ef reco*Mat eco
Units: ton
- (23) MVirg= INTEG (Obt MVirg-MVirg manu,Obt MVirg)
Units: ton
- (24) MVirg manu=MVirg/T manu
Units: ton/año
- (25) no alternas solo petroleo:THE CONDITION:O renov inic= RC STEP (O renov inic, 0):IMPLIES:flujo prod renov<0.5:AND:flujo prod STD>0
Units: **undefined**
- (26) no material para reuso en botella todo a otros usos:THE CONDITION: recic comprobado a botella=RC STEP(recic comprobado a botella,1e-20):IMPLIES: Mat Recicl-Otros usos<=0.00015
Units: **undefined**

- (27) O renov inic= GAME (0.1)
Units: ton/ton [0,1,0.001]
- (28) O renov rel= ACTIVE INITIAL (IF THEN ELSE(A renov rel<O renov inic, RAMP(m1, A renov rel, O renov inic), O renov inic),O renov inic)
Units: ton/ton
IF THEN ELSE(A renov rel<O renov inic, STEP(0.001,0), O renovinic)seg:
IF THEN ELSE(A renov rel<O renov inic, O renov inic, STEP(0.001,0))
- (29) Obt MVirg=Flujo de materia prima virgen
Units: ton/año
- (30) Otros usos=((1-recic comprobado a botella)*Mat Recicl)/Usa
Units: ton/año
- (31) PET total prod=flujo prod renov+flujo prod STD
Units: ton/año
- (32) Prod STD= INTEG (ajuste a prod STD-flujo prod STD,inicial)
Units: ton
- (33) Prod x renov= INTEG (ajuste prod RENOV-flujo prod renov, T asimilación de tecnología*ajuste prod RENOV)
Units: ton
- (34) recic comprobado a botella=0.049442*((Time+TIME STEP)^(0.541451))
Units: **undefined** [1e-020,?]
- (35) Recolecc=STEP(Mat reco/T recol, T recol)
Units: ton/año
- (36) recuperas o basura:THE CONDITION:Ef reco=RC STEP(Ef reco,0):AND:
recic comprobado a botella=RC RAMP(recic comprobado a botella,0,4):
IMPLIES:Depo<=Inv manu
Units: **undefined**
- (37) Ret bene=4
Units: año
- (38) Sal proc=SMOOTH(Recolecc, Ret bene)
Units: ton/año
- (39) SAVEPER = TIME STEP
Units: año [0,?]

- (40) sin crecimiento la producción decae:THE CONDITION:crecimiento anual=
RC STEP(crecimiento anual,0):IMPLIES:PET total prod-inicial<=0
Units: **undefined**
- (41) Stck Recic= INTEG (Recolecc-Sal proc,Ret bene*Recolecc)
Units: ton
- (42) T asimilación de tecnología= 1
Units: año
- (43) T Depo=1
Units: año
- (44) T manu=1
Units: año
- (45) T recol=1
Units: año
- (46) T uso del producto=1
Units: año
- (47) T1=1
Units: año
- (48) T1A=1
Units: **undefined**
- (49) T2=1
Units: año
- (50) TIME STEP = 0.25
Units: año [0,?]
- (51) todo reciclado siempre se produce material nuevo:THE CONDITION:Ef reco=
RC STEP (Ef reco,1):AND:recic comprobado a botella= RC STEP(
reciccomprobado a botella,1):IMPLIES:flujo prod renov>=0:AND:flujo prod STD
>0
Units: **undefined**
- (52) todo renovable siempre hay de petroleo:THE CONDITION:O renov inic=
RC RAMP (O renov inic,1,10):AND:m1>6:IMPLIES:flujo prod STD>0
Units: **undefined**
- (53) Uso=1
Units: año

(54) $\text{Uso del producto} = \text{Inv manu} / T \text{ uso del producto}$
Units: ton/año

A.7 Perfiles

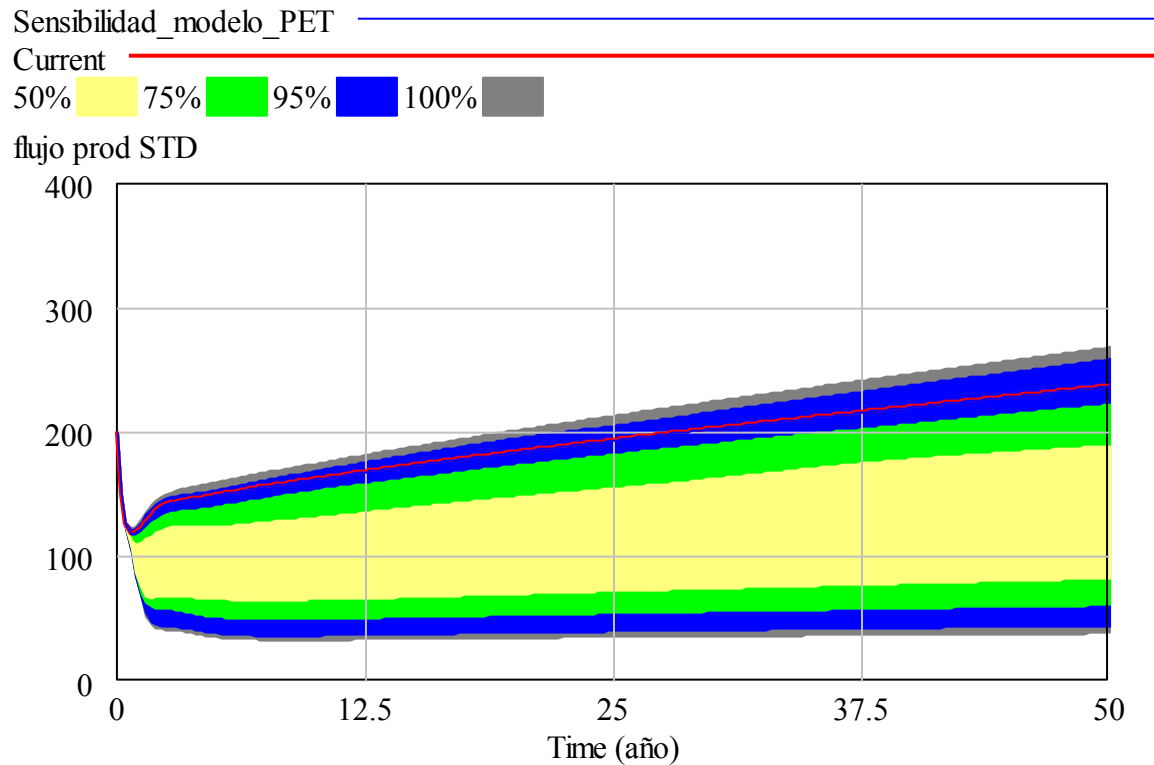


Figura A.7.1. Perfil de sensibilidad del flujo de producción de PET virgen vía recursos no renovables. (Elaboración propia a través del Software Vensim® V 5.11A)

