

ANEXOS

ANEXO A

Herramientas utilizadas en el desarrollo metodológico

A.1 Modelos de evaluación de destino de sustancias

A.2 Herramientas de evaluación de impactos

A.3 Herramientas de simulación de procesos

A. 1 MODELOS DE EVALUACIÓN DE DESTINO

A.1.1 Evaluación del destino en entornos genéricos

Caltox®

Descripción	
<p>Modelo multimedia de evaluación del riesgo a la salud, dirigido a contaminantes que pueden transportarse entre diferentes medios (contaminantes emitidos y transferidos entre aire, tierra, agua superficial, sedimentos y agua subterránea)</p> <p>Incluye tres componentes:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Modelo de transporte multimedia y de transformación (modelo dinámico, empleado para evaluar la variación del tiempo en la variación de la concentración del suelo) - Modelos de escenarios de exposición (los modelos cubren 23 rutas de exposición), y - Componentes que cuantifican y evalúan parámetros de variabilidad e incertidumbre <p>El proceso de valoración consiste en relacionar la concentración de contaminante en los compartimentos con las concentraciones de contaminante en el medio en el cual la población esta siendo expuesta</p> <p>La dosis diaria es el producto de las concentraciones expuesta en el medio de contacto y un factor de ingestión que relaciona las concentraciones de la dosis potencial con la población.</p> <p>El modelo utiliza análisis MonteCarlo para estimar la distribución probabilísticas de la incertidumbre y/o variabilidad</p>	
Información de entrada	
Propiedades de las sustancias	<p>Nombre</p> <p>Peso molecular</p> <p>Punto de fusión</p> <p>solubilidad de en agua</p> <p>presión de vapor</p>
Dimensión del entorno	<p>área total de la superficie</p> <p>altura media del aire</p> <p>profundidad media del agua</p> <p>profundidad media del suelo</p> <p>profundidad media del sedimento</p>
Información de las sustancias	<p>Emisiones</p> <p>Potencial de cáncer / no-cáncer para humanos</p> <p>Concentraciones iniciales de contaminantes</p>
Información de salidas	
<p>Concentración cada compartimento</p> <p>Dosis diarias en humanos por inhalación, ingestión y contacto dérmico</p> <p>Riesgo a la salud humana</p> <p>Tablas y diagramas resumen</p>	
Usos del modelo	
<p>En cuanto a las sustancias, se puede aplicar para orgánicos no ionicos non. Sus resultados son específicos de una zona y para bajas concentraciones.</p> <p>La escala temporal, debe ser de meses a años y las áreas mayores a 1000 m²</p>	
Características informáticas	
<p>Proporciona una base de datos de les propiedades ambientales de Norte américa</p> <p>Permite la adición de nuevas regiones a la base de datos</p> <p>Proporciona una base de datos de sustancias y sus propiedades</p> <p>Permite imprimir lo resultados de las simulaciones</p>	

EUSES

Descripción	
Modelo multimedia de transporte y transformación de contaminantes, incluye emisión, exposición, efectos a seres vivos y estimación del riesgo	
Información de entrada (datos requeridos)	
Dimensión del entorno	área total de la superficie % de agua que cubre el área longitud de la costa para regiones marinas altura media del aire profundidad media del agua profundidad media del suelo profundidad media del sedimento
Propiedades de las sustancias	Nombre Peso molecular Punto de fusión solubilidad de en agua presión de vapor
Producción de sustancias, uso y emisión, datos de efectos para organismos acuáticos y terrestres	
Información de salidas	
Concentración en agua, suelo, sedimento, peces y vegetación. Dosis diarias Caracterización del riesgo	
Usos del modelo	
Permite evaluar los riesgos a la salud humana (Riesgo de cáncer por la exposición a un compuesto). Incluye todo tipo de sustancias, pero puede presentar fallas en inorgánicos o ionizables. Es posible evaluar productos derivados del petróleo, utilizando el bloque de Hidrocarburos. No sirve para evaluaciones específicas de un sitio, y su escala temporal puede ser corta o larga, sin embargo, sólo puede ser utilizado para zonas menos extensas que las continentales.	
Características informáticas	
Proporciona una base de datos de las propiedades ambientales de Europa Permite la adición de nuevas regiones a la base de datos Proporciona una base de datos de sustancias y sus propiedades Permite imprimir las tablas de las simulaciones	

