



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla



FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

USO DE RESIDUOS PROPIOS DE LA FABRICACIÓN DE EPS PARA
LA PRODUCCIÓN DE UN RECUBRIMIENTO DE INTERIORES.

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
LICENCIADO EN INGENIERÍA QUÍMICA

PRESENTA:

BRAULIO DAVID MEDRANO ZEPEDA

DIRECTOR:

MTRO. MAGIN IDELFONSO TORREBLANCA RAMIREZ

H. PUEBLA DE ZARAGOZA, PUE. NOVIEMBRE 2025

Agradecimientos

- A mi director de tesis el Maestro Magin Torreblanca por la dedicación que mostro a lo largo del proyecto y su guía para la elaboración del trabajo
- A mi padre David Medrano por haberme formado en el hombre que soy y haber sido la inspiración de mi infancia para elegir este camino profesional
- A mi madre Esperanza Zepeda demostrarme que siempre hay mil y una maneras de hacer las cosas.
- A mis hermanos y mi perro Tesla por ser mi motor de superación
- A mis amigos por el tiempo compartido y todas las experiencias que pasamos a lo largo de la carrera.
- A mis amigos Alfonso Ramirez y Axel Varela por haber formado parte de este trabajo desde un principio que a pesar de no haberlo concluido juntos nos seguimos apoyando en nuestro desarrollo individual.

Resumen

Esta tesis evalúa la viabilidad técnica y económica de un recubrimiento para uso interior formulado a partir de residuos de poliestireno expandido (EPS) disueltos en solventes orgánicos. La selección del solvente se resolvió con base en parámetros de solubilidad, costo, disponibilidad, toxicidad y estabilidad. En pruebas preliminares de disolución, el D-limoneno mostró sedimentación y falta de coalescencia (adherencia 0A), por lo que fue descartado; la gasolina demostró compatibilidad con el EPS y generó mezclas homogéneas y aplicables. Con un diseño experimental de segundo orden (3×3 con punto central) se estudiaron las proporciones EPS: solvente 1:3, 1:2 y 1:1 y tiempos de mezclado 10–30 min, aplicando las formulaciones sobre sustratos porosos y evaluando la adherencia mediante ASTM D3359 (película $\geq 125 \mu\text{m}$).

Los resultados indican que 1:3 produce mezclas de viscosidad manejable, buena nivelación y adherencias altas (4A); 1:2 presenta gomosidad y adherencias intermedias (1A–2A); 1:1 exhibe baja homogeneidad y adherencia nula. Para potenciar la capacidad predictiva e identificar condiciones óptimas, se compararon tres modelos de aprendizaje supervisado (RSM cuadrático, SVR-RBF y GPR-Matérn) con validación LOOCV; el RSM obtuvo el mejor equilibrio entre explicabilidad y error ($R^2 \approx 0.945$; $\text{RMSE} \approx 0.313$; $\text{MAE} \approx 0.200$). La superficie de respuesta ubica una región de máximo desempeño cerca de EPS: solvente 1:3 y ~24 min, coherente con la evidencia experimental. En monitoreo a 30 días (criterios NMX-U-122-SCFI-2016), el recubrimiento mostró estabilidad en interiores; en exteriores se observaron amarilleamiento y descamación, por lo que se recomienda su empleo en interiores. El esquema propuesto contribuye a la valorización de residuos de EPS con insumos de bajo costo y procedimientos reproducibles. Se sugiere, como trabajo futuro, incorporar aditivos anti-UV y/o endurecedores para aplicaciones exteriores y realizar validaciones confirmatorias adicionales.

Índice

Resumen.....	3
Introducción.....	6
Planteamiento del problema.....	7
Justificación	8
Objetivo general	9
Objetivos específicos.....	9
Hipótesis.....	11
1. Marco de referencia	11
1.1 Antecedentes	11
1.1.1 Recubrimientos de poliestireno y derivados.....	11
1.1.2 Valorización del EPS como componente en pinturas y recubrimientos	11
1.1.3 Estado actual.....	13
1.2 Marco teórico.....	15
1.2.1 Origen y desarrollo del poliestireno	15
1.2.2 Características del EPS.....	15
1.2.3 Propiedades físico-mecánicas del EPS	15
1.2.4 Proceso de producción del EPS	17
1.2.5 Polimerización de estireno.....	17
1.2.6 Preexpansión y estabilización	17
1.2.7 Moldeo final.....	17
1.2.8 Disolventes en recubrimientos	17
1.2.9 Recubrimientos.....	18
1.2.10 Machine Learning supervisado en la formulación de materiales	19
2. Metodología	20
2.1 Acondicionamiento de materia prima	20
2.1.1 Recepción de los residuos de EPS	20
2.1.2 Selección de residuos de EPS	20
2.1.3 Identificación de solvente adecuado	22
2.1.4 Diseño experimental para pruebas de adherencia.	24
2.2 Elaboración de pruebas de adherencia	27

2.2.1 Procedimiento para prueba de adherencia	29
2.3 Entrenamiento del modelo de Machine Learning.....	31
2.3.1 Fundamento del algoritmo matemático.....	32
2.3.2 Validación y ajuste del modelo	33
2.3.3 Aplicación del recubrimiento a sustratos seleccionados	33
2.4 Seguimiento y evaluación de las condiciones	33
3 Resultados	42
3.1 Acondicionamiento de materia prima	42
3.2 Identificación de solvente adecuado	43
3.3 Elaboración	45
3.4 Entrenamiento del modelo de Machine Learning	47
3.5 Seguimiento y evaluación de las condiciones.....	54
Conclusiones	67
Recomendaciones.....	69
Anexos	69
Anexo 1	69
Anexo 2	79
Anexo 3	88
Referencias	96

Introducción

El poliestireno expandido (EPS) es un material ampliamente utilizado en la industria debido a sus propiedades de aislamiento térmico, ligereza y resistencia mecánica. Sin embargo, este material no es biodegradable y el manejo adecuado de sus residuos genera un impacto ambiental significativo. En respuesta a esta problemática diversas investigaciones buscan explorar alternativas para la reutilización del EPS.

En particular durante el proceso de polimerización del EPS presenta una deficiencia, lo que genera estructuras débiles de las perlas de poliestireno. Estas perlas al ser sometidas a choques mecánicos en ciclones utilizados para el transporte y almacenamiento provocan una fragmentación y pulverización generando el polvo de EPS que se convierte en un desperdicio.

En este contexto la presente investigación plantea el desarrollo de un recubrimiento para uso en interiores a partir de la disolución de residuos propios del proceso de producción de EPS en solventes orgánicos con el objetivo de aprovechar su composición polimérica y evaluar su adherencia con forme a la norma ASTM 3359. Con el objetivo de optimiza la formulación del recubrimiento se implementa un diseño experimental asistido por inteligencia artificial, seguido de un modelo de Machine Learning que permite predecir y mejorar las proporciones de la disolución de EPS en relación con su adherencia y estabilidad.

La investigación se estructura en varias etapas que incluyen la recolección del polvo de EPS generado en el proceso de producción, la selección de los solventes orgánicos adecuados, la ejecución de un diseño experimental para la evaluación de la adherencia, la implementación del modelo de machine learning y la aplicación del recubrimiento en sustratos específicos.

Planteamiento del problema

López y Canepa nos brindan una breve descripción del poliestireno expandido en 2013 como un material químicamente inerte, no biodegradable, que no se descompone ni desaparece del medio ambiente.

Actualmente, gran parte del poliestireno expandido producido es desechado en vertederos sin el tratamiento adecuado. Las industrias petroquímicas en la región de Puebla en México enfrentan varios problemas relacionados con la polimerización deficiente y los materiales de desecho debido a que la línea de proceso presenta diferentes puntos de falla como una mala polimerización en el reactor lo que genera que las perlas de poliestireno no se expandan y adquieran una estructura débil que debido a los choques y colisiones en los ciclones del proceso de transporte a los silos las perlas se pulvericen y genere un polvo amarillento con textura de polvo.

Las empresas no han desarrollado procesos efectivos para reintroducir estos residuos en la cadena de producción, por lo que han optado por eliminarlos de forma incorrecta en el medio ambiente.

A medida que se busca una mejor calidad de vida esto conlleva directamente un incremento en la demanda de bienes y servicios que satisfagan las demandas de los consumidores. Los plásticos tienen una gran capacidad de adaptarse a las necesidades específicas del propósito que se decida para su aplicación. Por ello más del 70% de los residuos plásticos corresponden a materiales como el polietileno, polipropileno, policloruro de vinilo y poliestireno. También mencionan que el poliestireno es el material de embalaje más utilizado actualmente. Por esta razón tiene una vida útil muy efímera a comparación de otros productos plásticos y es desechado en vertederos de cielo abierto tardando alrededor de 150 años en descomponerse (López D., 2014).

Justificación

La gestión de los residuos plásticos, especialmente el poliestireno expandido (EPS), es un reto medioambiental importante debido a sus características no biodegradables y a su efecto nocivo sobre el entorno natural. En México, la Ley General para la Prevención y Gestión Integral de Residuos (LGPGIR) regula el manejo de residuos industriales como el poliestireno expandido (EPS), estableciendo las responsabilidades de las empresas en cuanto a su disposición adecuada. La ley fomenta la reutilización, el reciclaje y la disposición adecuada de los residuos, además de exigir la implementación de planes de manejo cuando los residuos se consideran de manejo especial.

La norma oficial mexicana NOM-161-SEMARNAT-2011 establece criterios específicos para la clasificación de los residuos de manejo especial y la creación de planes de manejo adecuados. Esta normativa es particularmente relevante para las empresas del sector petroquímico, ya que generan grandes volúmenes de poliestireno expandido (EPS) y requieren la implementación de acciones correctivas para minimizar el impacto ambiental. Estas acciones incluyen la minimización de la generación de residuos, el reciclaje y la correcta disposición final de los residuos que no pueden ser reutilizados.

Esta investigación surge de la necesidad de propuestas alternativas para la disposición de residuos derivados del proceso de producción del poliestireno expandido (EPS), con el objetivo de evitar prácticas que perjudiquen al medio ambiente y explorar la posibilidad de su reutilización mediante el desarrollo de un recubrimiento interior por disolución en solventes. Este recubrimiento contribuye a la reducción de residuos plásticos además de ofrecer un producto con valor agregado.

La correcta implementación de esta propuesta no solo facilitará el cumplimiento de la legislación y normativa vigente, sino que también contribuirá a la reducción del impacto ambiental de la empresa. Al reutilizar los residuos del proceso de

producción de EPS en la producción de un recubrimiento para interiores, la empresa no solo cumple con los requisitos legales, sino que también refuerza su compromiso con la sostenibilidad y la responsabilidad social, alineándose con prácticas más ecológicas.

Finalmente, la justificación de la implementación de la inteligencia artificial para el desarrollo de este proyecto es con la intención de generar una conciencia de que actualmente contamos con una herramienta con un gran potencial, pero este potencial depende directamente de las capacidades de quienes utilizan esta herramienta, no reemplaza el trabajo humano. Pero también ofrece infinidad de facilidades con las que cualquier proyecto puede contar gestionando adecuadamente los medios a su alcance.

Objetivo general

Desarrollar un recubrimiento para interiores a partir de la disolución de residuos del proceso de producción de poliestireno expandido (EPS), evaluando su viabilidad técnica y económica como alternativa para la fabricación de recubrimientos.

Objetivos específicos

- Caracterizar y seleccionar solventes potenciales para la disolución de residuos de EPS con base en parámetros de solubilidad, costo, disponibilidad, toxicidad y estabilidad
- Realizar pruebas de disolución a escala de laboratorio con proporciones EPS: solvente 1:3, 1:2 y 1:1 y tiempos de mezclado 10–

30 min, registrando propiedades de aplicación homogeneidad y adherencia.

- Diseñar y ejecutar un diseño experimental de segundo orden para evaluar la adherencia de acuerdo con la norma ASTM D-33569.
- Desarrollar un modelo de aprendizaje supervisado de Machine Learning para analizar los datos de proporciones de la disolución de EPS en solventes orgánicos, utilizando datos obtenidos del diseño experimental para maximizar la adherencia del recubrimiento.
- Monitorear el desgaste del recubrimiento durante un período de 30 días aplicado a un bloque de concreto en condiciones de interiores sin exposición al sol ni desgaste por tránsito peatonal en base a las características enunciadas en la norma NMX-U-122-SCFI-2016.
- Seguimiento del desgaste del recubrimiento durante un periodo de 30 días, aplicado a una zona peatonal en condiciones de tráfico y exposición ambiental en base a las características enunciadas en la norma NMX-U-122-SCFI-2016.

Hipótesis

La solución de residuos derivados del proceso de producción de poliestireno expandido (EPS) permite el desarrollo de un recubrimiento para interiores, con adherencia mínima de grado 3A según la norma ASTM 3359, bajo condiciones controladas de formulación y aplicación

1. Marco de referencia

1.1 Antecedentes

1.1.1 Recubrimientos de poliestireno y derivados

El poliestireno (PS), un polímero termoplástico ampliamente utilizado en envases, construcción y embalaje presenta propiedades como baja densidad, resistencia química y capacidad dieléctrica, que han motivado su exploración en aplicaciones no convencionales, incluyendo recubrimientos. Las formulaciones a base de copolímeros de estireno (como el estireno-butadieno) han sido aprovechadas en sistemas de recubrimientos protectores por su buena adhesión y flexibilidad, particularmente en superficies porosas (Tracton, 2006; Wicks et al., 2007).

En su forma expandida (EPS), el PS puede disolverse en solventes orgánicos no polares para formar mezclas viscosas que, al aplicarse sobre sustratos sólidos, generan películas con potencial impermeabilizante y adhesivo. Esta propiedad ha despertado interés en proyectos que buscan reutilizar el EPS como materia prima para barnices o pinturas de bajo costo y reducido impacto ambiental.