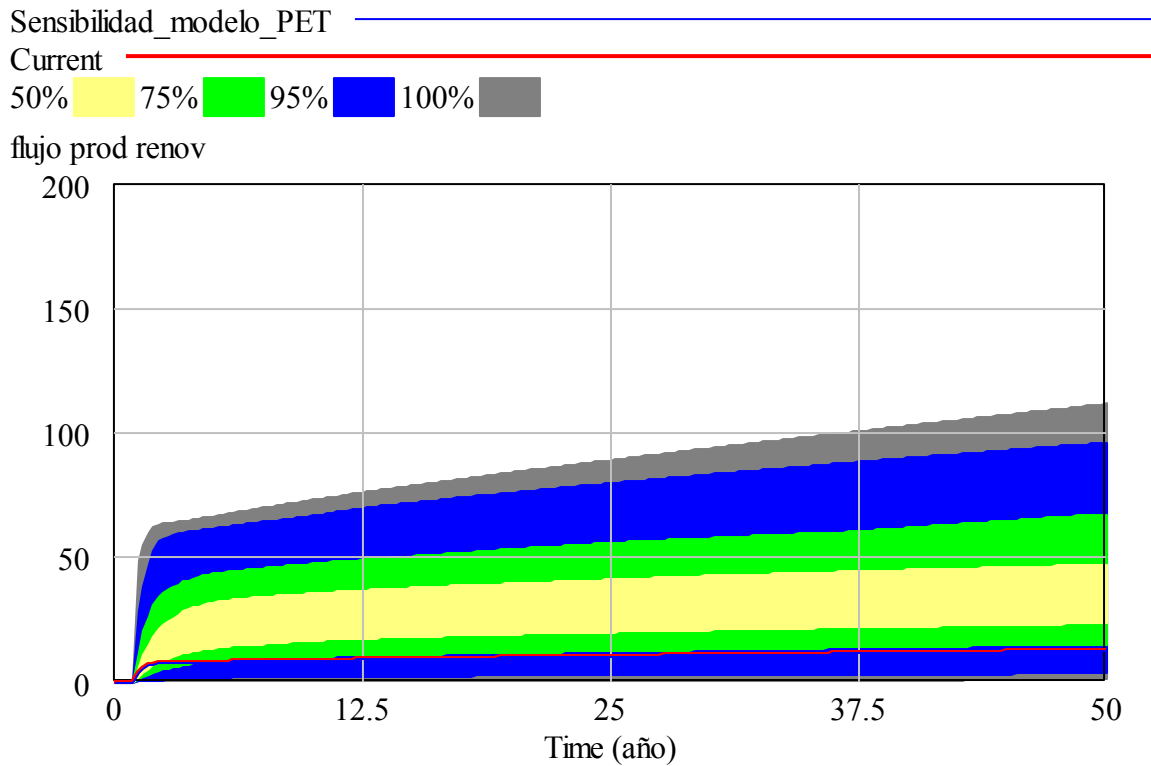


Figura A.7.2. Perfil de sensibilidad del flujo de producción de PET virgen vía recursos renovables.(Elaboración propia a través del Software Vensim® V 5.11A)

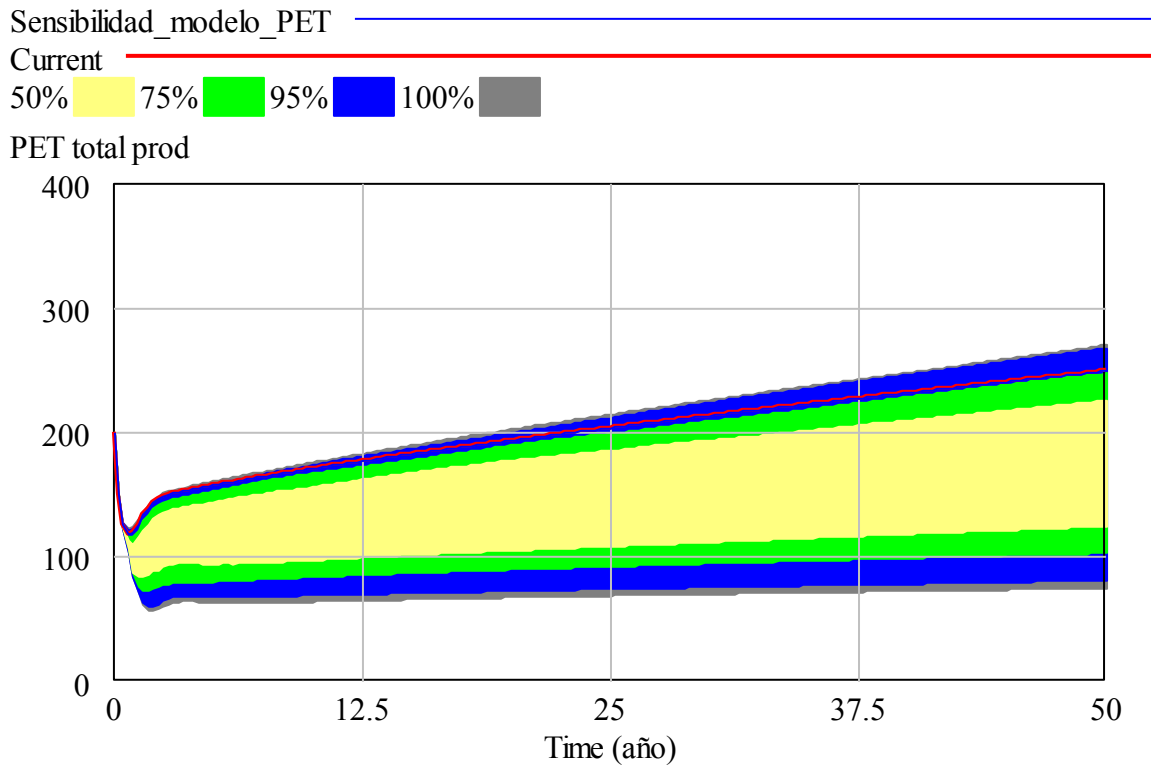


Figura A.7.3. Perfil de sensibilidad del flujo de producción total de PET virgen.(Elaboración propia a través del Software Vensim® V 5.11A)