Descripción	
La herramienta ChemCAN, predice las concentraciones medias en aire, agua superficial, peces, sedimentos, suelo, vegetación y aguas costeras. La herramienta esta basada en 24 regiones de Canadá, sin embargo, se puede definir otras regiones mediante el uso y adición de información de la base de datos. Las áreas que se generen deben tener un radio de por lo menos 300 km. Para áreas menores, dominará la dispersión del aire y no es aplicable esta herramienta.	
Información de entrada (datos requeridos)	
Dimensión del entorno	área total de la superficie % de agua que cubre el área longitud de la costa para regiones marinas altura media del aire profundidad media del agua profundidad media del suelo profundidad media del sedimento profundidad media del agua costera
Fracciones de volumen para los sub-compartimentos	partículas en aire partículas en agua peces aire en suelo agua en suelo sólidos en el suelo
Régimen de temperaturas (invierno, verano o media anual)	
Velocidades de transporte	Coeficientes de transferencia aire-agua Coeficientes de transferencia de mas por difusión Coeficientes de transferencia suelo-aire Coeficientes de transferencia agua sedimento deposición del sedimento
Propiedades de las sustancias	Nombre Peso molecular Punto de fusión solubilidad de en agua presión de vapor Vida media de reacción en aire, agua, suelo y Sedimento
Velocidades de emisión	Emisión a través del agua, suelo y aire
Información de salidas	
Coeficientes de partición Valores de Z i D Tiempos de residencia Concentración i fugacidad en cada compartimento Velocidades de transferencia y transformación Diagrama resumen	
Usos del modelo	
Se utiliza para establecer las características generales del comportamiento de nuevas o ya existentes sustancias. Ayuda en la valoración de la exposición humana	
Características informáticas	
Proporciona una base de datos de les propiedades ambientales de diferentes regiones Permite la adición de nuevas regiones a la base de datos Proporciona una base de datos de sustancias y sus propiedades Permite imprimir las tablas de las simulaciones y los diagramas resumen	

LEVEL III®

Descripción	
<p>La sustancia se descarga continuamente a velocidad constante consiguiendo la condición del estado estacionario, donde las velocidades de entrada y salidas son constantes.</p> <p>Los procesos de pérdida son debidos a las reacciones de degradación y advección.</p> <p>No se asume equilibrio entre medios y en general, los medios se encuentran a diferentes fugacidad</p> <p>Se deben definir las entradas de las sustancias por cada medio, así como la velocidad total de entradas.</p> <p>Los balances de materia se calculan en los cuatro compartimentos: aire, agua, suelo y sedimentos</p> <p>Las propiedades fisicoquímicas de las sustancias, se utilizan para cuantificar su comportamiento en los medios de estudio.</p> <p>Se involucran tres tipos de sustancias: sustancias con partición en el medio (tipo 1), Sustancias no volátiles (tipo 2), y sustancias con solubilidad cero o cercana a cero (tipo 3)</p> <p>El modelo de evaluación del destino es simple, con volúmenes y densidades definidas para aire, agua, suelo y sedimentos. Las velocidades medias de reacción, son para estos cuatro medios.</p>	
Información de entrada (datos requeridos)	
Propiedades de las sustancias	<p>Nombre</p> <p>Peso molecular</p> <p>Punto de fusión</p> <p>solubilidad de en agua</p> <p>presión de vapor</p> <p>Vida media de reacción en aire, agua, suelo y sedimento</p> <p>Sustancias tipo 1: solubilidad en agua, presión de vapor, kow, punto de fusión</p> <p>Sustancias tipo 2: coeficientes de partición</p>
Propiedades ambientales	<p>área total de la superficie</p> <p>% de agua que cubre el área</p> <p>longitud de la costa para regiones marinas</p> <p>altura media del aire</p> <p>profundidad media del agua</p> <p>profundidad media del suelo</p> <p>profundidad media del sedimento</p> <p>Fracciones volumétricas para todos los compartimentos</p> <p>Densidades</p> <p>Contenido de carbón orgánico</p> <p>Tiempos de residencia de los flujo advectivos</p>
Emisiones	<p>Velocidades de entrada de la sustancia por cada medio o compartimento</p> <p>Concentración previa en los compartimentos</p>
Variables de salida	
<p>Coeficientes de partición (tipo 1)</p> <p>Valores de Z</p> <p>Fugacidad de cada medio</p> <p>Velocidades de transporte intermedio y valores de D</p> <p>Reacción y velocidades de pérdida</p> <p>Tiempos de residencia o persistencia</p> <p>Concentración y cantidad por cada medio</p> <p>Diagrama resumen</p>	