1.1.2 Valorización del EPS como componente en pinturas y recubrimientos

En Ecuador, Pila Guagua (2023) diseñó un proceso técnico para la obtención de pintura acrílica impermeabilizante a partir de residuos de poliestireno expandido. En

este trabajo se caracterizó el EPS conforme a la norma ASTM D6817:2018 y se formuló un recubrimiento estable mediante su disolución en thinner acrílico. La solución se mezcló con selladores y otros aditivos para obtener una formulación con buenas propiedades de pH (entre 7.1 y 8.2), viscosidad y resistencia al lavado. El proyecto incluyó el dimensionamiento de equipos de trituración y mezclado, así como la validación técnica de la pintura conforme a la norma NTC 1335:2015, evidenciando la viabilidad de utilizar residuos de EPS como base funcional para recubrimientos industriales.

Por su parte, Figueroa Pacheco y Parra Bocanegra (2022) realizaron un estudio de prefactibilidad para una planta de producción de pintura ecológica a base de EPS disuelto en D-limoneno. Este trabajo técnico-económico propuso usar residuos de poliestireno como fase polimérica en pinturas látex para interiores. Se destacaron ventajas en costos, accesibilidad de materias primas y atributos ecológicos, verificando que el producto era comparable en características técnicas a las pinturas convencionales de uso doméstico.

Ambos estudios coinciden en la necesidad de reducir el impacto ambiental generado por el EPS posconsumo, que puede tardar más de 500 años en degradarse en condiciones ambientales. Además, demuestran que el reciclaje físico mediante disolución es una alternativa viable y tecnológicamente accesible, con potencial de implementación en contextos urbanos e industriales.

Por tanto, el aprovechamiento de residuos de EPS mediante su transformación en recubrimientos ofrece una alternativa sustentable en el marco de la economía circular, al mismo tiempo que genera productos funcionales con propiedades comparables a las pinturas convencionales. La literatura técnica indica que el desempeño de estos recubrimientos depende de factores como el solvente, la proporción polimérica y el método de aplicación, los cuales pueden optimizarse mediante diseño experimental y análisis multivariable.

1.1.3 Estado actual

Debido a que el poliestireno es uno de los plásticos más utilizados actualmente se está buscando diferentes aplicaciones al reciclaje de este polímero con la finalidad de alargar su ciclo de vida.

En América Latina, diversas universidades han desarrollado investigaciones aplicadas para convertir residuos de EPS en pinturas o recubrimientos. Por ejemplo, en la Universidad de San Carlos de Guatemala se estudió un sistema de producción más limpio en fábricas de pintura arquitectónica e industrial, integrando principios de economía circular para reducir el uso de polímeros vírgenes. Por su parte, en la Universidad de Lima se elaboró un estudio de prefactibilidad para una planta de producción de pintura con EPS disuelto en D-limoneno, destacando no solo la viabilidad técnica del proceso, sino también su aceptación comercial por parte de consumidores interesados en productos ecológicos.

En Ecuador, en la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo (ESPOCH), se propuso un proceso completo de obtención de pintura acrílica impermeabilizante a partir de EPS disuelto en thinner. El estudio incluyó la caracterización fisicoquímica del recubrimiento, y demostró que bajo formulaciones específicas es posible alcanzar parámetros comparables a los de pinturas comerciales, en términos de viscosidad, tiempo de secado y resistencia al lavado.

A nivel técnico, las aplicaciones más recientes del poliestireno expandido (EPS) reciclado en recubrimientos han destacado por su versatilidad y bajo costo, siendo útiles en sectores como la construcción, la señalización y los pisos de alto tráfico. Esto se debe a su facilidad para mezclarse con solventes orgánicos, su capacidad para formar películas adherentes y su accesibilidad económica. Por ejemplo, Gutiérrez-Velásquez et al. (2022) desarrollaron un método que combina el EPS con aditivos para crear pinturas con diversas propiedades funcionales, logrando buena adherencia en superficies como concreto y asfalto, además de un secado rápido.

En México, la Universidad Autónoma de Nuevo León llevó a cabo estudios que demostraron que el EPS reciclado puede reprocesarse como un eficaz aislante térmico. Este material alcanza temperaturas de degradación cercanas a los 416 °C y presenta morfologías homogéneas con baja porosidad, según análisis realizados con microscopía electrónica de barrido (SEM). Estos hallazgos indican que el EPS mantiene su integridad estructural al ser transformado en películas, lo que lo hace ideal para su uso como barniz o recubrimiento.

Por otro lado, en Colombia, investigadores de la Universidad de Antioquia han utilizado el EPS reciclado como un recubrimiento impermeabilizante para electrodos en soldadura subacuática. Los resultados muestran un rendimiento comparable al de los barnices industriales tradicionales, lo que amplía las posibilidades de aplicación de este material reciclado.

Estos desarrollos muestran que las tecnologías de reciclaje del EPS están trascendiendo los laboratorios para integrarse en la industria, motivadas por una creciente conciencia ambiental, la búsqueda de soluciones económicas y el cumplimiento de regulaciones ambientales. Sin embargo, aún hay retos por superar, como la optimización de variables clave: el tipo y la cantidad de solvente, la estabilidad del recubrimiento y su resistencia al desgaste. Esto abre la puerta a enfoques innovadores, como el uso de diseño experimental y herramientas de inteligencia artificial para perfeccionar las formulaciones.

En resumen, el EPS reciclado se consolida como una alternativa prometedora en la creación de recubrimientos, con aplicaciones prácticas que benefician tanto a la industria como al medio ambiente.

1.2 Marco teórico

1.2.1 Origen y desarrollo del poliestireno

El poliestireno (PS) fue descubierto en 1839 por el farmacéutico alemán Eduard Simon, quien lo aisló a partir de una resina natural sin identificar su naturaleza polimérica. Décadas después, Hermann Staudinger, pionero de la química macromolecular, elucidó su estructura como un polímero formado por cadenas de monómeros de estireno, estableciendo los fundamentos de la ciencia de polímeros al demostrar que los plásticos derivan de unidades moleculares repetitivas de bajo peso molecular (Staudinger, 1922). Actualmente, los tipos de poliestireno más relevantes en la industria son el poliestireno expandido (EPS) y el poliestireno extruido (XPS), que se diferencian por su densidad, morfología celular y procesos de fabricación.

1.2.2 Características del EPS

El EPS es un material termoplástico celular derivado del monómero de estireno, cuya estructura consiste en una matriz de celdas cerradas que encapsulan aire. Esta configuración le confiere baja densidad, excelente capacidad de aislamiento térmico y propiedades de amortiguación, lo que lo hace idóneo para aplicaciones en embalaje, construcción, almacenamiento de alimentos y aislamiento térmico (Plastics Europe, 2021). Sin embargo, su reciclaje enfrenta desafíos debido a su bajo peso volumétrico y gran volumen, lo que eleva los costos logísticos y requiere procesos especializados de revalorización.

1.2.3 Propiedades físico-mecánicas del EPS

El poliestireno expandido presenta una serie de propiedades físico-mecánicas que lo hacen especialmente útil para diversas aplicaciones industriales, aunque también condicionan su comportamiento en procesos de reciclaje o reutilización.

Una de sus características más distintivas es su baja densidad, la cual varía generalmente entre 12 y 48 kg/m³, dependiendo del grado de expansión logrado durante el proceso de fabricación. Esta propiedad, además de reducir

significativamente su peso, le otorga una gran eficiencia como aislante térmico y facilidad de manipulación, aunque también incrementa el volumen de residuos plásticos generados por unidad de masa.

En cuanto a la resistencia a la compresión, el EPS exhibe una capacidad notable para soportar cargas estáticas o dinámicas sin deformarse permanentemente. Según la norma ASTM C578, esta propiedad se encuentra típicamente en el rango de 35 a 690 kPa, lo cual permite su utilización en sistemas constructivos y empaques con requerimientos estructurales moderados.

Desde el punto de vista térmico, el EPS posee una baja conductividad térmica, en el orden de 0.033 a 0.038 W/m·K, lo que lo convierte en un excelente material de aislamiento térmico para edificaciones y sistemas de refrigeración. Esta propiedad está directamente relacionada con su estructura de celdas cerradas, que encapsulan aire y limitan la transferencia de calor por conducción.

La resistencia a la flexión del EPS es otra propiedad relevante, aunque más limitada que la compresiva. El material es capaz de resistir ciertas deformaciones antes de fracturarse, con valores comprendidos entre 70 y 690 kPa. Sin embargo, su estructura celular restringe esta propiedad en comparación con materiales poliméricos más densos.

Respecto a la resistencia química, el EPS presenta una estabilidad aceptable frente a ambientes neutros o ligeramente ácidos. Su comportamiento se ve comprometido en presencia de disolventes orgánicos como tolueno, xileno o gasolina, que pueden solubilizar el material rompiendo las fuerzas intermoleculares de las cadenas poliméricas. Esta vulnerabilidad, sin embargo, ha sido aprovechada en diversas propuestas de reciclaje por disolución, donde dichos solventes permiten obtener soluciones poliméricas reutilizables para la formulación de recubrimientos, adhesivos u otros productos funcionales.

Estas propiedades, en conjunto, justifican el interés por el EPS tanto como material útil en aplicaciones técnicas, como por su potencial de valorización mediante técnicas físico-químicas orientadas al reciclaje avanzado.

1.2.4 Proceso de producción del EPS

La producción de EPS implica dos etapas principales: la síntesis del polímero base (polimerización en suspensión) y el proceso de expansión física mediante vapor y agentes expansores.

1.2.5 Polimerización de estireno

La polimerización en suspensión se realiza en reactores de tanque agitado continuo (CSTR), donde el estireno se dispersa en una fase acuosa con agentes suspensores, formando microgotas de 0.1 a 1 mm. La reacción ocurre a temperaturas controladas, empleando agitación eficiente y aditivos estabilizantes para evitar la aglomeración de las partículas.

1.2.6 Preexpansión y estabilización

Las perlas poliméricas resultantes se exponen a vapor de agua (80–110 °C), activando el agente expansor (generalmente pentano), lo que incrementa su volumen hasta 50 veces. Posteriormente, se estabilizan durante 24 horas, permitiendo la difusión de aire en las celdas. Esta etapa puede generar residuos sólidos por colapsos estructurales o pérdidas de agente expansor, los cuales son susceptibles de revalorización.

1.2.7 Moldeo final

Las perlas estabilizadas se someten a una segunda exposición a vapor en moldes perforados, donde se fusionan para formar bloques o piezas específicas. Los productos defectuosos o rechazos generados en esta etapa también son aprovechables para reciclaje.

1.2.8 Disolventes en recubrimientos

Los disolventes son componentes esenciales en formulaciones de recubrimientos líquidos. Su función principal es disolver el aglutinante (resina), reducir la viscosidad para facilitar la aplicación, y evaporarse durante el secado dejando una película uniforme.

Entre los solventes más utilizados en pinturas están los hidrocarburos alifáticos y aromáticos (tolueno, xileno, gasolina), éteres de glicol, ésteres de ácido acético y cetonas (Stoye & Freitag, 1998). También se ha explorado el uso de disolventes verdes como el D-limoneno por su baja toxicidad y origen renovable.

La selección del solvente influye en la reología, tiempo de secado, poder de disolución y comportamiento ambiental del recubrimiento.

1.2.9 Recubrimientos

Definición y función

Un recubrimiento es una capa aplicada sobre un sustrato para protegerlo contra agentes físicos, químicos o ambientales, o para modificar sus propiedades superficiales o estéticas (Tracton, 2005). Sus funciones incluyen protección contra intemperie, corrosión, abrasión, así como propiedades decorativas o funcionales, como efectos antifúngicos o térmicos.

Composición general

Los recubrimientos líquidos se componen de:

- **Aglutinantes:** resinas poliméricas que forman la matriz de la película.
- **Solventes:** disuelven y dispersan los componentes.
- **Pigmentos:** proporcionan color, opacidad y protección UV.
- **Aditivos:** modifican propiedades reológicas, actúan como humectantes o antiespumantes, entre otros.

(Tracton, 2005; Wicks et al., 2007)

Tipología de recubrimientos

- **Orgánicos:** basados en resinas sintéticas como acrílicas, alquídicas o epóxicas.
- **Inorgánicos:** formulados con compuestos como óxidos metálicos (alúmina, sílice, titanio).

- Híbridos: combinaciones orgánico-inorgánicas con funcionalidades específicas.

1.2.10 Machine Learning supervisado en la formulación de materiales

El aprendizaje supervisado es una técnica de inteligencia artificial que permite construir modelos predictivos a partir de datos etiquetados. En el contexto de ingeniería de materiales, puede emplearse para optimizar formulaciones mediante el ajuste de variables experimentales como proporciones de disolución, tiempos de mezclado y selección de solventes.

Algoritmos como regresión lineal, árboles de decisión, random forest y redes neuronales se utilizan para encontrar correlaciones entre variables independientes (tipo de solvente, proporción EPS: solvente, tiempo de mezcla) y resultados deseados (adherencia, viscosidad, homogeneidad).

Esta metodología puede ser implementada con herramientas computacionales como Python y bibliotecas como Scikit-learn o TensorFlow, ofreciendo una alternativa sistemática para el análisis de datos experimentales complejos.