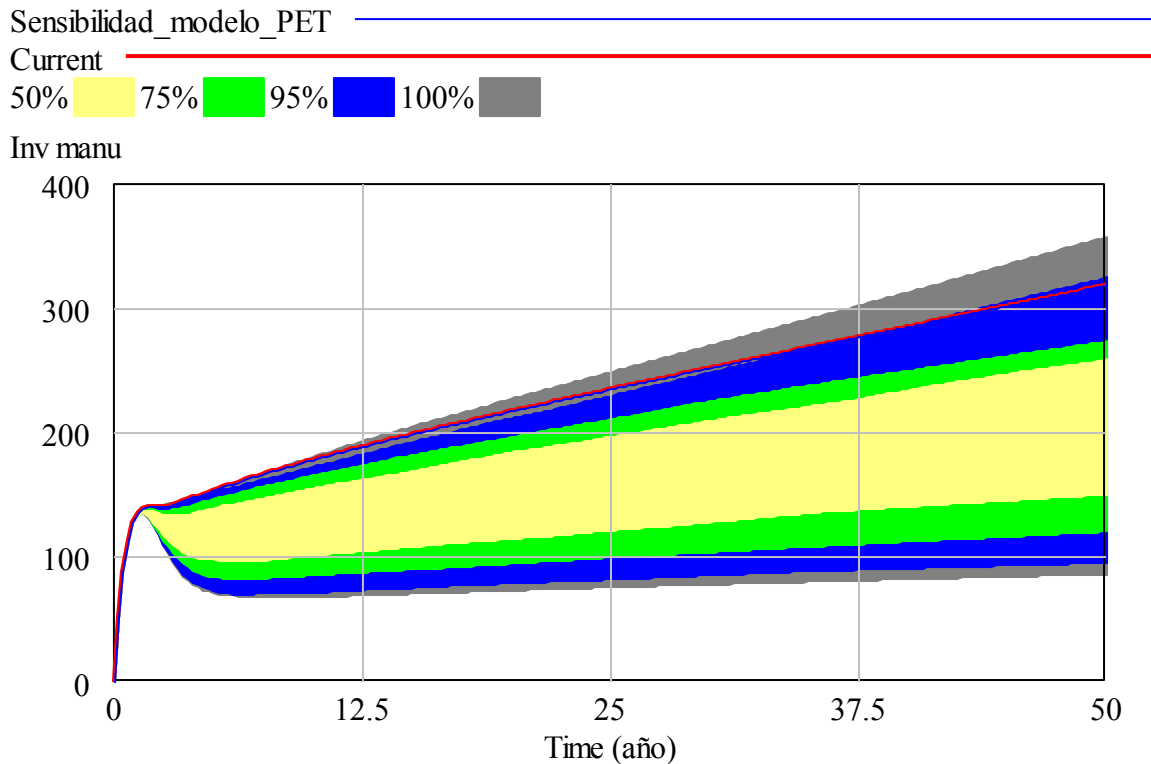


Figura A.7.4. Perfil de sensibilidad del inventario total de botellas de PET producidas. (Elaboración propia a través del Software Vensim® V 5.11A).

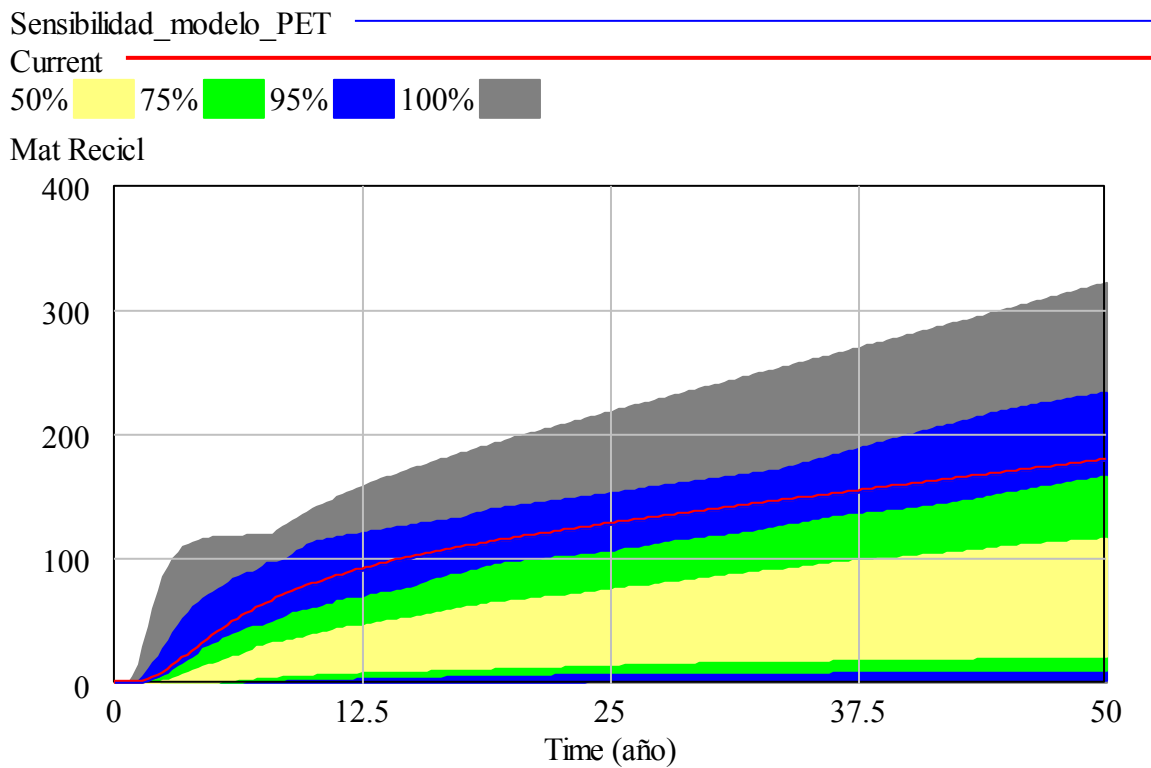


Figura A.7.5. Perfil de sensibilidad del PET reciclado listo para reincorporarse a la cadena de producción. (Elaboración propia a través del Software Vensim® V 5.11A).