Usos del modelo

Establecer las características generales del comportamiento de nuevas o ya existentes sustancias
Describir el destino de la sustancia incluyendo pérdidas por degradación, advección y transporte
Permite calcular tres tipos de persistencia: valor total (TO), persistencia individual atribuida a reacción (TR), y sólo advección, TA. (De donde $1/TO = 1/TR + 1/TA$)
La vida media de reacción en la totalidad de los compartimentos evaluados.
Los tiempos de residencia de advección en aire
El modelo no permite tratar sustancias ionizantes

Características informáticas

Proporciona una base de datos de sustancias y sus propiedades
Permite cambios y adición de las sustancias y sus propiedades para nuevas simulaciones
Proporciona una base de datos de las propiedades del entorno (genérico)
Muestra y permite imprimir los resultados calculados por el modelo
Los resultados del programa pueden ser guardados como hojas de cálculo (tipo Microsoft Excel)

Descripción	
<p>Este modelo se basa en una simulación tipo Level III para evaluar la persistencia y el potencial de una sustancia en transporte de largo recorrido (long-range) en un medio móvil, tal como aire o agua. El modelo Level III debe ser utilizado para aplicaciones más generales</p> <p>La sustancia se descarga continuamente a velocidad constante consiguiendo la condición del estado estacionario, donde las velocidades de entrada y salidas son constantes</p> <p>Los procesos de pérdida involucrados son reacción, degradación i advección.</p> <p>Cada compartimento se encuentra a una fugacidad diferente y el balance de materia se aplica a cada compartimento y al sistema como un todo.</p> <p>Es posible calcular la velocidad de transporte entre compartimentos.</p> <p>Se tratan tres tipos de sustancias: sustancias con partición en el medio (tipo 1), Sustancias no volátiles (tipo 2), y sustancias con solubilidad cero o cercana a cero (tipo 3)</p> <p>La sustancia entra en cada medio móvil separándose a una velocidad fija.</p>	
Datos de entrada	
Propiedades de la sustancia	Nombre Peso molecular Punto de fusión solubilidad de en agua presión de vapor Vida media de reacción en aire, agua, suelo y sedimento Sustancias tipo 1: solubilidad en agua, presión de vapor, kow, punto de fusión Sustancias tipo 2: coeficientes de partición
Propiedades ambientales	área total de la superficie densidad de todos los compartimentos altura media del aire profundidad media del agua profundidad media del suelo profundidad media del sedimento Fracciones volumétricas para todos los compartimentos Velocidades de transporte Contenido de carbón orgánico Tiempos de residencia de los flujo advectivos Velocidad de la lluvia, velocidad de deposición de partículas Velocidad de agua subterránea
Emisiones	Velocidad de entrada de la sustancia para cada medio o compartimento Concentración inicial en los compartimentos
Salidas del Modelo	
Persistencia en el ambiente coeficientes de partición (sustancias tipo 1) valores de Z fugacidad en cada medio velocidades de transporte en cada medio y entre ellos Concentración y cantidad por cada medio Diagrama resumen	
Usos del modelo	
Es una herramienta de evaluación de la persistencia de las sustancias y su potencial en el transporte de largo recorrido	