2. Metodología

En el presente estudio, se desarrolló un barniz a partir de residuos sólidos provenientes del proceso de EPS. Para ello, se recibieron residuos de industrias locales en la ciudad de Puebla, los cuales fueron caracterizados inicialmente mediante la determinación de su densidad. Se seleccionaron dos solventes orgánicos adecuados, considerando su disponibilidad, costo y seguridad en la manipulación. Con el objetivo de optimizar la formulación del barniz, se implementó un diseño experimental de segundo orden para evaluar el efecto de tres variables: el tipo de solvente, la relación EPS-solvente y el tiempo de disolución, sobre la adherencia del recubrimiento. Este diseño permite analizar tanto los efectos principales como las interacciones y efectos cuadráticos de las variables continuas. Los datos obtenidos se utilizarán para entrenar un modelo de aprendizaje supervisado, el cual permitirá predecir la adherencia del barniz en función de las variables de formulación. Finalmente, mediante este modelo, se identificarán las condiciones óptimas que maximicen la adherencia del recubrimiento.

2.1 Acondicionamiento de materia prima

2.1.1 Recepción de los residuos de EPS

Se nos fueron proporcionadas las muestras de residuos de poliestireno expandido de diferentes industrias petroquímicas cercanas al estado de Puebla, México.

2.1.2 Selección de residuos de EPS

Durante la etapa de recolección y caracterización de los residuos generados en el proceso de producción de poliestireno expandido, se identificaron tres tipos principales de subproductos:

- **Muestra 1:** perlas de EPS sin expandir, contaminadas con tierra y residuos orgánicos (hojas).



Figura 1. Muestra 1 perlas sin expandir de EPS

- **Muestra 2:** polvo de EPS de color amarillo, generado por fricción y colisión durante el transporte neumático en la línea de preexpansión.

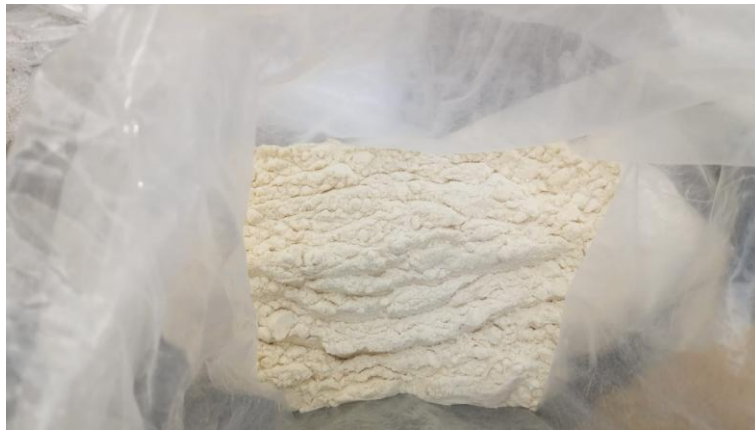


Figura 2. Muestra 2 polvo de EPS

- **Muestra 3:** hojuelas de EPS de diferentes tamaños, producto del corte y manipulación de bloques parcialmente expandidos.



Figura 3. Muestra 3 Hojuelas de EPS

2.1.3 Identificación de solvente adecuado

La selección de los solventes empleados para la disolución del poliestireno expandido (EPS) se realizó tomando en cuenta criterios técnicos, de seguridad y de disponibilidad práctica. La intención fue elegir sustancias que no solo ofrecieran un buen desempeño en la etapa experimental, sino que también resultaran viables en una eventual aplicación industrial. Para ello, se consideraron cuatro aspectos fundamentales:

- Costo: se dio prioridad a solventes con precios accesibles, que permitan proyectar un proceso económicamente viable a mayor escala.
- Disponibilidad: se eligieron sustancias de fácil acceso en el mercado local, lo que reduce tiempos de adquisición y asegura continuidad en caso de futuras aplicaciones industriales.
- Toxicidad: se consultaron valores de LD_{50} y fichas de seguridad para minimizar riesgos durante el manejo y almacenamiento.
- Estabilidad y reactividad: se analizó principalmente el punto de inflamación como indicador de seguridad ante posibles fuentes de calor, así como otros comportamientos relevantes bajo condiciones normales de uso.

Con base en estos criterios, se evaluaron cuatro solventes: xileno, D-limoneno, gasolina (Magna PEMEX) y acetato de etilo. A partir de esta primera revisión técnica y documental, se seleccionaron dos solventes para las pruebas preliminares de disolución, lo que permitió observar directamente su desempeño frente al EPS.

Finalmente, se elegirá un solo solvente para la etapa de diseño de experimentos, asegurando que la optimización de la formulación del recubrimiento se realice bajo condiciones representativas y técnicamente sólidas.

Tabla 1. Identificación de solvente adecuado

	Xileno	D-limoneno	Gasolina (Magna PEMEX)	Acetato de etilo
Costo [MXN. /L]	629.3-680	350-366	23.6	110-130
Disponibilidad	5-10 días hábiles para entrega.	1-2 días naturales para entrega.	Inmediato acudiendo al lugar.	1-15 días para entrega.
Toxicidad	LD50: 3523 mg/kg irritación cutánea y ocular grave. Mortal en caso de penetración a vías respiratorias	LD50: 5200 mg/kg Puede causar una reacción alérgica en la piel	N/D Aguda: peligro por inhalación a temperatura ambiente	LD50: 5620 mg/kg Irritación ocular grave
Estabilidad y reactividad	-Punto de inflamación: 25°C -Riesgo de ignición -Los vapores pueden generar mezclas	-Punto de inflamación: 51°C -Estable en condiciones normales -No es reactivo de acuerdo con	-Punto de inflamación: ≥60°C -Se oxida en contacto con el aire -Estable en condiciones	-Punto de inflamación: -4°C -Vapores pueden formar con el aire una mezcla explosiva -Puede causar descomposición

	explosivas en el aire - Mantener alejado del calor, de superficies calientes, de chispas, de llamas abiertas y de cualquier otra fuente de ignición. No fumar	la información facilitada	normales de uso -Evitar fuentes de ignición	por mucha exposición a la luz -Materiales incompatibles: diferentes plásticos -Mantener alejado de la luz, el calor y la humedad.
--	--	------------------------------	--	--

2.1.4 Diseño experimental para pruebas de adherencia.

El diseño experimental propuesto en esta investigación tiene como objetivo evaluar el desempeño de disoluciones de EPS formuladas exclusivamente con gasolina, un hidrocarburo derivado del petróleo ampliamente disponible y con alta capacidad de disolución para polímeros apolares. Estas disoluciones serán aplicadas como recubrimientos sobre sustratos porosos con el propósito de determinar su eficacia funcional en condiciones controladas.

La selección de la relación de estas disoluciones se fundamenta en los resultados reportados por González Muñoz (2022), quienes investigaron la disolución de EPS en D-limoneno utilizando relaciones EPS: solvente de 1:1, 1:2 y 1:3. En dicho estudio, se demostró que el EPS es completamente soluble en todas las proporciones evaluadas; sin embargo, la viscosidad y la aplicabilidad de las disoluciones variaron significativamente. Se observó que una mayor proporción de solvente (1:3) mejora la manejabilidad y la homogeneidad de la mezcla, mientras que proporciones con mayor concentración de polímero (1:1) generan recubrimientos más densos con potencial para una mayor adherencia.

Con base en estos antecedentes, se definieron tres relaciones EPS: solvente para el diseño experimental: 1:1, 1:2 y 1:3. Estas proporciones abarcan un rango amplio, desde formulaciones ricas en solvente hasta mezclas con alta concentración de polímero, permitiendo analizar el impacto de la composición en las propiedades fisicoquímicas y funcionales del recubrimiento.

La selección de los sustratos, concreto y ladrillo, se fundamenta en su uso predominante en aplicaciones arquitectónicas de interiores, donde sus propiedades superficiales, como porosidad y rugosidad, influyen significativamente en el desempeño de los recubrimientos, particularmente en términos de anclaje mecánico y adherencia. Estas características permiten evaluar la versatilidad de las disoluciones de poliestireno expandido (EPS) en contextos reales de aplicación.

Para la etapa experimental, se empleó un diseño factorial 3×3, considerando como factores independientes la proporción EPS: solvente (1:3, 1:2 y 1:1) y el tiempo de mezclado (10, 15 y 30 minutos). Cada combinación experimental fue replicada para estimar la variabilidad y robustecer el análisis estadístico. Además, se incluyeron puntos centrales replicados (1:2, 15 minutos) para mejorar la estimación del error puro y permitir contrastar la presencia de curvatura en el sistema. En total se realizaron 24 corridas experimentales, las cuales fueron aleatorizadas para reducir sesgos asociados a factores externos como temperatura y humedad ambiental.

Una vez preparadas las disoluciones, los recubrimientos se aplicaron sobre los sustratos seleccionados, controlando el espesor húmedo para garantizar un espesor seco $\geq 125 \mu\text{m}$. Luego de un periodo de curado de 24 horas, se evaluó la adherencia mediante la prueba tipo cross-cut, conforme a la norma ASTM D-3359, registrando la clasificación en la escala 0A–5A. Los datos obtenidos fueron codificados para su análisis multivariable, permitiendo correlacionar las variables de formulación con la respuesta de adherencia. Estos resultados servirán posteriormente para el entrenamiento de modelos de aprendizaje supervisado, con el objetivo de predecir y optimizar las condiciones experimentales que maximicen el desempeño del recubrimiento.

Este diseño permite estudiar tanto los efectos principales como las posibles interacciones entre los factores, además de proporcionar puntos centrales y réplicas para validar la existencia de curvatura en el sistema y aumentar la robustez estadística del análisis. Las combinaciones experimentales definidas se detallan en la Tabla 2, y constituyen la base para la etapa de aplicación de los recubrimientos sobre ladrillo y concreto, los cuales serán posteriormente evaluados en términos de adherencia según la norma ASTM D-3359.

Tabla 2. *Diseño experimental de disoluciones de EPS*

Ensayo	X1 (Proporción)	X2 (Tiempo)	Proporción real EPS: solvente	Tiempo (min)
1	0	-1	1:2	10
2	-1	-1	1:3	10
3	0	0	1:2	15
4	1	0	1:1	15
5	-1	0	1:3	15
6	0	1	1:2	30
7	0	0	1:2	15
8	1	-1	1:1	10
9	-1	1	1:3	30
10	1	1	1:1	30
11	0	0	1:2	15
12	0	-1	1:2	10
13	-1	-1	1:3	10
14	0	0	1:2	15
15	1	0	1:1	15
16	-1	0	1:3	15
17	0	1	1:2	30

18	-1	1	1:3	30
19	1	-1	1:1	10
20	1	1	1:1	30
21	0	0	1:2	15
22	0	0	1:2	15
23	0	0	1:2	15
24	0	0	1:2	15

Este esquema experimental permite obtener un conjunto de datos estructurado y balanceado, con suficiente variabilidad interna para capturar los efectos principales, las interacciones y la posible curvatura entre la proporción EPS: solvente y el tiempo de mezclado, garantizando así la representatividad de las condiciones operativas. La inclusión de puntos centrales replicados contribuye a estimar con mayor precisión el error puro y evaluar la falta de ajuste del modelo, lo que fortalece la calidad de la información experimental. Esta estrategia no sólo mejora la confiabilidad de los resultados, sino que además proporciona una base estadísticamente sólida para el desarrollo de un modelo de regresión polinomial de segundo orden, empleado posteriormente en la etapa de análisis predictivo. De esta manera, el diseño factorial implementado facilita la integración eficiente de herramientas de Machine Learning, permitiendo interpolar y recomendar configuraciones óptimas dentro del dominio experimental, asegurando así la reproducibilidad y validez técnica de las conclusiones obtenidas.

2.2 Elaboración de pruebas de adherencia

Para la preparación de las muestras correspondientes a cada tratamiento definido en el diseño experimental, se pesaron los materiales conforme a las proporciones establecidas, empleando una balanza marca Genomsnitt. Las proporciones de los pesos de cada una de las muestras y el tiempo de mezclado se encuentran en la tabla 3.

Tabla 3. Tabla de elaboración de disoluciones

Ensayo	EPS(g)	Solvente (g)	Tiempo real
1	50	100	10
2	50	150	10
3	50	100	15
4	50	50	15
5	50	150	15
6	50	100	30
7	50	100	15
8	50	50	10
9	50	150	30
10	50	50	30
11	50	100	15
12	50	100	10
13	50	150	10
14	50	100	15
15	50	50	15
16	50	150	15
17	50	100	30
18	50	150	30
19	50	50	10
20	50	50	30
21	50	100	15
22	50	100	15
23	50	100	15
24	50	100	15

Posteriormente, se llevó a cabo la disolución del poliestireno expandido (EPS) en el solvente seleccionado mediante agitación mecánica. Para este fin, se utilizó un rotomartillo de alta velocidad marca Ryobi, modelo VVR, con capacidad de percusión de 13 mm, velocidad variable de hasta 3000 RPM, potencia nominal de 600 W y consumo de corriente de 5 A. La selección de este equipo se fundamentó en su disponibilidad, facilidad de operación y capacidad para proporcionar una agitación continua y homogénea, asegurando el contacto efectivo entre el EPS y el solvente, lo que promueve una disolución completa y evita la presencia de partículas no disueltas.

Una vez obtenida la disolución homogénea, esta se aplicó manualmente sobre los sustratos seleccionados (ladrillo y concreto) utilizando una espátula metálica, asegurando que la película formada alcanzara un espesor mínimo de 125 μm , conforme a los requerimientos de la norma ASTM D-3359 para la validez del ensayo de adherencia. Las muestras recubiertas se mantuvieron en condiciones controladas durante 24 horas para garantizar el secado completo de la película antes de proceder con la evaluación de la adherencia mediante el método cross-cut.

2.2.1 Procedimiento para prueba de adherencia

Se utilizará el método de evaluación A de la prueba estándar ASTM D-3359 debido a que es indicada para pruebas de campo.