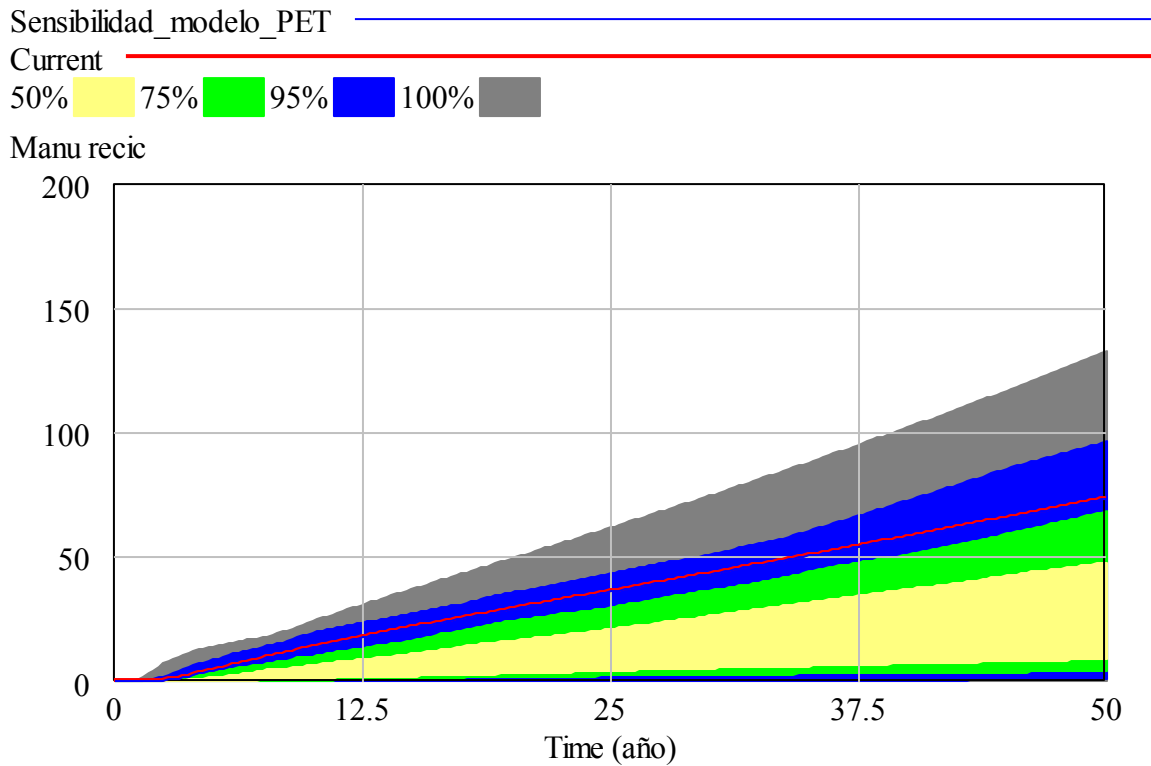


Figura A.7.6. Perfil de sensibilidad del flujo de PET reciclado para la obtención de botellas. (Elaboración propia a través del Software Vensim® V 5.11A)

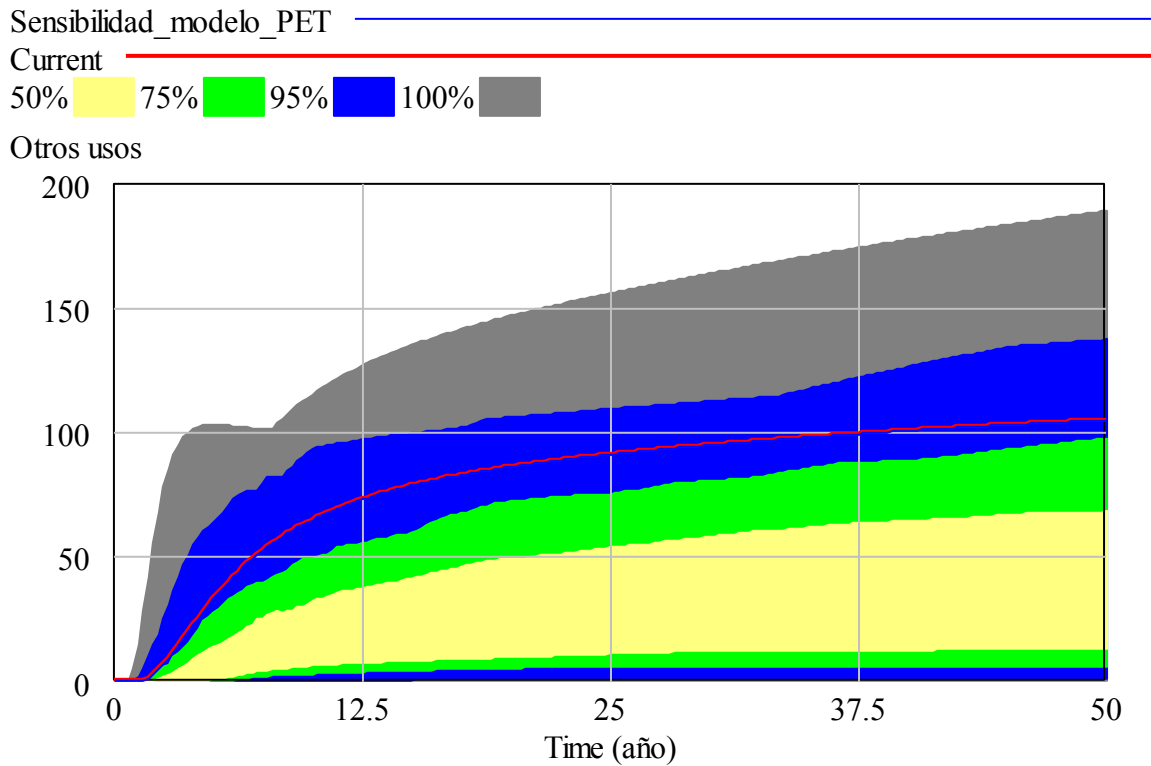


Figura A.7.7. Perfil de sensibilidad del flujo de PET reciclado para usos diferentes al de botella. (Elaboración propia a través del Software Vensim® V 5.11A).

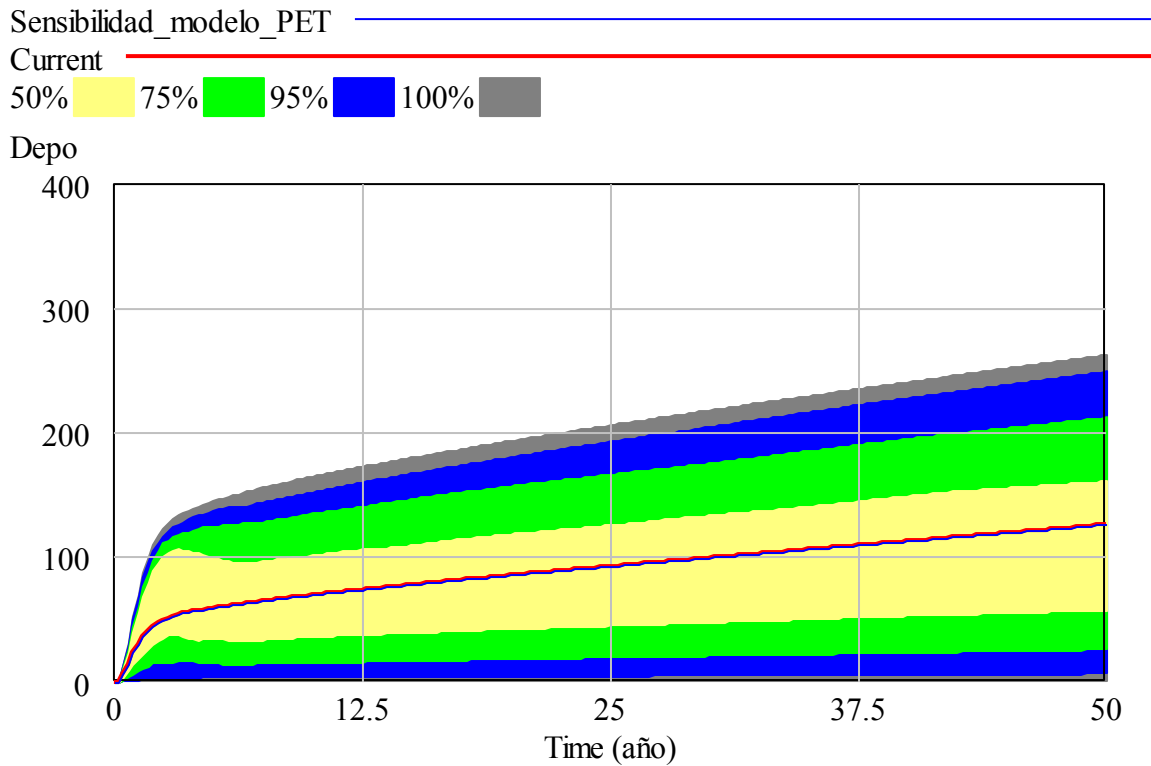


Figura A.7.8. Perfil de sensibilidad del flujo de deposición de PET a rellenos sanitarios.(Elaboración propia a través del Software Vensim® V 5.11A)