Características del modelo

Proporciona una base de datos de varias sustancias y sus propiedades

Permite cambios y adición de las sustancias y sus propiedades para nuevas simulaciones

Proporciona una base de datos de las propiedades del entorno (genérico)

Muestra y permite imprimir los resultados calculados por el modelo

Los resultados del programa pueden ser guardados como hojas de cálculo (tipo Microsoft Excel)

A.1.2 Propiedades de las sustancias por modelo evaluado

Propiedades		Modelos				
		CalTOX	EUSES	ChemCan	Level III	TaPL3
Peso molecular		✓	✓	✓	✓	✓
Solubilidad en agua		✓(mol/m ³)	✓(mg/l)	✓	✗	✗
Presión de vapor (Pa)		✓	✓	✓	✗	✗
Constante de Henry		✓	✓	✓	✗	✗
Log kow		✓	✓	✓	✗	✗
Punto de ebullición		✗	✓	✗	✗	✗
Punto fusión		✓(K)	✓(°C)	✓	✗	✗
Temperatura		✓	✓	✓	✓	✓
Vida media de reacción (h)	Aire	✗	✗	✓	✓	✓
	Agua	✓	✗	✓	✓	✓
	agua superficie	✗	✗	✗	✗	✗
	Suelo	✓	✗	✓	✓	✓
	Suelo superficie	✓	✗	✗	✗	✗
	Suelo (zona raíz)	✓	✗	✗	✗	✗
	Sedimento	✓	✗	✓	✓	✓
	Peces	✗	✗	✓	✓	✓
	Aerosol	✗	✗	✓	✓	✓
	Aire-agua,kaw	✗	✗	✓	✓	✓
	Suelo-agua (l/kg)	✗	✓	?	✓	✗
	Sedimento-agua (l/kg)	✗	✓	?	✓	✗
	Aerosol-agua	✗	✗	✗	✓	✗
	Coeficientes de partición	Aerosol-aire	✗	✗	✓	✗
Peces-agua		✗	✗	✓	✓	✗
Suelo-aire		✗	✗	✗	✗	✓
Sedimento-aire		✗	✗	✗	✗	✓
Piel agua/suelo		✓	✗	✗	✗	✗
Ground/root		✓	✗	✗	✗	✗
Capa acuática		✓	✗	✗	✗	✗
Agua-sedimento		✓	✗	✗	✗	✗
Sólidos-agua		✗	✓	✗	✗	✗
Hojas - aire		✗	✓	✗	✗	✗
Plantas-aire (m ³ a/kg(pFM))		✓	✗	✗	✗	✗
Pez-agua		✓	✗	✗	✗	✗
Peces		✗	✓	✗	✗	✗
Por carne		✗	✓	✗	✗	✗
Per leche	✗	✓	✗	✗	✗	