- 1) Seleccione un área libre de imperfecciones superficiales. Para las pruebas de campo, asegúrese de que la superficie esté limpia y seca. Las temperaturas o la humedad relativa extremas pueden afectar la adherencia de la cinta o del recubrimiento.
- 2) Para muestras sumergidas: Después de la inmersión, limpie y seque la superficie con un disolvente adecuado que no dañe la integridad del recubrimiento. A continuación, seque o prepare la superficie, o ambas, según lo acordado entre el comprador y el vendedor.
- 3) Realice dos cortes en la película, cada uno de aproximadamente 40 mm (1,5 pulg.) de largo, que se intersequen cerca de la mitad con un ángulo menor

de entre 30 y 45°. Al realizar las incisiones, utilice la regla y corte a través del recubrimiento hasta el sustrato con un movimiento constante.

- 4) Inspeccione las incisiones para detectar el reflejo de la luz del sustrato metálico y así comprobar que la película de recubrimiento ha sido penetrada. Si no se ha alcanzado el sustrato, haga otra X en un lugar diferente. No intente profundizar un corte previo, ya que esto puede afectar la adhesión a lo largo de la incisión.
- 5) Cada día de prueba, antes de iniciarla, retire dos vueltas completas de cinta sensible a la presión del rollo y deséchelas. Retire un trozo adicional a un ritmo constante (es decir, sin tirones) y corte un trozo de aproximadamente 75 mm (3 pulgadas) de largo.
- 6) Coloque el centro de la cinta en la intersección de los cortes, con la cinta en la misma dirección que los ángulos más pequeños. Alise la cinta con el dedo en el área de las incisiones y luego frote firmemente con la goma de borrar de un lápiz. El color debajo de la cinta transparente es un indicador útil de que se ha logrado un buen contacto.
- 7) Dentro de los 90 ± 30 s posteriores a la aplicación, retire la cinta sujetando el extremo libre y tirando de él rápidamente (sin sacudidas) hacia atrás sobre sí mismo en un ángulo lo más cercano posible a 180°.
- 8) Inspeccione el área de corte en X para detectar la eliminación del recubrimiento del sustrato o del recubrimiento anterior y evalúe la adhesión de acuerdo con la siguiente escala:

Tabla 4. Escala de adherencia según ASTM D-3359 (categorías 5A–1A)

Escala	Descripción
5 A	Sin desprendimiento ni remoción
4 A	Rastreo de desprendimiento o remoción a lo largo de las incisiones o en su intersección
3 A	Remoción irregular a lo largo de las incisiones de hasta 1.6 mm (1/16 pulg.) a cada lado.
2 A	Remoción irregular a lo largo de la mayoría de las incisiones de hasta 3.2 mm (1/8 pulg.) a cada lado.
1 A	Remoción más allá del área de la X.

Nota. Adaptado de ASTM D-3359-17, *Standard Test Methods for Rating Adhesion by Tape Test*, ASTM International (2017).

9) Repetir la prueba en otras dos ubicaciones. (ASTM D-3359,2025)

2.3 Entrenamiento del modelo de Machine Learning

Dado que el número de experimentos realizados es limitado y el dominio de estudio está acotado, se seleccionaron modelos interpolativos de baja complejidad paramétrica. La regresión polinomial de segundo orden se eligió modelo base debido a su alineación con el diseño factorial central y su alta interpretabilidad. Para mejorar la capacidad predictiva y obtener una estimación de incertidumbre, se empleó Gaussian Process Regression con kernel radial, técnica recomendada en problemas de superficie de respuesta con pocos datos. La selección final se fundamentó en la comparación de métricas de validación cruzada (R^2 , RMSE y MAE), privilegiando el modelo que ofreciera el mejor equilibrio entre precisión y simplicidad matemática.

2.3.1 Fundamento del algoritmo matemático

- **Regresión polinomial de segundo orden (RSM).**

La metodología de superficies de respuesta modela la variable de salida (Y) mediante una superficie cuadrática global que capta efectos principales, interacción y curvatura en dominios acotados.

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_{12} X_1 X_2 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \varepsilon$$

Donde:

- Y: predicción de la adherencia.
- X1: proporción EPS: solvente
- X2: tiempo de mezclado
- Bi: coeficientes del modelo
- E: error aleatorio

Esta formulación permite capturar tanto los efectos individuales como las sinergias entre las variables, siendo adecuada para sistemas donde la respuesta no varía linealmente respecto a los factores de entrada.

- **Gaussian Process Regression (GPR / Kriging).**

El GPR modela la respuesta como una realización de un proceso gaussiano $f(x) \sim \mathcal{GP}(m(x), k(x, x'))$, donde el kernel k codifica suavidad y correlación espacial entre puntos del diseño. Emplearemos un kernel Matérn $\nu = 3/2$ con ruido aditivo y longitudes de escala por dimensión (ARD) para reflejar diferentes “alcances” de correlación en ϕ y t . Dado un conjunto de entrenamiento (X, y) , la media posterior $\mu(x_*)$ actúa como predictor interpolativo y la varianza posterior $\sigma^2(x_*)$ cuantifica la incertidumbre de predicción, lo que permite reportar bandas de confianza y priorizar validaciones confirmatorias cerca del óptimo.

- **Support Vector Regression (SVR) con kernel RBF.**

El SVR busca una función $f(x) = \sum_i (\alpha_i - \alpha_i^*)K(x_i, x) + b$ que minimice la norma del modelo en un espacio de características inducido por el kernel y penalice únicamente errores mayores que un umbral ε (pérdida ε -insensitive). Con kernel RBF $K(x, x') = \exp(-\gamma \|x - x'\|^2)$, el modelo genera superficies suaves e interpolativas adecuadas para dominios compactos. La complejidad y la suavidad de la función se controlan mediante los hiperparámetros C (penalización), γ (ancho del RBF) y ε (tolerancia).

2.3.2 Validación y ajuste del modelo

El modelo se entrenó utilizando el conjunto de datos obtenido a partir del diseño de experimentos, compuesto por 24 condiciones experimentales codificadas, incluyendo puntos factoriales, centrales y axiales. Se aplicó una validación cruzada interna para verificar la capacidad predictiva del modelo, evaluando los indicadores de desempeño: coeficiente de determinación (R^2) y error cuadrático medio (RMSE).

2.3.3 Aplicación del recubrimiento a sustratos seleccionados

El recubrimiento se aplicará sobre los sustratos como concreto y ladrillo debido a que busca realizar una comparativa del recubrimiento a base de residuos de EPS con productos similares en el mercado.

El recubrimiento se aplicará mediante rodillos de alta densidad para garantizar una aplicación uniforme y un espesor de 0.02 mm. Esto minimiza los tiempos de aplicación y el riesgo de evaporación del solvente.

2.4 Seguimiento y evaluación de las condiciones

Se realizará dos pruebas de campo en un área expuesta a radiación solar directa y tránsito peatonal moderado y otra que será privada de estas condiciones, donde se aplicará el barniz formulado a partir de EPS: gasolina 1:3 con espesor de película seca $\geq 125 \mu\text{m}$ y curado de 24 h. El desgaste en servicio se valorará mediante un monitoreo longitudinal de 30 días se aplicará el procedimiento de evaluación de acuerdo con la NMX-U-122-SCFI-2016 en el cual se valorarán los siguientes criterios:

2.4.1 **Designación general de la cantidad de defectos:** la cantidad de defectos consistentes en discontinuidades u otras imperfecciones locales del recubrimiento de acuerdo con la tabla 5.

Tabla 5. Esquema general de evaluación para la designación de la cantidad de defectos

Grado	Cantidad de defectos
0	Ninguno, es decir no se detectan defectos.
1	Muy pocos, es decir algunos defectos escasamente significativos.
2	Pocos, es decir pequeña, pero significativa cantidad de defectos.
3	Moderado número de defectos.
4	Considerable número de defectos.
5	Densa concentración de defectos.

Nota. Adaptado de NMX-U-122-SCFI-2016, Recubrimientos, pinturas barnices y productos afines-evaluación de la degradación de recubrimientos-designación de la cantidad y tamaño de los tipos más comunes de defectos y de la intensidad de los cambios uniformes de apariencia, Secretaría de Economía, Dirección General de Normas (2016).

2.4.2 **Designación general del tamaño de defectos:** El tamaño medio (orden de magnitud) de los defectos de acuerdo con la tabla 6.

Tabla 6. Esquema general de evaluación para la designación del tamaño de los defectos.

Grado	Tamaño de defectos
0	No visibles con 10 aumentos.
1	Visibles con aumentos de hasta 10X.
2	Apenas visibles con visión normal corregida.
3	Claramente visibles con una visión normal o corregida (hasta 0.5mm)
4	Desde 0.5mm a 5 mm en el caso de ampollamiento y oxidación Hasta 1mm de ancho en caso de agrietamiento.
5	Mayores a 5mm en el caso de ampollamiento y oxidación. Mayor que 1 mm de ancho en el caso de agrietamiento.

Nota. Adaptado de NMX-U-122-SCFI-2016, Recubrimientos, pinturas barnices y productos afines-evaluación de la degradación de recubrimientos-designación de la cantidad y tamaño de los tipos más comunes de defectos

y de la intensidad de los cambios uniformes de apariencia, Secretaría de Economía, Dirección General de Normas (2016).

2.4.3 **Intensidad del cambio:** Intensidad del deterioro uniforme en la apariencia visual del recubrimiento de acuerdo con cambios de color, tal como amarillamientos, cambios de brillo o textura de acuerdo con la tabla 7

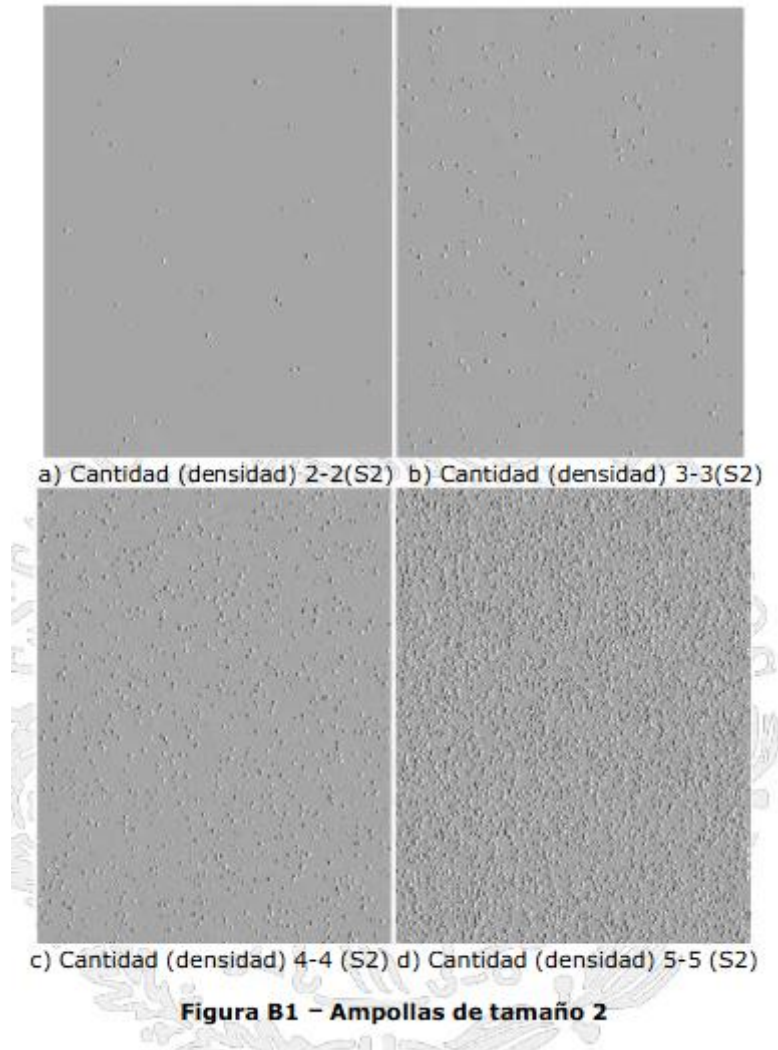
Tabla 7. Esquema general de evaluación para la designación de la intensidad de los cambios.

Grado	Intensidad del cambio
0	Inalterado, es decir, ningún cambio perceptible.
1	Muy ligero, es decir, cambio apenas perceptible.
2	Ligero, es decir cambio perceptible.
3	Moderado, es decir, cambio muy altamente perceptible
4	Considerable, es decir, cambio pronunciado.
5	Drástico, es decir cambio muy intenso.

Nota. Adaptado de NMX-U-122-SCFI-2016, Recubrimientos, pinturas barnices y productos afines-evaluación de la degradación de recubrimientos-designación de la cantidad y tamaño de los tipos más comunes de defectos y de la intensidad de los cambios uniformes de apariencia, Secretaría de Economía, Dirección General de Normas (2016).

2.4.4 **Grado de ampollamiento:** cantidad y tamaño de ampolla usando guías visuales de la figura 1 a 4 del apéndice informativo B de la NMX-U-122-SCFI-2016.

Figura 4. Guías visuales de ampollamiento ampollas tamaño 2



Nota. Reproducido de NMX-U-122-SCFI-2016, Recubrimientos, pinturas barnices y productos afines- evaluación de la degradación de recubrimientos- designación de la cantidad y tamaño de los tipos más comunes de defectos y de la intensidad de los cambios uniformes de apariencia, Secretaría de Economía, Dirección General de Normas (2016). Reproducido con fines académicos.