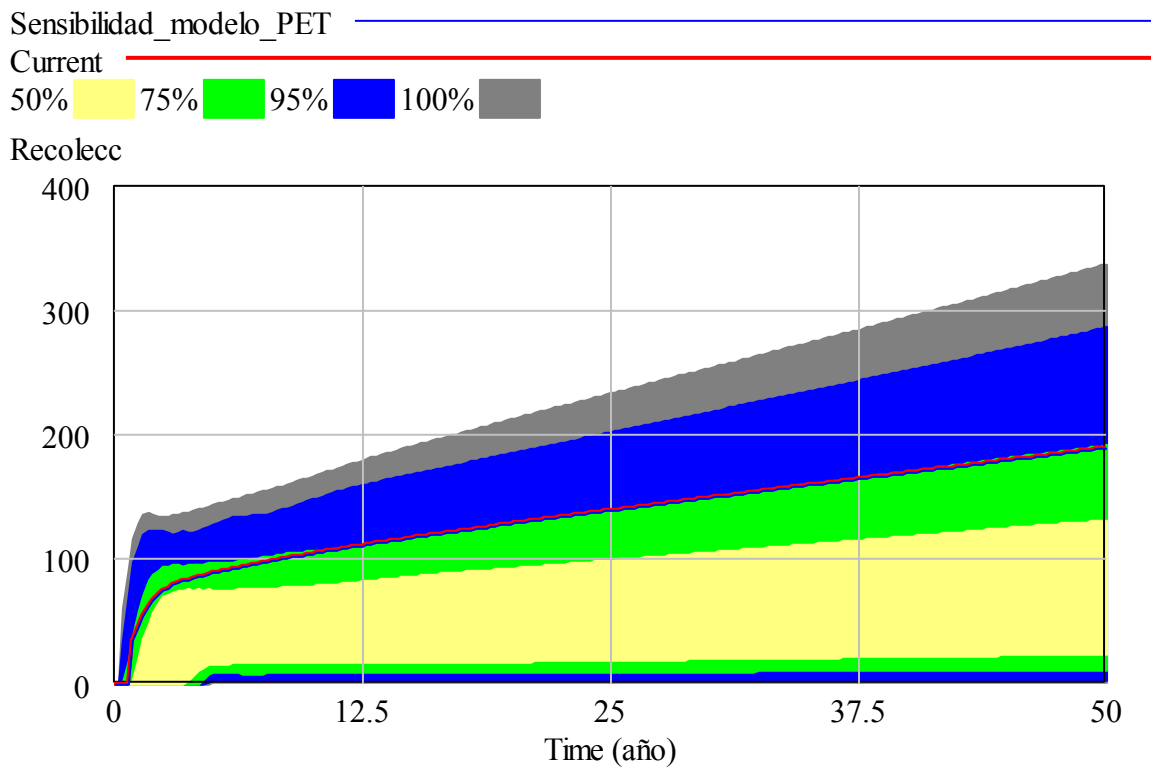


Figura A.7.9. Perfil de sensibilidad de la recolección de PET para reciclaje.(Elaboración propia a través del Software Vensim® V 5.11A).

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS.

1. Achilias, D., Karayannidis, G. (2004). *The chemical recycling of PET in the framework of sustainable development*. Water, Air, & Soil Pollution: Focus, 4:385-396. <http://dx.doi.org/10.1023/B:WAFO.0000044812.47185.0f>
2. Ackoff, R.L. (1981) *Creating the Corporate Future*. J. Wiley. New York.
3. Ackoff, R. L., Rovin, S. (2003) *Redesigning Society*. Stanford Univ. Press.
4. Aguado, J., Serrano, D. (1999) *Feedstock Recycling of Plastic Wastes*. The Royal Society of Chemistry, United Kingdom.
5. Alegria, L. (2011) *Uso eficiente de energía, desarrollo sustentable y conservación de recursos no renovables, caso de estudio: Perspectiva de las botellas de Poli (Tereftalato de Etileno) (PET)*. Tesis de maestría. Universidad Nacional Autónoma de México.
6. Alegria, L., Escobar, C., Ramírez, B. (2012) *Decision Making in Sustainable Development: Some Methods to Evaluate Energy and Nonrenewable Resources Waste When Using Some Plastics*. American Journal of Operations Research, 2, 399-407. <http://dx.doi.org/10.4236/ajor.2012.23048>.
7. Al-Munif, M., Venkateswara Rao, M., Bashir, Z., Padmanabhan, S. (2014) *Process for Making Polyethylene Terephthalate*. US 8901271 B2
8. Al-Salem, S., Lettier, J., Baeyens, J. (2009) *Recycling and recovery routes of plastic solid waste (PSW): A review*. Waste Management, 29:2625-2643. <http://dx.doi.org/10.1016/j.wasman.2009.06.004>
9. Álvarez-Chávez, C. R., Edwards, S., Moure-Eraso, R., Geiser, K. (2012). *Sustainability of bio-based plastics: general comparative analysis and recommendations for improvement*. Journal of Cleaner Production 23:47-56. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jclepro.2011.10.003>
10. Anistro J., P.A. and Escobar T., C.E. (2015) *System Dynamics Approach in LCA for PET-Renewable Raw Materials Impact*. American Journal of Operations Research, 5, 307-316. <http://dx.doi.org/10.4236/ajor.2015.54024>.
11. Ashford, A. C. (2001) *Unexpected Behaviors in Higher-Order Positive Feedback Loops*. Massachusetts Institute of Technology. D-4455-1
12. Awaja, F., Pavel, D. (2005) *Recycling PET*. European Polymer Journal, 41:1453-1477. <http://dx.doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2005.02.005>
13. Azapagic, A. (1999). *Life cycle assessment and its application to process selection, design and optimization*. Chem. Eng. J. 73:1-21. [http://dx.doi.org/10.1016/S1385-8947\(99\)00042-X](http://dx.doi.org/10.1016/S1385-8947(99)00042-X)
14. Bana e Costa, C. A., Vansnick, J. C. (1997) *Applications of the MACBETH Approach in the Framework of an additive aggregation model*. Journal of Multi-Criteria Decision Analysis, 6:107-114. [http://dx.doi.org/10.1002/\(SICI\)1099-1360\(199703\)6:2<107::AID-MCDA147>3.0.CO;2-1](http://dx.doi.org/10.1002/(SICI)1099-1360(199703)6:2<107::AID-MCDA147>3.0.CO;2-1)
15. Belton, V., Gear, T. (1983). *On a shortcoming of Saaty's method of analytic hierarchies*. Omega 11:228-230. [http://dx.doi.org/10.1016/0305-0483\(83\)90047-6](http://dx.doi.org/10.1016/0305-0483(83)90047-6)
16. Benyahia, B., Latifi, M. A., Fonteix, C., Pla, F. (2010) *Multicriteria dynamic optimization of an emulsion copolymerization reactor*, Computer Aided Chemical Engineering, 28:457-462. [http://dx.doi.org/10.1016/S1570-7946\(10\)28077-X](http://dx.doi.org/10.1016/S1570-7946(10)28077-X)