✓ Tiene información

✗ No tiene información

A.1.3 Propiedades de entornos por modelo evaluado

Propiedades		CalTOX	Euses	ChemCAN	LEVEL III	TaPL3
Área total (km ²)		✓	✓	✓	✗	✗
Àrea (m ²)	Aire	✓	✗	✓	✗	✓
	Agua	✓	✗	✓	✗	✓
	Suelo	✓	✗	✓	✗	✓
	Sedimento	✓	✗	✓	✗	✓
Profundidad (m)	Aire	✓	✓(km)	✓	✗	✓(m)
	Agua	✓	✓(m)	✓	✗	✓(m)
	Suelo	✓	✓(cm)	✓	✗	✓(m)
	Sedimento	✓	✓(cm)	✓	✗	✓(m)
	Agua costera	✓	✓(m)	✗	✗	✗
Superficie cubierta de agua (% del total)		✗	✗	✓	✗	✗
Longitud de costa para regiones marítimas (km)		✗	✗	✓	✗	✗
Precipitación anual media (m/d)		✓	✗	✗	✗	✓
Caudal de agua superficial en el entorno (m/d)		✓	✗	✗	✗	✓
Escorrentía por la superficie (m/d)		✓	✗	✗	✗	✓
Partículas en la atmósfera (kg/m ³)		✓	✗	✓	✗	✗
Velocidad de deposición de las partículas en aire (m/d)		✓	✗	✓	✗	✓
Grosor medio de la superficies de las hojas (cutícula) (m)		✓	✗	✓	✗	✓
Densidad de vapor húmedo (kg/m ³)		✓	✗	✓	✗	✓
Densidad de las hojas (kg/m ³)		✓	✗	✓	✗	✓
Grosor de la capa límite de las hojas		✓	✗	✗	✗	✓
Erosión superficie de las hojas (vida media) (d)		✓	✗	✗	✗	✓
Evaporación de agua desde la superficie (m/d)		✓	✗	✗	✗	✓
Grosor de la capa de suelo superficial		✓	✗	✗	✗	✓
Agua contenida en la superficie del suelo		✓	✗	✗	✗	✓
Aire contenida en la superficie del suelo		✓	✗	✗	✗	✓
Erosión de la superficie del suelo (kg/m ² -d)		✓	✗	✓	✗	✓
Grosor de la zona de raíz (m)		✓	✗	✗	✗	✗
Grosor de la capa acuática (m)		✓	✗	✓	✗	✗
Porosidad de la zona acuática		✓	✗	✓	✗	✗
Profundidad media de las superficies acuáticas (m)		✓	✗	✓	✗	✓
Sedimentos suspendidos en la superficie del agua (kg/m ³)		✓	✗	✓	✗	✓
Deposición de sedimentos suspendidos (kg/m ² /d)		✓	✗	✓	✗	✓
Grosor de la capa de sedimento (m)		✓	✗	✓	✗	✓
Porosidad de la zona de sedimento		✓	✗	✓	✗	✓
Velocidad de enterramiento del sedimento (m/d)		✓	✗	✓	✗	✓
Escorrentía (m/d)		✓	✗	✓	✗	✓
Grosor de la interfaz aire/suelo (m)		✓	✗	✓	✗	✓
Promedio anual de velocidad del viento (m/d)		✓	✗	✓	✗	✓
Fracción de carbón orgánico	Zona superior del suelo		✓	✗	✓	✓
	Zona acuática		✓	✗	✓	✓
	Sedimento		✓	✗	✓	✗
	Viento		✗	✗	✗	✗
Velocidad (km/h)	Agua		✗	✗	✗	✗
	Aerosol		✗	✓	✗	✗