Figura 5. Guías visuales de ampollamiento ampollas tamaño 3

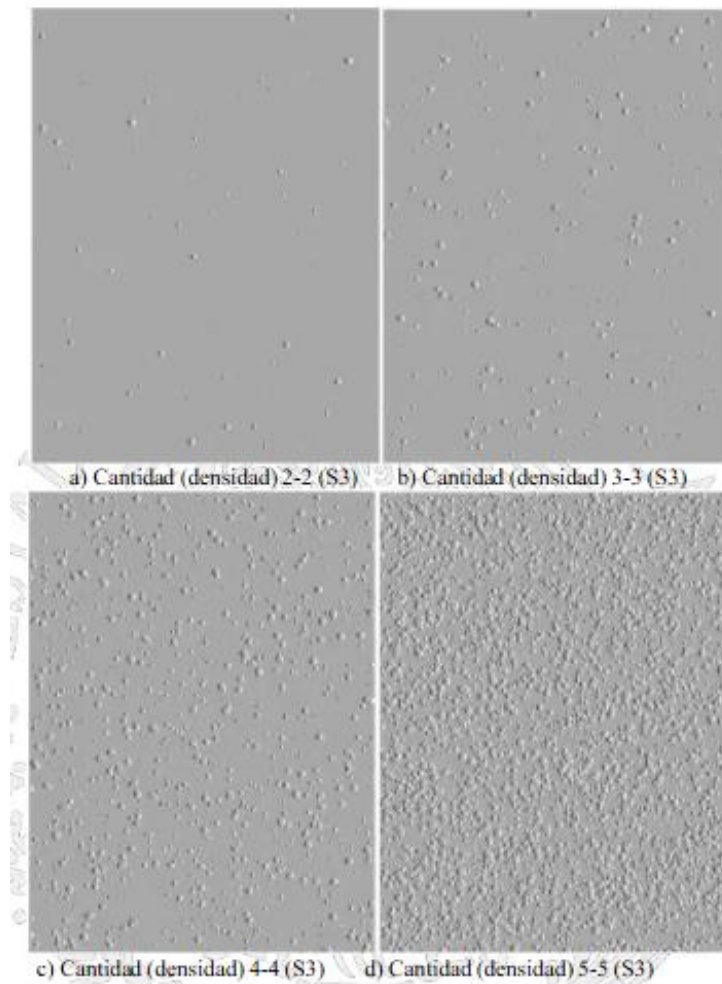


Figura B2 - Ampollas de tamaño 3

Nota. Reproducido de NMX-U-122-SCFI-2016, Recubrimientos, pinturas barnices y productos afines- evaluación de la degradación de recubrimientos- designación de la cantidad y tamaño de los tipos más comunes de defectos y de la intensidad de los cambios uniformes de apariencia, Secretaría de Economía, Dirección General de Normas (2016). Reproducido con fines académicos.

Figura 6. Guías visuales de ampollamiento ampollas tamaño 4

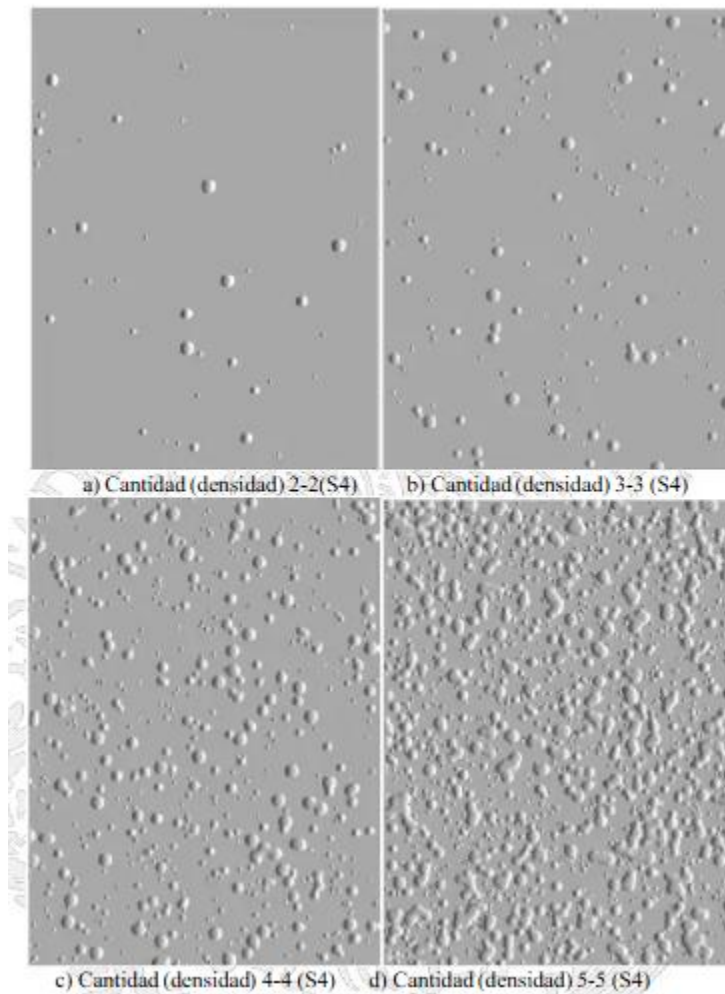


Figura B3 - Ampollas de tamaño 4

Nota. Reproducido de NMX-U-122-SCFI-2016, Recubrimientos, pinturas barnices y productos afines- evaluación de la degradación de recubrimientos- designación de la cantidad y tamaño de los tipos más comunes de defectos y de la intensidad de los cambios uniformes de apariencia, Secretaría de Economía, Dirección General de Normas (2016). Reproducido con fines académicos.

Figura 7. Guías visuales de ampollamiento ampollas tamaño 5

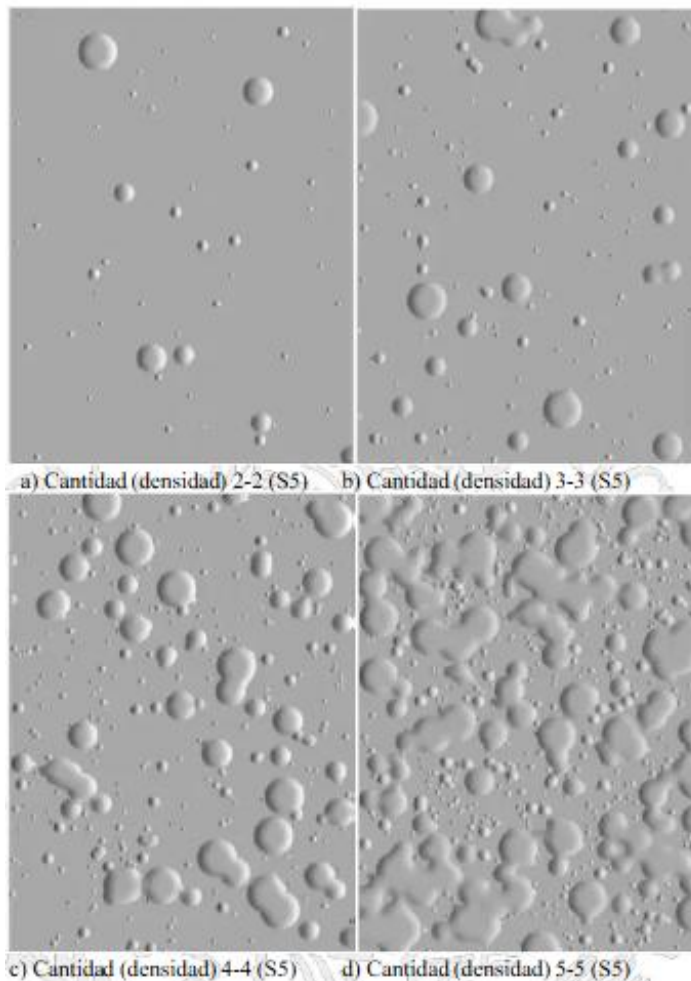


Figura B4 - Ampollas de tamaño 5

Nota. Reproducido de NMX-U-122-SCFI-2016, Recubrimientos, pinturas barnices y productos afines-evaluación de la degradación de recubrimientos-designación de la cantidad y tamaño de los tipos más comunes de defectos y de la intensidad de los cambios uniformes de apariencia, Secretaría de Economía, Dirección General de Normas (2016). Reproducido con fines académicos.

2.4.5 **Grado de descamación:** se evaluará la cantidad de descamación usando como referencia la tabla 8 y las figuras 1 y 2 (figuras 8 y 9) del apéndice informativo E dependiendo del tipo de descamación.

Tabla 8. Esquema de evaluación para la designación del grado de descamación o descascaramiento.

Grado	Área descamada [%]
0	0
1	0.1
2	0.3
3	1
4	3
5	15

Nota. Adaptado de NMX-U-122-SCFI-2016, Recubrimientos, pinturas barnices y productos afines-evaluación de la degradación de recubrimientos-designación de la cantidad y tamaño de los tipos más comunes de defectos y de la intensidad de los cambios uniformes de apariencia, Secretaría de Economía, Dirección General de Normas (2016).

Figura 8. Guías visuales de descascaramiento 1

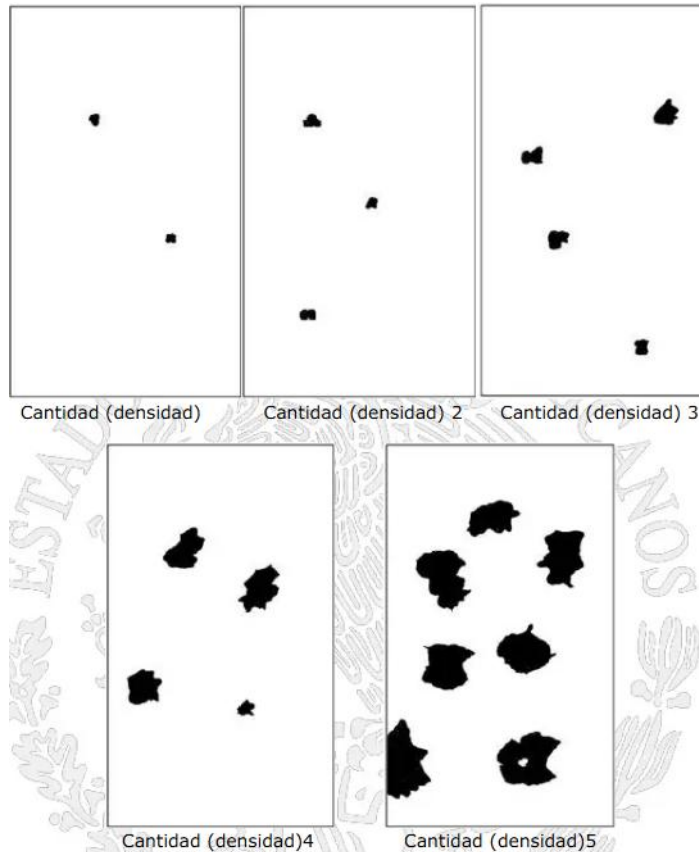


Figura E1 - Descamación sin dirección preferente

Nota. Reproducido de NMX-U-122-SCFI-2016, Recubrimientos, pinturas barnices y productos afines- evaluación de la degradación de recubrimientos- designación de la cantidad y tamaño de los tipos más comunes de defectos y de la intensidad de los cambios uniformes de apariencia, Secretaría de Economía, Dirección General de Normas (2016). Reproducido con fines académicos.

Figura 9. Guías visuales de descascaramiento 2

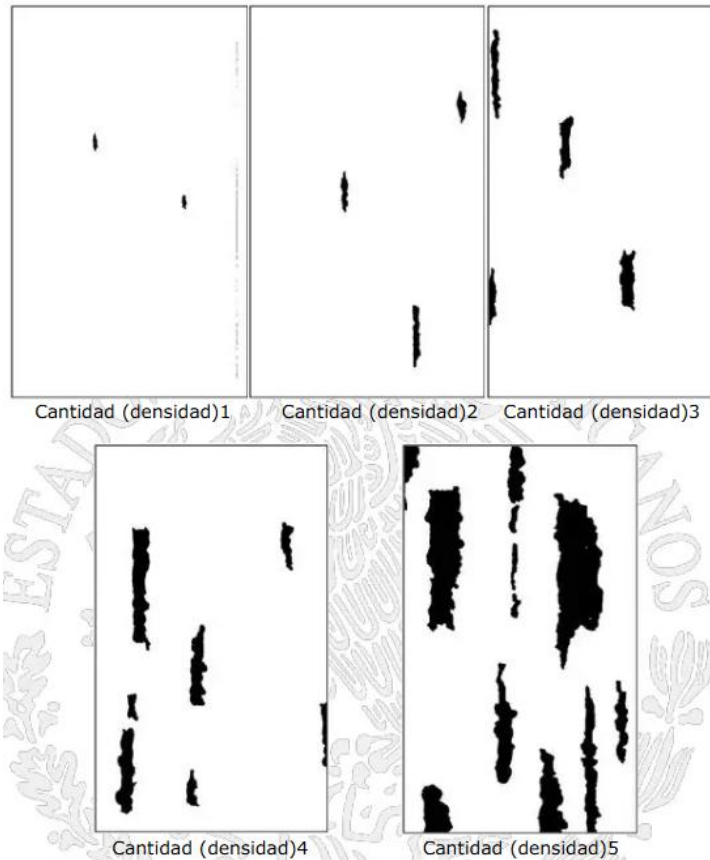


Figura E2 - Descamación con Dirección Preferente

Nota. Reproducido de NMX-U-122-SCFI-2016, Recubrimientos, pinturas barnices y productos afines- evaluación de la degradación de recubrimientos- designación de la cantidad y tamaño de los tipos más comunes de defectos y de la intensidad de los cambios uniformes de apariencia, Secretaría de Economía, Dirección General de Normas (2016). Reproducido con fines académicos.