17. Bhatt, G. M.(2007) *Adding Value to Recycled PET Flakes*. Global Plastics Environmental Conference, Bepex International LLC
18. Bikiaris, D.,Karayannidis, G. P. (1996) *Thermomechanical analysis of chain-extended PET and PBT*. J. Appl. Polym. Sci., 60: 55–61. [http://dx.doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-4628\(19960404\)60:1%3C55::AID-APP7%3E3.0.CO;2-U](http://dx.doi.org/10.1002/(SICI)1097-4628(19960404)60:1%3C55::AID-APP7%3E3.0.CO;2-U)
19. Brans,J. P., Mareschal, B., Vinke, Ph. (1984)*PROMETHEE: a new family of outranking methods in multicriteria analysis*. Operational Research, IFORS 84:477-490.
20. Brans. J. P., Vincke, Ph. (1985). *A preference ranking organization method: The PROMETHEE method for MCDM*. Management Science, 31(6):647-656.<http://dx.doi.org/10.1287/mnsc.31.6.647>
21. Brans,J.P., Mareschal, B. (1992) *Promethee-V-MCDM Problems with Segmentation Constraints*.*INFOR*, 30(2):85-96.
22. Brans,J.P., Mareschal, B. (1995)*The PROMETHEE VI procedure. How to differentiate hard from soft multicriteria problems*.*Journal of Decision Systems*, 4:213-223.<http://dx.doi.org/10.1080/12460125.1995.10511652>
23. Brans, J. P., Macharis, C., Kunsch, P. L. Chevalier, A., Schwaninger, M. (1997) *Combining multicriteria decision aid and system dynamics for the control of socio-economic process. An iterative real-time procedure*. European Journal of Operational Research 109:428-441.[http://dx.doi.org/10.1016/S0377-2217\(98\)00068-X](http://dx.doi.org/10.1016/S0377-2217(98)00068-X)
24. Brans,J.P. (2002) *Ethics and decision*.*European Journal of Operational Research*, 136(2):340-352.[http://dx.doi.org/10.1016/S0377-2217\(01\)00121-7](http://dx.doi.org/10.1016/S0377-2217(01)00121-7)
25. Brodyansky, V. M., Sorin, M. V., Le Goff, P. (1994). *The efficiency of industrial processes: Exergy analysis and optimization*. Elsevier Science B.V.
26. Brundtland, G. H. (1987). *Our common future*. World Commission on Environment and Development (WCED).
27. Cámara, A., Escobar, C., Rigaud, N. (2014) *Metodología para evaluar el desarrollo sustentable de productos industriales con criterios múltiples*. Fundación Gómez Pardo.
28. Carta, D.,Cao, G., D'Angeli, C. (2003) *Chemical Recycling of Poly(ethylene terephthalate) (PET) by Hydrolysis and Glycolysis*. Environmental Science And Pollution Research, Vol. 10:390-394.<http://dx.doi.org/10.1065/espr2001.12.104.8>
29. Cavalcanti, F. N., Teofilo, S., Rabello, Silva S. L. M. (2007) *Chain Extension and degradation during Reactive processing of PET in the presence of triphenyl phosphate*. Polym Eng Sci, 47:2155-2163.<http://dx.doi.org/10.1002/pen.20912>
30. Cavallaro, F., Ciraolo, L. (2005) *A multicriteria approach to evaluate wind energy plants on an Italian Island*. Energy Policy, 33:235-244.[http://dx.doi.org/10.1016/S0301-4215\(03\)00228-3](http://dx.doi.org/10.1016/S0301-4215(03)00228-3)
31. Changsirivathanathamrong, A., Moore, S., Linard, K. (2007) *Integrating Systems Dynamics with Life Cycle Assessment: A Framework for Improved Policy Formulation and Analysis*. Modelling and Simulation Society of Australia and New Zealand (MSSANZ).
32. Cherubini, F., Jungmeier, G., Wellisch, M., Willke, T., Skiadas, I., van Ree, R., Jong, E. (2009) *Towards a common classification approach for biorefinery systems*.

33. Consoli, F. (1993) *Guidelines for Life-cycle Assessment: A Code of Practice*. Society of Environmental toxicology and Chemistry (SETAC).
34. Cornelissen, R. L. (1997). *Thermodynamics and sustainable development. The use of exergy analysis and the reduction of irreversibility*. Ph. D. thesis, Universiteit Twente The Netherlands.
35. De Jong, E., Higson, A., Walsh, P., Wellisch, M. (2012) *Bio-based Chemicals: Value Added Products from Biorefineries*. IEA Bioenergy – Task 42 Biorefinery
36. Dewulf, J., Van Langenhove, H., Mulder, J., van den Berg, M. M. D., van der Kooi, H. J., de Swaan Arons, J. (2000) *Illustrations towards quantifying the sustainability of technology*. Green Chem. 2:108-114.<http://dx.doi.org/10.1039/b000015i>
37. Dewulf, J., Van Langenhove, H., Dirckx, J. (2001) *Exergy analysis in the assessment of the sustainability of waste gas treatment systems*. The Science of the Total Environment 273: 41-52.[http://dx.doi.org/10.1016/S0048-9697\(00\)00841-X](http://dx.doi.org/10.1016/S0048-9697(00)00841-X)
38. Dewulf, J., Van Langenhove (2004) *Thermodynamic optimization of the life cycle of plastics by energy analysis*. Int. J. Energy Res. 28:969-976.<http://dx.doi.org/10.1002/er.1007>
39. DoinaDimonie, RaduSocoteanu, Simona Pop, Irina Fierascu, RaduFierascu, Celina Petrea, CatalinZaharia and MariusPetrache (2012). *Overview on Mechanical Recycling by Chain Extension of POSTC-PET Bottles*. Material Recycling - Trends and Perspectives, Dr. Dimitris Achilias (Ed.), ISBN: 978-953-51-0327-1.<http://dx.doi.org/10.5772/31841>
40. Dyer, J. S. (1990) *Remarks on the Analytic Hierarchy Process*. Management Science, 36(3):249-258.<http://dx.doi.org/10.1287/mnsc.36.3.249>
41. Endres, H. J., Siebert-Raths, A. (2001) *Engineering Biopolymers. Markets, Manufacturing, Properties and Applications*. Hanser Publications. ISBN: 9781569904619.
42. Escobar, C., Mareschal, B. (2015) *Energy Efficiency, Sustainable Development and Natural Resources Conservation: Multicriteria Life-cycle Analysis of Daily-Used Materials with a Long-term Vision*. British Journal of Applied Science & Technology 6(1): 34-48, Article no.BJAST.2015.065. ISSN: 2231-0843.
43. Fonteix, C., Massebeuf, S., Pla, F., Kiss, L. N. (2004) *Multicriteria optimization of an emulsion polymerization process*, E. J. Op. Research 153:350-359.[http://dx.doi.org/10.1016/S0377-2217\(03\)00157-7](http://dx.doi.org/10.1016/S0377-2217(03)00157-7)
44. Forrester, J. W. (1971) *World Dynamics*. Wright_Allen Press.
45. Forrester, J. W. (1994) *Learning through System Dynamics as Preparation for the 21st Century*. Keynote Address for System Thinking and Dynamic Modeling Conference for K-12 Education. Concord, MA, USA
46. García, C., Mareschal, B., Escobar, C. (2010) *Petrochemical Industry: Assessment and Planning Using Multicriteria Decision Aid Methods*. Technology and Investment, 1:118-134.<http://dx.doi.org/10.4236/ti.2010.12015>
47. Godet, M., Duperrin, J. C. (1973) *Methode de hierarchisation des elements d un systeme*. Rapport Economique du CEA, R. Pp.41-45.
48. Harris, J. (2001) *A Survey of sustainable development: social and economic dimensions*. Island Press, Washington, DC.