Fracción volumétrica en aire	Partículas		X	X	X	X
	Hojas		X	X	✓	X
	Sedimento suspendido		X	✓	X	X
Fracción volumétrica agua	Peces		X	✓	X	X
	Hojas		X	X	✓	X
	Raíces		X	X	✓	X
	Biota		X	X	X	X
	Aire		X	✓	X	X
	Agua		X	✓	X	X
	Sólidos		X	✓	X	X
Fracción volumétrica lípidos en hojas	Agua		X		✓	X
Fracción volumétrica suelo	Sólidos		X	✓	X	X
	Vapor aire		X	✓	X	X
	Aerosol		X	✓	X	X
Fracción volumétrica sedimentos	Solución		X	X	X	X
	Sedimentos suspendidos		X	✓	X	X
Densidad medio aire (kg/m ³)	Agua		X	✓	X	X
	Material sólido		X	X	✓	X
Densidad medio agua (kg/m ³)	Peces		X	✓	X	X
	Vapor aire		X	✓	X	X
	Agua		X	✓	X	X
	Sólido		X	✓	✓	X
Densidad medio suelo (kg/m ³)	Vapor aire		X	✓	✓	X
	Agua		X	✓	✓	X
	Suelo		✓	✓	✓	✓
Densidad medio sedimento(kg/m ³).	Agua		X	✓	✓	X
	Sólido		✓	✓	✓	✓
Carbón orgánico (g/g)	Suelo		X	✓	✓	X
	Sedimento		X	✓	✓	X
	partículas		X	✓	✓	X
Condiciones de temperatura (°C)	Media anual		X	X	X	X
	Media de invierno		X	X	X	X
	Media de verano		X	X	X	X
Tiempos de residencia	Aire		X	✓(h)	X	X
	Agua		X	✓(h)	X	X
	Sedimentos		X	✓(h)	X	X
Lipido (g/g)	Lípidos en peces		X	✓	X	X
Velocidades de transporte (m/h)	Aire-agua		✓	✓	X	✓
	Agua-aire		✓	✓	X	✓
	Velocidad de la lluvia		✓	✓	X	✓
	Deposición aerosol		✓	✓	X	✓
	Suelo-aire		✓	✓	X	✓
	Suelo-agua		✓	✓	X	✓
	Deposición sedimento		✓	✓	X	✓
	Escorrentía suelo-agua		✓	✓	X	✓

✓Tiene información

XNo tiene información

A.1.4 Evaluación del destino en entornos específicos

Great_er

Descripción	
Es una herramienta para la exposición de sustancias, que ha sido diseñada para el uso en la evaluación del riesgo ambiental en la Unión europea. La herramienta es un SIG (Sistema de Información Geográfica) que calcula las concentraciones de productos químicos que son vertidos en ríos (en entornos específicos). La herramienta utiliza la información del uso de las sustancias y las propiedades de fisicoquímicas. Las concentraciones predichas se presentan en mapas.	
Datos de entrada	
Modelo de emisión	Cantidad de sustancia en el mercado (datos de ventas) Población equivalente Consumo de agua por habitante
Modelo de destino (Complejidad tipo 1)	Sistema de conducción de las aguas residuales
	Datos del río
	Plantas de tratamiento
Modelo de destino (Complejidad tipo 2)	Sistema de conducción de las aguas residuales
	Plantas de tratamiento
	Información geo- referenciada
	Datos del río
Modelo de destino (Complejidad tipo 3)	Sistema de conducción de las aguas residuales
	Plantas de tratamiento
	Datos del río
	-Concentración -Información no geo-referenciada - Información geo- referenciada
Salidas del Modelo	
El modelo presenta, diferentes tipos de concentración en mapas de la región en estudio.	
Usos del modelo	
El modelo permite calcular la concentración, en una amplia de influencia del río (cuencas), a través del valor de las concentraciones predichas al inicio del río y en cualquier zona del mismo.	
Características del modelo	
El modelo permite trabajar con datos en formato SIG Para cada grupo de datos un formato se puede establecer un fichero intermedio, tipo txt Se puede trabajar con combinación de datos Geo-referenciados y no Geo-referenciados	

A. 2 HERRAMIENTAS DE EVALUACIÓN DE IMPACTOS

A.2.1 Herramientas de evaluación de impactos potenciales

SIMA PRO 5.0.

Herramienta que permite analizar las contribuciones más importantes a la carga ambiental de un producto, proceso o actividad industrial durante su ciclo de vida, así como comparar dos productos que tienen materiales y/o procesos diferentes pero que cumplen con la misma función.

Básicamente se pueden realizar cuatro tareas: Análisis de la producción, análisis del ciclo de vida (uso) y análisis de los escenarios de disposición. Así mismo, comparación de productos o procesos.