3 Resultados

3.1 Acondicionamiento de materia prima

Para el desarrollo de este estudio, se seleccionó la muestra 2 (polvo amarillo de EPS) como materia prima para la formulación del recubrimiento, con base en los siguientes criterios técnicos y operativos:

1. **Mayor área superficial:** el polvo fino presenta un mayor contacto con el solvente debido a su área superficial por unidad de masa, lo cual facilita y acelera el proceso de disolución. Esta característica es deseable para lograr una disolución homogénea y eficiente sin necesidad de temperaturas elevadas.
2. **Alta homogeneidad granulométrica:** a diferencia de las hojuelas (muestra 3), que presentan variabilidad dimensional significativa, el polvo de EPS posee una distribución más uniforme de partículas, lo cual contribuye a una mejor reproducibilidad experimental.
3. **Ausencia de contaminación externa:** la muestra 1 contenía impurezas inorgánicas y materia orgánica (tierra y hojas), lo cual representa un riesgo de interferencia tanto en el proceso de disolución como en la calidad del recubrimiento final. Por su parte, la muestra 2 presentó un nivel de limpieza adecuado para su uso experimental sin necesidad de pretratamiento adicional.
4. **Representatividad del residuo industrial real:** el polvo de EPS es un subproducto común en líneas de preexpansión y transporte, y generalmente no es reincorporado al proceso productivo debido a su baja densidad aparente y dificultad de manipulación. Por tanto, su valorización como materia prima secundaria para recubrimientos aporta valor a un residuo subutilizado.

Con base en lo anterior, la muestra 2 fue seleccionada como insumo para la elaboración de disoluciones poliméricas de EPS, las cuales fueron aplicadas

como recubrimientos funcionales sobre sustratos porosos bajo condiciones controladas de formulación.

Muestra 2: polvo de EPS de color amarillo, generado por fricción y colisión durante el transporte neumático en la línea de preexpansión.

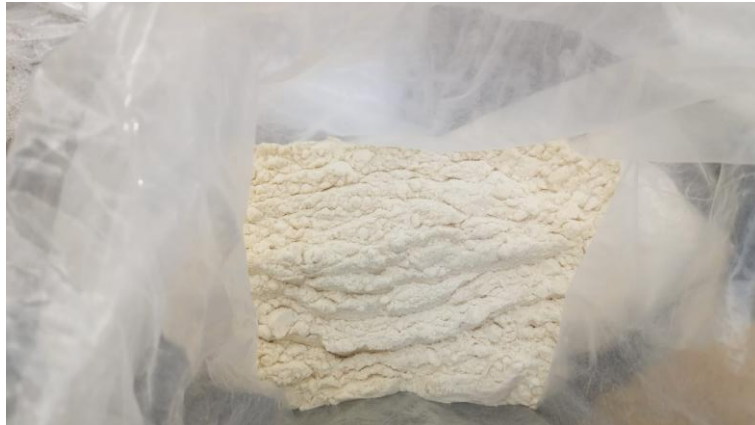


Figura 10: Muestra 2 polvo de EPS

3.2 Identificación de solvente adecuado

La tabla 1 muestra los criterios en para la selección de los solventes para la elaboración de este proyecto.

Tabla 1. Identificación de solvente adecuado

	Xileno	D-limoneno	Gasolina (Magna PEMEX)	Acetato de etilo
Costo [MXN. /L]	629.3-680	350-366	23.6	110-130
Disponibilidad	5-10 días hábiles para entrega.	1-2 días naturales para entrega.	Inmediato acudiendo al lugar.	1-15 días para entrega.
Toxicidad	LD50: 3523 mg/kg	LD50: 5200 mg/kg Puede causar una reacción	N/D Aguda: peligro por inhalación	LD50: 5620 mg/kg Irritación ocular grave

	<p>irritación cutánea y ocular grave.</p> <p>Mortal en caso de penetración a vías respiratorias</p>	<p>alérgica en la piel</p>	<p>a temperatura ambiente</p>	
<p>Estabilidad y reactividad</p>	<p>-Punto de inflamación: 25°C</p> <p>-Riesgo de ignición</p> <p>-Los vapores pueden generar mezclas explosivas en el aire</p> <p>- Mantener alejado del calor, de superficies calientes, de chispas, de llamas abiertas y de cualquier otra fuente de ignición. No fumar</p>	<p>-Punto de inflamación: 51°C</p> <p>-Estable en condiciones normales</p> <p>-No es reactivo de acuerdo con la información facilitada</p>	<p>-Punto de inflamación: $\geq 60^{\circ}\text{C}$</p> <p>-Se oxida en contacto con el aire</p> <p>-Estable en condiciones normales de uso</p> <p>-Evitar fuentes de ignición</p>	<p>-Punto de inflamación: -4°C</p> <p>-Vapores pueden formar con el aire una mezcla explosiva</p> <p>-Puede causar descomposición por mucha exposición a la luz</p> <p>-Materiales incompatibles: diferentes plásticos</p> <p>-Mantener alejado de la luz, el calor y la humedad.</p>

La gasolina se eligió como solvente porque, en la práctica y a la luz de la teoría de parámetros de solubilidad, mostró la mejor compatibilidad con el poliestireno: su

mezcla de hidrocarburos alifáticos y aromáticos interactúa eficazmente con una matriz polimérica apolar como el EPS, facilitando la rotura de interacciones entre cadenas y la formación de disoluciones homogéneas. En nuestras corridas de laboratorio, especialmente a 1:3 (EPS: solvente), la gasolina produjo mezclas de viscosidad manejable, buena nivelación sobre sustratos porosos y adherencias altas; en contraste, el D-limoneno presentó sedimentación persistente y pobre coalescencia bajo las mismas condiciones. Frente a otras opciones consideradas (p. ej., xileno o acetato de etilo), la gasolina ofreció una combinación más favorable de costo y disponibilidad local, sin traducirse las alternativas en un mejor desempeño de película que justificara su adopción. En suma, el poder disolvente efectivo, la reproducibilidad de la preparación y aplicación, y la viabilidad operativa hacen de la gasolina el solvente más adecuado para este desarrollo, siempre utilizando ventilación y prácticas de seguridad acordes con su naturaleza inflamable y su contenido de VOC.

3.3 Elaboración

A continuación, se discuten los resultados de las pruebas preliminares de disolución (Tabla 9), las cuales se diseñaron para comparar solventes y proporciones y, con base en su desempeño, definir el solvente operativo para el resto del estudio. En gasolina, la relación 1:3 (EPS: solvente) mostró el mejor rendimiento, con calificaciones ASTM 4A, textura homogénea, fluida y color ámbar semitransparente; el material fue fácil de manipular y aplicar, con una consistencia semejante al silicón que facilitó su extensión uniforme sobre el sustrato. En 1:2, se obtuvieron mezclas amarillentas y gomosas; aunque más difíciles de manipular, sí se adhirieron al sustrato y alcanzaron valores entre 1A y 2A. En 1:1, el desempeño fue deficiente: mezcla amarillenta, textura gomosa, adherencia muy baja, dificultades para expandirse de forma homogénea y falta de permanencia en la superficie tras la aplicación. En todos los casos con gasolina, las muestras reposaron 24 h antes de la evaluación de adherencia conforme a ASTM D3359.

En contraste, con D-limoneno los resultados no fueron satisfactorios en ninguna proporción ni tiempo evaluado: las mezclas presentaron textura arenosa, sedimentación del EPS en el fondo, falta de homogeneidad y excesiva fluidez, lo que impidió su aplicación práctica; en consecuencia, la adherencia fue nula (0A). Por lo anterior, estas pruebas preliminares (Tabla 9) sirvieron para descartar el D-limoneno como solvente y seleccionar la gasolina para el diseño experimental definitivo y el modelado subsecuente.

Tabla 9. Resultados de pruebas preliminares

Ensayo	EPS(g)	Solvente (g)	Solvente real	Proporción real	Tiempo real	Resultado ASTM
1	50	150	Gasolina	1:3	10	3A
2	50	150	Gasolina	1:3	30	4A
3	50	100	Gasolina	1:2	10	2A
4	50	100	Gasolina	1:2	30	1A
5	50	50	Gasolina	1:1	10	0A
6	50	50	Gasolina	1:1	30	0A
7	50	150	Limoneno	1:3	10	0A
8	50	150	Limoneno	1:3	30	0A
9	50	100	Limoneno	1:2	10	0A
10	50	100	Limoneno	1:2	30	0A
11	50	50	Limoneno	1:1	10	0A

12	50	50	Limoneno	1:1	30	0A
13	50	100	Gasolina	1:2	15	1A
14	50	100	Limoneno	1:2	15	0A
15	50	150	Gasolina	1:3	15	4A

Durante la aplicación de los recubrimientos, usamos un medidor de espesor para controlar la uniformidad de las capas, asegurándonos de que superaran el mínimo de 125 μm exigido por la norma ASTM D-3359, lo cual nos permitió evaluar la adherencia de manera adecuada.

Al final, estos datos experimentales sirven como base para entrenar un modelo de machine learning, que nos ayudará a identificar las mejores combinaciones de proporción EPS: solvente, tiempo de mezcla y tipo de solvente, con el objetivo de maximizar la adherencia en aplicaciones futuras.

3.4 Entrenamiento del modelo de Machine Learning

3.4.1. Objetivo y alcance

El objetivo de este capítulo es describir el marco metodológico de aprendizaje automático supervisado empleado para predecir y optimizar la adherencia de recubrimientos formulados a partir de poliestireno expandido (EPS) disuelto, en función de las variables del diseño experimental de segundo orden: proporción EPS: solvente (1:3, 1:2, 1:1) y tiempo de mezclado (10, 15, 30 min). El enfoque integra la metodología de superficies de respuesta (RSM) con un modelo de regresión polinomial cuadrática, validado mediante técnicas de validación cruzada, y se utiliza posteriormente para recomendar combinaciones de formulación que maximizan la adherencia medida con la norma ASTM D-3359.

Como criterio de comparabilidad, todas las películas se aplicaron controlando espesor $\geq 125 \mu\text{m}$ (medido) y se dejaron 24 h de reposo previo a la evaluación, conforme a la práctica establecida para ensayos de adherencia.

3.4.2. Conjunto de datos y preprocesamiento

VARIABLES DE PREDICCIÓN (X).

- X_1 : Tipo de solvente. Variable indicadora (0 = gasolina; 1 = D-limoneno).
- X_2 : Proporción EPS: solvente. Se emplea una codificación ordinal/continua del intervalo [1:3, 1:2, 1:1] para habilitar la interpolación dentro del dominio experimental.
- X_3 : Tiempo de mezclado (min). Variable continua en [10, 30].

VARIABLE DE RESPUESTA (Y).

- Adherencia ASTM D-3359. Para fines de modelación y optimización cuantitativa se mapea la escala categórica (0A, 1A, 2A, 3A, 4A y 5A) a una escala numérica ordinal (0–5).

3.4.3. Fundamento matemático del modelo

Se adopta un modelo de regresión polinomial de segundo orden que capta efectos lineales, curvatura e interacciones entre factores:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_{12} X_1 X_2 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \varepsilon$$

Donde Y es la adherencia predicha. Esta especificación es apropiada para procesos de formulación en los que la respuesta muestra no linealidad y sinergias entre variables, y es el marco clásico de RSM para la búsqueda de condiciones óptimas en dominios acotados del diseño experimental.

3.4.4. Entrenamiento validación y diagnóstico

Con base en la validación cruzada leave-one-out, el modelo de regresión polinomial de segundo orden (RSM) mostró el mejor compromiso entre capacidad explicativa y error global: obtuvo $R^2_{\text{LOOCV}} = 0.9447$ y $\text{RMSE}_{\text{LOOCV}} = 0.3135$, superando a SVR-RBF ($R^2 = 0.9360$; $\text{RMSE} = 0.3371$) y a GPR-Matérn ($R^2 = 0.9265$; $\text{RMSE} = 0.3614$). Aunque SVR presentó un MAE inferior (0.1418 frente a 0.1996), se priorizó el RMSE por su mayor sensibilidad a errores grandes y su relación directa con la

minimización de residuos cuadráticos, así como el R^2 por la fracción de variabilidad explicada. Adicionalmente, el RSM es parsimonioso (menos parámetros), interpretable (términos lineales, cuadráticos e interacción) y está alineado con el DOE 3×3 con puntos centrales, lo que facilita evaluar curvatura y falta de ajuste con el error puro; estas propiedades son especialmente pertinentes con tamaño muestral reducido. En consecuencia, y siguiendo la práctica recomendada en metodología de superficies de respuesta, se adoptó el modelo cuadrático como modelo principal, manteniendo SVR y GPR como referencias de sensibilidad para corroborar la estabilidad de la región óptima dentro del dominio experimental.