49. Hartwich, F., Jansen, H.G., (2007) *El rol gubernamental en el proceso de innovación agropecuaria: La experiencia de Bolivia*. No 8sp, Research briefs, International Food Policy Research Institute (IFPRI), <http://EconPapers.repec.org/RePEc:fpr:resbrf:8sp>.
50. Hauschild, M., Wenzel, H. (1997). *Environmental Assessment of products: scientific background*. London: Chapman & Hall.
51. Hernández-Santoyo, J. (2006) *Sustentabilidad del sector petrolero en México aplicando el método de análisis de exergía*. Tesis de maestría, UNAM.
52. Hirsch, R. L., Bezdek, R., Wendling, R. (2005) *Peaking of World oil Production: Impacts, Mitigation & Risk Management*. National Energy Technology Laboratory of the Department of Energy, Task 21006W.
53. ISO 14040:2006. *Environmental management – Life cycle assessment – Principles and framework*.
54. Janssen, F., van Santen, R. (1999) *Environmental Catalyst*. Imperial College Press, London. <http://dx.doi.org/10.1142/p106>
55. Karayaniddis, G., Achilias, D. (2007) *Chemical Recycling of Poly(ethylene terephthalate)*. *Macromol. Mater. Eng.*, 292:128-146. <http://dx.doi.org/10.1002/mame.200600341>
56. Karayannidis, G. P., Kokkalas, D. E., Bikiaris, D. N. (1995), *Solid-state polycondensation of poly(ethylene terephthalate) recycled from postconsumer soft-drink bottles. II*. *J. Appl. Polym. Sci.*, 56: 405–410. <http://dx.doi.org/10.1002/app.1995.070560311>
57. Keppo, I., Strubegger, M. (2010) *Short term decisions for long term problems – The effect of foresight on model based energy Systems analysis*, *Energy*, 35:2033-2042. <http://dx.doi.org/10.1016/j.energy.2010.01.019>
58. Kriegel, R. M., Xiaoyan, H., Schultheis, M. W. (2009) *Bio-Based terephthalate Polymer and Method of Making Same*. US 2009/0246430 A1
59. Kotas, T. J. (1995) *The exergy method of thermal plant analysis*. 2nd Edition, Krieger Publishing Company, USA.
60. Kunsch, P. L., Springael, J. (2005) *Simulation with system dynamics and fuzzy reasoning of tax policy to reduce CO2 emissions in the residential sector*. Report MOSI/14, Vrije Universiteit Brussel.
61. Leian Bartolome, Muhammad Imran, Bong Gyoo Cho, Waheed A. Al-Masry and Do Hyun Kim (2012). *Recent Developments in the Chemical Recycling of PET*. *Material Recycling - Trends and Perspectives*, Dr. Dimitris Achilias (Ed.), ISBN: 978-953-51-0327-1. <http://dx.doi.org/10.5772/33800>
62. Li, F. J., Dong, S. C., Li, F. (2012) *A system dynamics for analyzing the eco-agriculture system with policy recommendations*, *Ecological Modelling*, 227:34-45. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ecolmodel.2011.12.005>
63. Lockett, G., Hetherington, B., Yallup, P., Stratford, M. and Cox, B. (1986) *Modelling a Research Portfolio Using AHP: A Group Decision Process*. *R&D Management*, 16: 151–160. <http://dx.doi.org/10.1111/j.1467-9310.1986.tb01168.x>
64. Martínez, L. J., Lambert, J. H., Karvetski, C. W. (2011) *Scenario-informed multiple criteria analysis for prioritizing investments in electricity capacity expansion*, *Reliability Eng. & System Safety*, 96: 883-891. <http://dx.doi.org/10.1016/j.res.2011.03.007>