Para la utilización de la herramienta se deben definir aspectos tales como: **escenario** (alcances y objetivos), **unidad funcional** (kg de material..... un artículo), **categorías de daño** (sobre el entorno en qué se realiza el efecto, en este caso son *salud humana, ecosistemas y recursos naturales*).

Las cuatro tareas tienen características similares y sinérgicas entre sí y su descripción se resume a continuación:

1. Análisis del producto. En este análisis se desarrollan tres etapas:

- Definición de materiales. Lista de materiales a usar y de los procesos que se tienen en cuenta para su obtención.
- Acoplamiento (Ensamblaje).
- Inventario. **Descripción** (lista de materiales necesarios para la elaboración del producto y emisiones relacionados con el sistema). **Evaluación** (Método de evaluación/Ecoindicador). **Comparación** (llevar a un mismo nivel los daños e impacto). **Cuantificación** (del daño sobre las categorías definidas).

2. Análisis del ciclo de vida. Básicamente se desarrollan las tres etapas mencionadas antes, pero se tienen en cuenta los flujos que entran al sistema, tal como el material reciclado.

3. *Escenarios de disposición de residuos.* La herramienta hace una distinción entre la disposición final de los productos y el tratamiento de los materiales residuales: Así mismo permite modelar las diferentes opciones que existan para cada producto o proceso.

4. *Comparación de productos o ciclos de vida.* En la herramienta esta tarea se desarrolla teniendo en cuenta las etapas que se siguen en el análisis del producto, pero evaluando cada fase para los productos o procesos que se quieren comparar.

Tools Environmental Analysis and Management. TEAM™.

La herramienta cuenta con dos niveles de estudios: Bases de datos y cálculos. Básicamente tiene tres funciones principales:

- Análisis de Inventario de Ciclo de Vida.
- Evaluación del Inventario del CV
- Interpretación del Ciclo de vida.

Su sistema se basa principalmente en una interface que contiene listas de flujo, de módulos y de revisión de procesos.

Flujos: definen las entradas y salidas.

Módulos: describen un proceso o un grupo de procesos.

Sistema: define un grupo de módulos (Sistema principal o subsistemas).

Existen tres etapas fundamentales:

- La creación del Inventario: Presenta dos características principales, puede construirse sin definir la unidad funcional y puede contener varios elementos)
- Análisis: es la etapa del proceso que permite realizar la interpretación del inventario.
- Interpretación: tiene tres características importantes: a) *examina los resultados del inventario y opcionalmente la evaluación del impacto* b) *desarrolla simulaciones* y, c) *puede usar métodos que calculan las incertidumbres tal como el Monte Carlo.*

A.2.2 Herramientas de evaluación de impactos específicos

ECOSENSE

Información necesaria de entrada

Datos técnicos de planta

- ✓ Capacidad de producción eléctrica
- ✓ Electricidad enviada fuera
- ✓ Total de horas trabajadas por la planta al año
- ✓ Emisiones (NOx, SO₂, PM, metales pesados, y material particulado)
- ✓ Altura y diámetro de la chimenea
- ✓ Volumen y temperatura de los gases de combustión
- ✓ Ubicación de la chimenea (elevación del sitio, longitud y latitud)

Datos ambientales (pueden ser cambiadas o venir por defecto)

- ✓ Ubicación (País, comunidad, provincia)
- ✓ Población

Información de las funciones Exposición-Respuesta

Esta información se encuentra ya definida (es posible editarla), pero es posible agregar nueva información, relacionada con:

- ✓ Funciones y nivel de estimación (Alto, medio y bajo)
- ✓ Umbral
- ✓ Referencia
- ✓ Nuevos impactos

Valor monetario

Es posible editar categorías de valor monetario definidas en el modelo, sin embargo, se pueden añadir nuevas categorías.