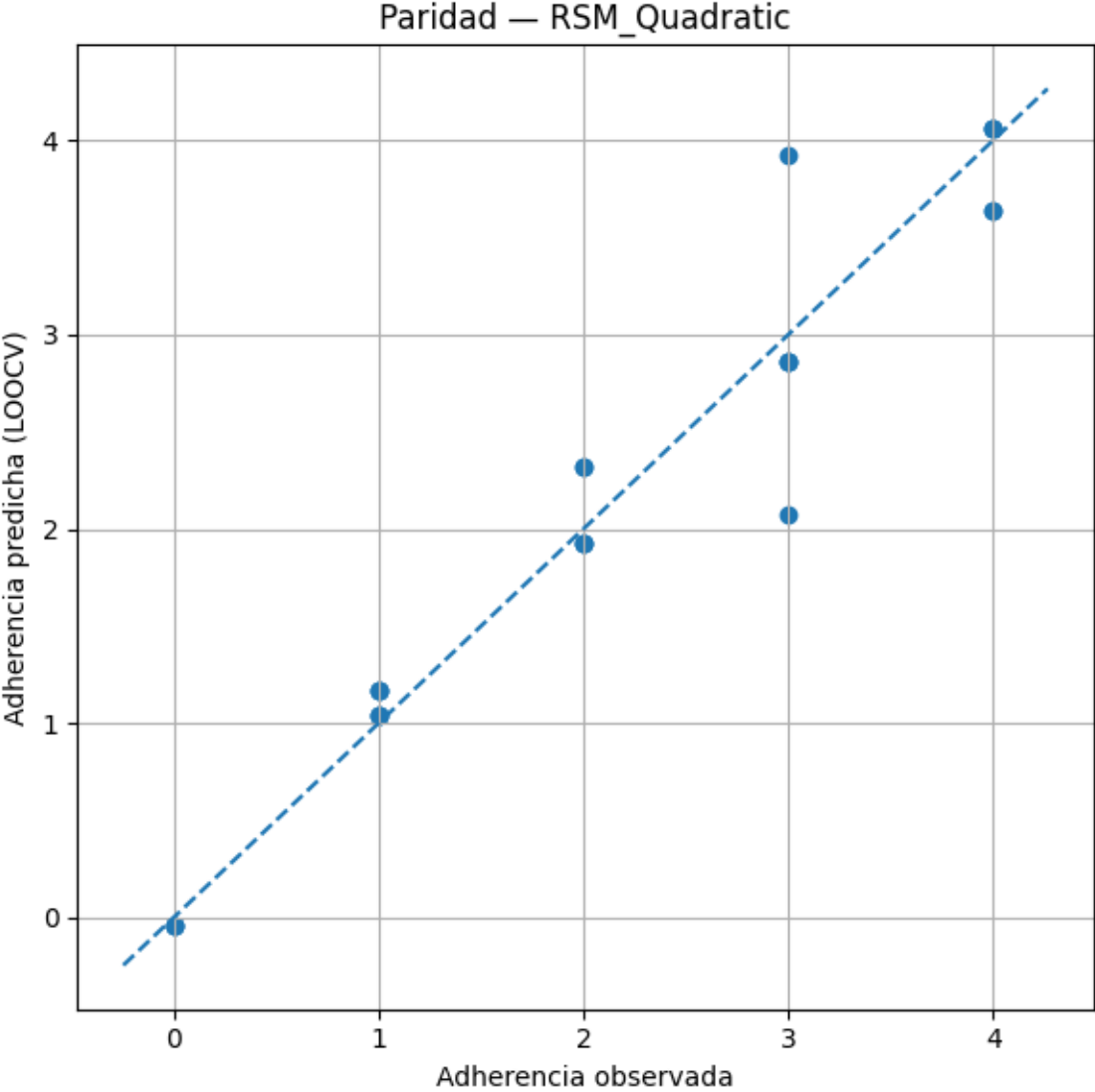


Figura 11. Grafico de paridad observado vs predicho

El gráfico de paridad muestra, en el eje horizontal, los valores observados de adherencia (ensayos experimentales) y, en el eje vertical, las predicciones LOOCV del modelo cuadrático de superficie de respuesta (RSM). La línea discontinua representa la bisectriz $y = x$; por tanto, cada punto mide el acuerdo entre observación y predicción: cuanto más cercano esté a esa línea, menor es el error de predicción. En esta figura observamos que los puntos se agrupan estrechamente alrededor de la bisectriz en todo el rango útil (0–4), sin patrones sistemáticos de sobre- o subestimación; sólo se aprecian desviaciones leves en los extremos (ligera subestimación cerca de 4 y una predicción marginalmente negativa para un caso con 0), coherentes con un error medio pequeño. Esta lectura visual es consistente con las métricas de validación cruzada leave-one-out ($R^2_{\text{LOOCV}} = 0.9447$, $RSME_{\text{LOOCV}} = 0.3135$ y $MAE_{\text{LOOCV}} = 0.1996$), donde el RMSE equivale aproximadamente a 6.3 % del rango de la escala (0–5). En conjunto, el gráfico confirma que el RSM de segundo orden ofrece capacidad explicativa alta y errores bajos para interpolar dentro del dominio experimental (proporciones 1:3–1:1 y 10–30 min), por lo que es adecuado para localizar condiciones operativas cercanas al óptimo e informar recomendaciones, manteniendo la precaución de no extrapolar fuera del espacio de diseño.

El gráfico de paridad (figura 11) muestra una alineación cercana a la recta identidad en todo el rango de adherencia, con dispersión reducida y sin sesgo sistemático apreciable. Este comportamiento es congruente con $R^2=0.9447$, $RMSE=0.3135$ y $MAE=0.1996$ y confirma la adecuada calibración del modelo para realizar recomendaciones interpolativas dentro del dominio experimental.

Tabla 10. Resultados de muestras de adherencia (solo gasolina)

Ensayo	EPS(g)	Solvente (g)	Tiempo real	Resultado ASTM
1	50	100	10	3
2	50	150	10	4

3	50	100	15	3
4	50	50	15	1
5	50	150	15	3
6	50	100	30	2
7	50	100	15	1
8	50	50	10	1
9	50	150	30	4
10	50	50	30	0
11	50	100	15	1
12	50	100	10	1
13	50	150	10	4
14	50	100	15	2
15	50	50	15	0
16	50	150	15	4
17	50	100	30	1
18	50	150	30	4
19	50	50	10	0
20	50	50	30	0
21	50	100	15	2
22	50	100	15	2
23	50	100	15	1
24	50	100	15	2

En la Figura 12 se presenta el mapa de contorno de la superficie de respuesta estimada con el modelo cuadrático (RSM) para la adherencia. El eje x corresponde a la fracción polimérica $\phi = \frac{\text{EPS}}{\text{EPS}+\text{solvente}}$ (0.25 = 1:3, 0.33 = 1:2, 0.50 = 1:1), mientras que el eje y muestra el tiempo de mezclado (min). La escala de color representa la adherencia predicha (tonos más claros = mayor respuesta). Los puntos son las corridas experimentales y la marca "X" identifica el óptimo interpolado dentro del dominio: $\phi \approx 0.25$ (EPS: solvente \approx 1:3) y $t \approx 24$ min, con adherencia estimada \approx

4.30. La geometría de las isocurvas evidencia curvatura e interacción entre ϕ y t : a valores bajos de ϕ la adherencia aumenta hasta tiempos intermedios y luego se estabiliza, mientras que al incrementar ϕ (mezclas más viscosas) la respuesta disminuye por menor nivelación del recubrimiento. En conjunto, la Figura 12 confirma que las formulaciones ricas en solvente ($\approx 1:3$) y tiempos intermedios maximizan la adherencia; por lo tanto, las recomendaciones se restringen a la interpolación dentro del espacio experimental ($1:3-1:1$; $10-30$ min).

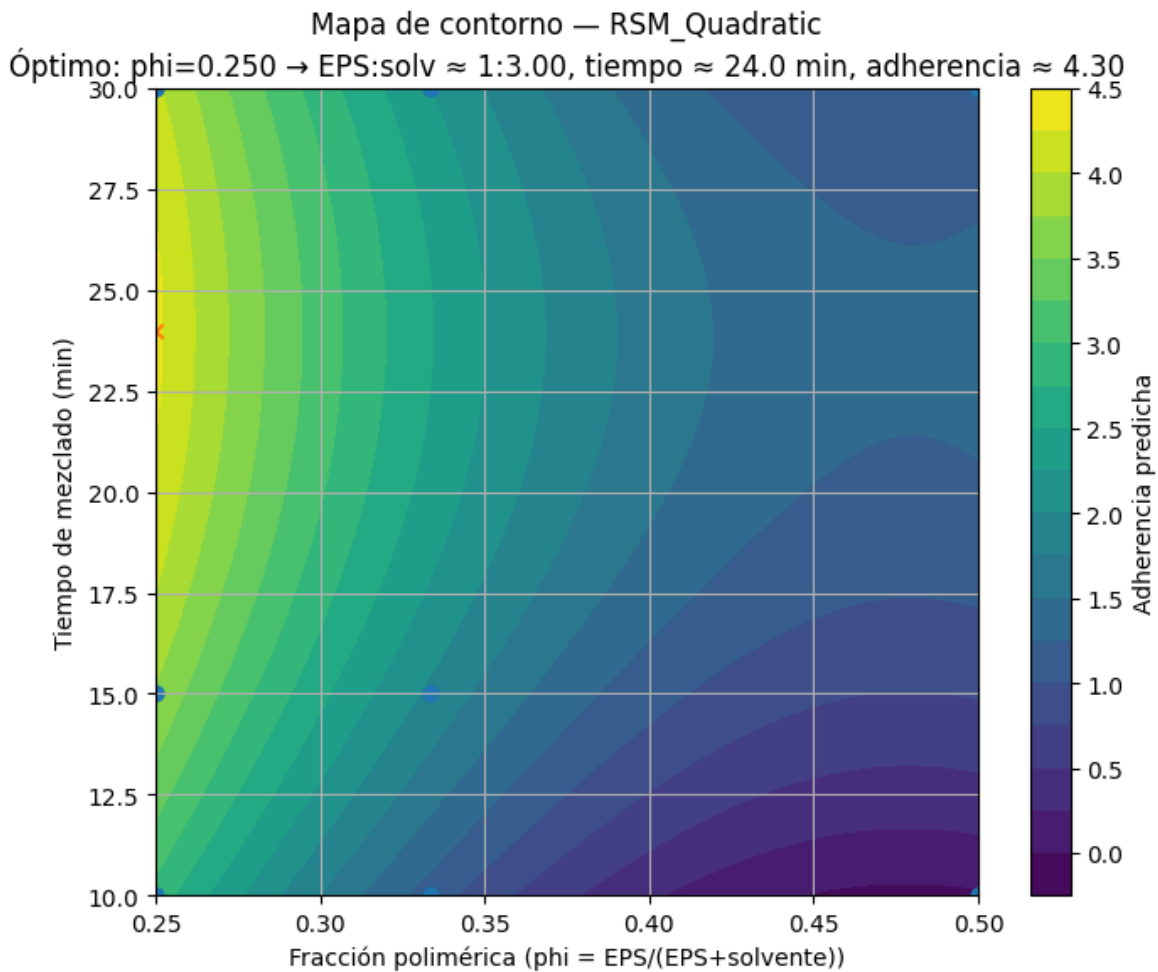


Figura 12: Mapa de contorno RSM

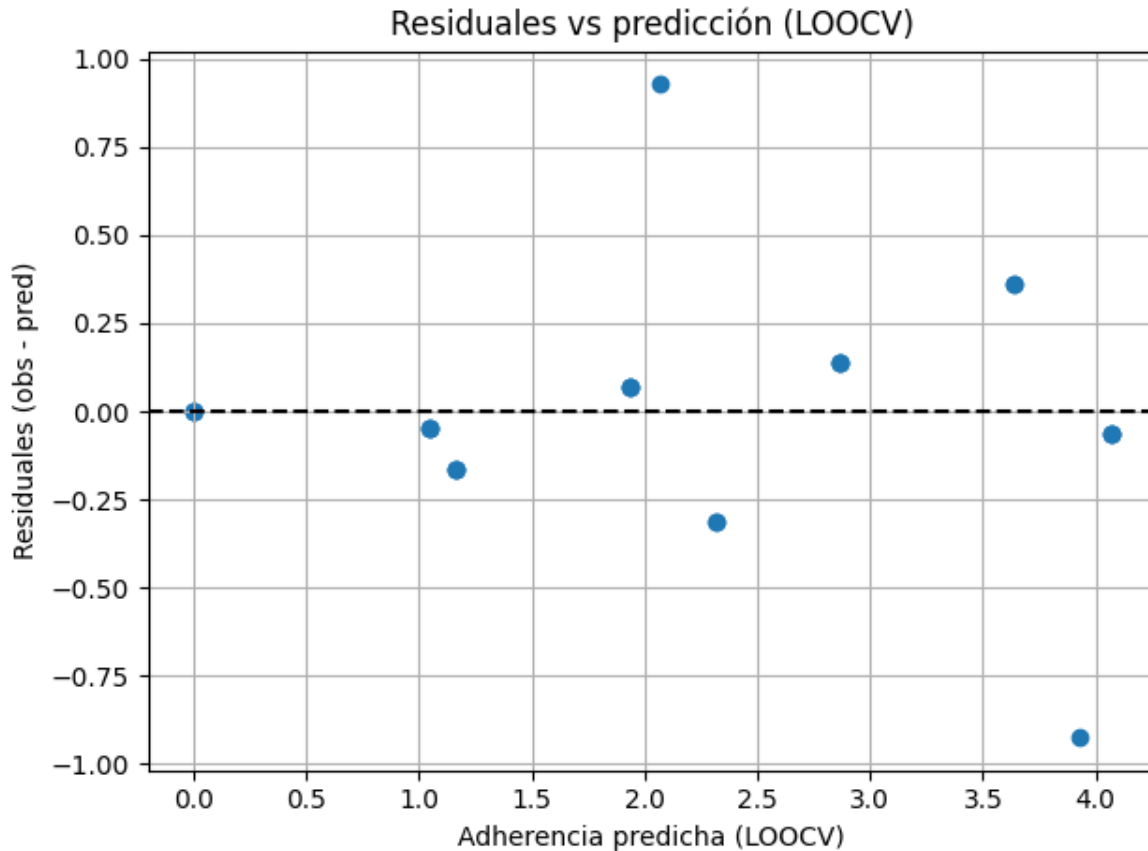


Figura 13: Gráfico de residuales vs. predicción (LOOCV)

El gráfico de residuales vs. predicción (LOOCV) (figura 13) muestra una dispersión centrada en el eje Y sin patrones sistemáticos ni curvaturas remanentes, lo que indica que la especificación cuadrática capta adecuadamente la relación entre proporción y tiempo con la adherencia. La ausencia de heteroestructura marcada sugiere homocedasticidad razonable en el dominio 1:3–1:1 y 10–30 min. La presencia de residuales aislados de mayor magnitud explica que el RMSE sea mayor que el MAE, sin comprometer la estabilidad global del ajuste. Estos resultados respaldan la validez del modelo para formular recomendaciones interpolativas bajo las condiciones operativas del ensayo.