65. Meadows, D. H., Meadows, D. L., Randers, J., Behrens III, W. W. (1972) *The limits to growth: A report for the Club of Rome's Project on the Predicament of Mankind*. Universe Books.
66. Montero, G. (2006) *Determinación del potencial de mejoramiento exergoecológico de unidades de refinación de petróleo con efluentes gaseosos*. Tesis doctoral. Universidad Nacional Autónoma de México.
67. National Association for PET Container Resources, NAPCOR (1999-2013) *Reports on Postconsumer PET Container Recycling Activity*. Florence, KY, USA.
68. Nikles, E., Farahat, M. (2005) *New motivation for the depolymerization products derived from poly(ethylene terephthalate) (PET) waste*. *Macromol. Mater. Eng.*, 290:13-30. <http://dx.doi.org/10.1002/mame.200400186>
69. Ozbilien, A., Dincer, I., Rosen, M. A. (2012) *Exergetic life cycle assessment of hydrogen production process*, *Int. J. Hydrogen Energy*, 37:5665-5675. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2012.01.003>
70. Paci, M., La Mantia, F. P. (1998) *Competition between degradation and chain extension during processing of reclaimed poly(ethylene terephthalate)*. *Polymer Degradation and Stability*, 61:417-420. [http://dx.doi.org/10.1016/S0141-3910\(97\)00227-9](http://dx.doi.org/10.1016/S0141-3910(97)00227-9)
71. Patel, M., Bastioli, C., Marini, L., Würdinger, E. (2005) *Life-cycle Assessment of Bio-based Polymers and Natural Fiber Composites*. *Biopolymers Online*. <http://dx.doi.org/10.1002/3527600035.bpola014>
72. Patterson, J. (2007) *Continuous Depolymerization of Poly(ethylene terephthalate) via Reactive Extrusion*. Consultado Octubre 2014, Disponible de: <http://repository.lib.ncsu.edu/ir/handle/1840.16/3783/>
73. Pilz, H., Brandt, B., Fehring, R. (2010) *The impact of plastics on life cycle energy consumption and greenhouse gas emissions in Europe*. Denkstatt GmbH.
74. Prasad, A. V. S., Somasekhara, N., (1990). *The analytic Hierarchy Process for Choice of Technologies: An application*. *International Journal of Production Economic*, 73(3):197-208.
75. Quintero, D., López, S. (2010) *Análisis estructural: un apoyo para el modelado con dinámica de sistemas*. *Revista Avances en Sistemas e Informática*, Vol. 7 No. 3 Medellín.
76. Ramanathan, R. (1999) *Selection of appropriate green-house gas mitigation options*. *Global Environmental Change: Human and Policy Dimensions*, 9:203-210. [http://dx.doi.org/10.1016/S0959-3780\(98\)00039-9](http://dx.doi.org/10.1016/S0959-3780(98)00039-9)
77. Ramírez, B., (2010) *Uso eficiente de energía, desarrollo sustentable y conservación de recursos no renovables. El caso de las bolsas de polietileno versus la utilización de otros materiales*. Tesis de maestría, Universidad Nacional Autónoma de México.
78. Raugei, M., Bargigli, S., Ulgiati, S. (2005) *A multi-criteria life cycle assessment of molten carbonate fuel cells (MCFC) – a comparison to natural gas turbines*, *Int. J. Hydrogen Energy*, 30:123-130. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2004.04.009>
79. Rose, M., Palkovits, R. (2011). *Cellulose-Based Sustainable Polymers: State of the Art and Future Trends*. *Macromol. Rapid Commun.* 32:1299-1311. <http://dx.doi.org/10.1002/marc.201100230>
80. Roy, B., Bertier, P., (1973) *La méthode ELECTRE II – Une application au média-planning*. North-Holland Publishing Company, 291-302.

81. Roy, B., Bouyssou, D. (1993) *Aide Multicritère à la Décision: Méthodes et Cas*. Economica.
82. Saaty, T.L.(1980) *The Analytic Hierarchy Process*. McGraw-Hill, New York.
83. Saaty, T. L., Vargas, L. G., (1991) *Prediction, Projection and Forecasting*. Boston: Kluwer Academic. <http://dx.doi.org/10.1007/978-94-015-7952-0>
84. Saaty, T. L. (1994) *How to make decisions: the analytic hierarchy process*. Interfaces, 24(6):19-43. <http://dx.doi.org/10.1287/inte.24.6.19>
85. Salo, A. A., Hämäläinen, R. P. (1997). *On the measurement of preferences in the analytic hierarchy process*. Journal of Multi-Criteria Decision Analysis, 6(6):309-319. [http://dx.doi.org/10.1002/\(SICI\)1099-1360\(199711\)6:6<309::AID-MCDA163>3.0.CO;2-2](http://dx.doi.org/10.1002/(SICI)1099-1360(199711)6:6<309::AID-MCDA163>3.0.CO;2-2)
86. Sandén, B., Karlström, M. (2007) *Positive and negative feedback in consequential life-cycle assessment*. J. Clean. Prod. 15:1469-1481. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jclepro.2006.03.005>
87. Sastry, M. A., Sterman, J. D. (1992) *Desert island dynamics: An annotated survey of the essential system dynamics literature*.
88. Schwaninger, M. (1997) *Integrative Systems Methodology: Heuristics for Requisite Variety*, International Transactions in Operational Research, 4:109-123. <http://dx.doi.org/10.1111/j.1475-3995.1997.tb00068.x>
89. Shceirs, J. (1998) *Polymer Recycling: Science, Technology and Application*. John Wiley & Sons, ISBN 0-471-97054-9, New York.
90. Simões, C., Nunes, K., Xavier, L., Cardoso, R., Valle, R. (2008) *Multicriteria decision making applied to waste recycling in Brazil*. Omega 36:395-404
91. Sun, J., Liu, C., Wang, Y., Smith, C., Martin, K., Venkitasubramanian, P. (2014) *Renewable Para-Xylene from Acetic Acid*. US2014/0121430 A1
92. Szargut, J., Morris, D. R., Steward, F. R. (1988) *Exergy analysis of thermal, chemical and metallurgical processes*. Hemisphere Publishing Corporation.
93. The World Bank. Annex 4D.4 *Muti-Criteria Analysis*. http://www.worldbank.org/urban/solid_wm/erm/Annexes/US%20Sizes/New%20Annex%204D.4.pdf (Consultado Enero 15, 2013).
94. Udo de Hæs, H.A., Heijungs, R., Suh, S., Huppés, G. (2004) *Three strategies to overcome the limitations of life-cycle assessment*. J Ind Ecol, 8(3), 19-32. <http://dx.doi.org/10.1162/1088198042442351>
95. Vancronenburg, G. (2007) *Sustainable development and technological transitions: Presentation of a system dynamics model with an application on the surface passenger transport regime in the EU15*. Doctoral thesis, Vrije Universiteit Brussel.
96. Villacorta, P. J., Masegosa, A. D., Castellanos, D., Lamata, M. T. (2012). *A linguistic Approach to Structural Analysis in Prospective Studies*. MODO, Dept. of Computer Science and AI, CITIC, Univ. of Granada. http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-31709-5_16
97. Villalobos, M., Awojulu, A., Greeley, T., Turco, G., Deeter, G. (2006) *Oligomeric chain extenders for economic reprocessing and recycling of condensation plastics*. Energy, 31:3227-3234. <http://dx.doi.org/10.1016/j.energy.2006.03.026>
98. Wang, X., Zhang, J., Liu, J., Wang, G., He, R., Elmahdi, A., Elsayah, S. (2010) *Water resources planning and management based on system dynamics: a case study of Yulin city*, Environ. Dev. Sustain. 13:331-351. <http://dx.doi.org/10.2495/SW100311>

99. Wall, G., Gong, M. (2001). *On exergy and sustainable development-Part 1: Conditions and concepts*. Exergy, An International Journal, Vol. 1, Issue 3: 128-145.[http://dx.doi.org/10.1016/s1164-0235\(01\)00020-6](http://dx.doi.org/10.1016/s1164-0235(01)00020-6)
100. World Bank. *Annex 4D.4 Multi-Criteria Analysis*.
http://www.worldbank.org/urban/solid_wm/erm/Annexes/US%20Sizes/New%20Annex%204D.4.pdf (Consultado Enero 15, 2013).
101. Xu, B., Ouenniche, J. (2012) *Performance evaluation of competing forecasting models: A multidimensional framework base on MCDA*, Expert Sys. App. 39:8312-8324.<http://dx.doi.org/10.1016/j.eswa.2012.01.167>