- ✓ Valor para la evaluación
- ✓ Año base de evaluación

Información por defecto

Datos técnicos de planta

- ✓ Operación normal

Análisis del trayecto de la emisión hasta el impacto y daño

✓ Receptor (Salud Humana, Cosechas, bosques y ecosistemas)

Información de salida

Impactos (en casos por electricidad producida)

Daños en valor monetario por electricidad producida

A.3 HERRAMIENTAS DE SIMULACIÓN DE PROCESOS

Simulador de procesos Hysys Plant®.

Hysys Plant® es un software de los más avanzados en ingeniería de procesos. Es completamente interactivo y es posible obtener acceso a altos niveles de definición de geometría de los equipos, obteniendo resultados detallados. Hysys Plant® está diseñado para ser: integrado, intuitivo e interactivo y abierto y extensible.

Entorno de la simulación integrada en Hysys Plant®.

Los parámetros comunes (que son el eje de las herramientas de modelización), se basan en: topología del modelo, interfase y termodinámica.

Hysys Plant® utiliza el diseño orientado a objetos, junto con un entorno gráfico event-driven, consiguiendo:

- calcular automáticamente cada vez que se le añade información nueva; y
- acceder libremente a la información que se necesite.

Arquitectura abierta y extensible de Hysys Plant®

El entorno de simulación integrada y el completo software orientado a objetos, acaba ofreciendo:

- Uso desarrollado del estado estacionario y dinámico de las operaciones unitarias.
- Expresiones cinéticas de las reacciones.
- Creación de paquetes de propiedades especializadas.

Uso de la herramienta

Para poder realizar la simulación del proceso con esta herramienta, inicialmente se tiene que especificar al simulador las siguientes propiedades del sistema a simular:

- Modelo termodinámico.
- Modelo cinético.
- Entradas del proceso (composición, temperatura, caudal).

- Equipos y sus condiciones de diseño y operación.

La herramienta permite realizar simulaciones con base en el cálculo de propiedades físicas, componentes reales e hipotéticos, reacciones y equipos; todo esto dentro de una entidad singular. Las ventajas que presenta esta herramienta son:

- Información en una localización singular.
- Los paquetes de fluidos definidos pueden ser almacenados como una entidad completamente definida que puede ser usada en cualquier fase de la simulación.
- Paquetes de fluidos múltiples pueden ser usados en una misma simulación,

Etapas en la preparación de un caso con Hysys Plant®.

Las etapas para iniciar un caso en Hysys Plant® son:

- Definir la base de simulación.
- Exportar paquetes de fluidos.
- Cambiar unidades por una especificación.
- Adicionar corrientes
- Realizar cálculos.

SuperPro Designer.

Es un grupo de herramientas de la serie “Pro-designer”, las cuales incluyen BatchPro, BioPro y EnviroPro. Los cuatro productos tienen la misma presentación (en términos de simulación, evaluación económica, análisis de proceso, evaluación de impactos ambientales, buena comunicación con software conocidos, etcétera), usan la misma interface pero difieren en las listas de unidades modeladas (procesos).

SuperPro, es una herramienta de cálculo ambiental para el diseño integrado de procesos. La herramienta se orienta hacia la industria Bioquímica, Farmacéutica, de alimentos, así como para los procesos de disposición, reciclado y tratamiento de residuos.

La herramienta se basa en el desarrollo de varias etapas que van desde las definición de los materiales a usar en el proceso, hasta la realización de reportes. Las fases que se desarrollan son las siguientes:

- Definición de componentes y mezclas.

- Clasificación y descripción de las corrientes.
- Descripción de los procedimientos, operaciones unitarias y equipos.
- Descripción de las condiciones de operación.
- Definición de las ayudas ofrecidas por la herramienta.
- Descripción de las características de los informes.
- Definición de las emisiones del proceso.
- Descripción de los casos de diseño.
- Evaluación de la interconectividad de la herramienta.