Por último, en la Tabla 11 se presentan las cinco predicciones principales del modelo de regresión polinomial de segundo orden, ajustado exclusivamente para la gasolina. Para obtener estas recomendaciones, se realizó un barrido interpolativo

en el dominio experimental, construyendo una malla fina alrededor de la región con mejor desempeño. Se calculó la adherencia predicha para cada punto de la malla, se ordenaron las combinaciones resultantes y se seleccionaron las óptimas, considerando las restricciones operativas establecidas por la norma ASTM D-3359. Este análisis arrojó las siguientes sugerencias:

Tabla 11. Predicciones del modelo.

Proporción	Tiempo [min]	Predicción de adherencia
1:3	24	4.301534
1:3	24.5	4.30039
1:3	23.5	4.299464
1:3	25	4.294985
1:3	23	4.293845

3.5 Seguimiento y evaluación de las condiciones

3.5.1 Selección del área de pruebas

El área de aplicación del recubrimiento se eligió para representar condiciones de servicio exigentes. Se priorizó una zona con tránsito peatonal continuo para inducir desgaste mecánico (abrasión superficial y esfuerzos cortantes sobre la película), exposición solar directa para someter al recubrimiento a radiación ultravioleta y ciclos térmicos asociados al foto envejecimiento, y condiciones ambientales variables que pusieran a prueba la estabilidad de la adhesión frente a ciclos higrotérmicos.

Se seleccionaron 2 áreas que cumpliera con los criterios ya mencionados para la aplicación del recubrimiento como se muestra en la tabla 12.

Tabla 12. Selección de área de pruebas.

Área	Tránsito peatonal	Exposición solar	Condiciones ambientales
Área 1	Moderado	Alta	Alta
Área 2	Alto	Alta	Alta

Aun cuando ambas zonas cumplen con las condiciones generales para la ejecución de las pruebas, se constató que el área 2 presenta irregularidades superficiales derivadas de su construcción con adoquines. Estas características incrementan la variabilidad experimental al dificultar la aplicación homogénea del recubrimiento, favorecer la retención de polvo y humedad y propiciar pérdidas de película durante la aplicación y el curado. En consecuencia, para garantizar resultados más consistentes y representativos del desempeño del barniz, se seleccionó el área 1, cuyo sustrato es más continuo y nivelado, reduciendo así fuentes de error asociadas a la rugosidad y a la heterogeneidad del soporte.

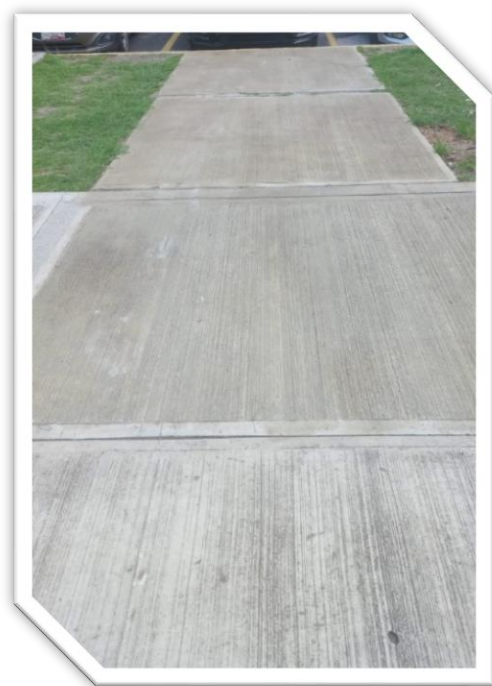


Figura 14. Área 1.



Figura 15: Área 2.

3.5.2 Preparación de la disolución de EPS en gasolina

Se empleó gasolina como solvente por su compatibilidad de parámetros de solubilidad con el EPS. Para preparar una disolución 1:3 en base másica se ocupó la cantidad 1480 g de solvente. En consecuencia, la masa de EPS se ajustó a 493 g para respetar la proporción 1:3. El EPS se adicionó de forma fraccionada al solvente bajo agitación mecánica continua, con el fin de evitar saturación local y favorecer la disolución progresiva; el procedimiento condujo a una mezcla homogénea con viscosidad adecuada para la aplicación posterior del barniz.

3.5.3 Acondicionamiento del área de pruebas

La prueba de campo se realizó el miércoles 13 de noviembre de 2024 en la Facultad de Ingeniería Química de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, específicamente en el corredor peatonal entre los edificios FIQ-2 y FIQ-4. Esta zona se definió como área de control por cumplir con los criterios previamente

establecidos (exposición solar directa, tránsito peatonal y condiciones ambientales a la intemperie), lo que garantiza representatividad para la evaluación del recubrimiento.

Previamente a la aplicación, se acordonó el área de control para interrumpir el flujo peatonal durante las maniobras. A continuación, se efectuó una limpieza integral del sustrato (barrido y retiro de polvo) con el propósito de eliminar contaminantes superficiales que pudieran afectar la humectación, la uniformidad de la película y, en consecuencia, la adherencia del barniz. Con la superficie limpia y seca, se procedió a la aplicación conforme al procedimiento descrito en la metodología.



Figura 16. Preparación y limpieza del área de control.

3.5.4 Preparación de la solución

Se preparó la disolución al aire libre utilizando los instrumentos previamente definidos (taladro/desatornillador de percusión VVR de 13 mm Ryobi acoplado al mezclador WARNER). El tiempo total de mezclado fue de 60 min, mantenido a agitación continua para favorecer el contacto efectivo entre fases y la dispersión del polímero. El polvo de EPS (amarillo) se dosificó en tres adiciones sucesivas y equivalentes, incorporadas a los 15, 30 y 45 min de iniciado el mezclado, con el

objetivo de evitar sobrecargas locales de soluto, minimizar apelmazamientos y promover una disolución progresiva y controlada.



Figura 17. Disolución a 15 min de mezclado.

Durante los primeros 30 min se observó una coloración gris y un incremento de viscosidad hasta un comportamiento similar al de una silicona.

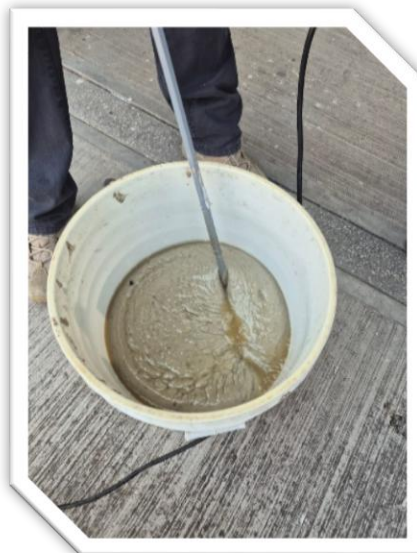


Figura 18. Disolución a 45 minutos de mezclado.

Tras la tercera adición (Figura 18) la mezcla evolucionó a un tono café claro/ámbar y mostró una homogeneidad sensiblemente mayor, si bien persistieron zonas residuales de pobre humectación. Al alcanzar los 60 min, no se apreciaron cambios adicionales relevantes, por lo que se consideró concluida la etapa de homogeneización y la disolución quedó lista para su aplicación como barniz.



Figuras 19 y 20: Aplicación de recubrimiento.

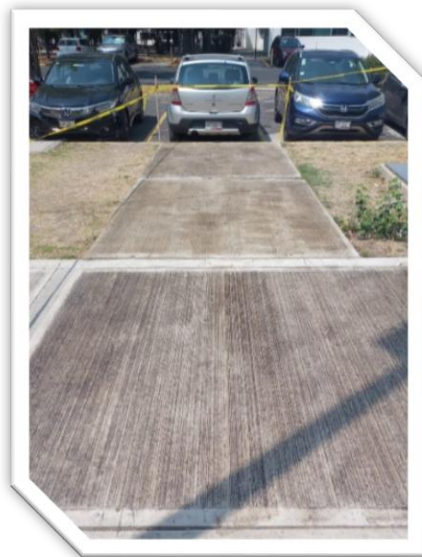


Figura 21. Aplicación de recubrimiento 13/11/24.

3.5.5 Monitoreo del barniz

Para el monitoreo en campo del barniz se adoptará, como marco operativo, la NMX-U-122-SCFI-2016. Además de la calificación primaria de adherencia conforme a dicha norma, se llevará a cabo una inspección visual sistemática del desgaste del recubrimiento, registrando exclusivamente los siguientes indicadores:

- (i) cantidad de defectos visibles.
- (ii) tamaño característico de los defectos.
- (iii) intensidad del cambio de apariencia.
- (iv) grado de ampollamiento.
- (v) grado de descamación.

Estos criterios se consignarán con terminología y rangos normalizados para garantizar la trazabilidad y comparabilidad de las observaciones entre fechas de seguimiento y réplicas, manteniendo consistencia con las prácticas de evaluación de degradación de recubrimientos establecidas en la literatura técnica y normas de referencia.

3.5.5.1 Monitoreo de Prueba exterior

Las condiciones en las que se encuentra el recubrimiento al momento de su aplicación de acuerdo con los criterios aplicables dentro de este trabajo se observa una aplicación uniforme en la mayoría del área de pruebas a excepción de las orillas en donde se nota una acumulación de material y burbujas encapsuladas dentro del barniz.

Tabla 13. Monitoreo exterior día 1.

Día 1-13/11/2024		
Defecto	Grado	Descripción
Cantidad de defectos	1	Muy pocos, es decir algunos defectos escasamente significativos.
Tamaño de defectos	0	No visibles con 10 aumentos.
Intensidad del cambio	0	Inalterado, es decir, ningún cambio perceptible.
Grado de ampollamiento	2	3-3 (S2)
Grado de descamación	0	0 %

Durante los primeros siete días posteriores a la aplicación, el recubrimiento mantuvo prácticamente sus condiciones iniciales. El único cambio relevante fue la acentuación de algunas ampollas ya presentes al momento de aplicar, las cuales se hicieron más evidentes conforme avanzó la evaporación del solvente (gasolina) y la liberación de volátiles atrapados. Fuera de este fenómeno, no se observaron variaciones apreciables en color, brillo, integridad superficial ni adherencia.

Tabla 14. Monitoreo exterior día 7.

Día 7-20/11/2024		
Defecto	Grado	Descripción
Cantidad de defectos	1	Muy pocos, es decir algunos defectos escasamente significativos.
Tamaño de defectos	2	Apenas visibles con visión normal corregida.
Intensidad del cambio	0	Inalterado, es decir, ningún cambio perceptible.
Grado de ampollamiento	3	3-3 (S3)
Grado de descamación	0	0 %

Para el día 14 del monitoreo del recubrimiento notamos una decoloración del recubrimiento debido a su exposición al sol, el nivel de empollamiento no aumento debido a que ya no quedo ningún gas volátil atrapado en las burbujas del recubrimiento, el material hasta ahora no presenta algún daño de descamación.

Tabla 15. Monitoreo exterior día 14.

Día 14-27/11/2024		
Defecto	Grado	Descripción
Cantidad de defectos	1	Muy pocos, es decir algunos defectos escasamente significativos.
Tamaño de defectos	2	Apenas visibles con visión normal corregida.
Intensidad del cambio	2	Ligero, es decir cambio perceptible.
Grado de ampollamiento	4	3-3 (S4)
Grado de descamación	0	0 %

En la tercera semana de monitoreo, el recubrimiento mostró un amarilleamiento más evidente, atribuible a la exposición sostenida a la radiación solar. De forma concurrente, se observaron indicios descamación en zonas puntuales, coincidentes con los episodios de lluvia intensa registrados en esos días. Fuera de estos cambios, el comportamiento global del sistema se mantuvo sin alteraciones estructurales relevantes.

Tabla 16. Monitoreo exterior día 21.

Día 21-04/12/2024		
Defecto	Grado	Descripción
Cantidad de defectos	2	Pocos, es decir pequeña, pero significativa cantidad de defectos.
Tamaño de defectos	2	Apenas visibles con visión normal corregida.
Intensidad del cambio	3	Moderado, es decir, cambio muy altamente perceptible
Grado de ampollamiento	4	3-3 (S4)
Grado de descamación	2	0.3 %

En la última jornada de monitoreo, se observó un aumento de la descamación del recubrimiento y una decoloración más marcada, con un viraje del tono amarillento inicial hacia un color notablemente más oscuro. Estos cambios se registraron de manera consistente en las zonas previamente identificadas como más expuestas.

Tabla 17. Monitoreo exterior día 30.

Dia 30-13/12/2024		
Defecto	Grado	Descripción
Cantidad de defectos	3	Moderado número de defectos.
Tamaño de defectos	3	Claramente visibles con una visión normal o corregida (hasta 0.5mm)
Intensidad del cambio	3	Moderado, es decir, cambio muy altamente perceptible
Grado de ampollamiento	4	3-3 (S4)
Grado de descamación	3	1 %

3.5.5.2 Monitoreo de prueba interior

Al momento de aplicar el recubrimiento al bloque de concreto, presenta una aplicación uniforme sin ningún tipo de ampollamiento, un color transparente y un fuerte olor a gasolina propio del solvente con el que la mezcla fue realizada.

Tabla 18. Monitoreo interior día 1.

Dia 1-13/11/2024		
Defecto	Grado	Descripción
Cantidad de defectos	0	Ninguno, es decir no se detectan defectos.
Tamaño de defectos	0	No visibles con 10 aumentos.
Intensidad del cambio	0	Inalterado, es decir, ningún cambio perceptible.
Grado de ampollamiento	0	
Grado de descamación	0	0 %

El bloque de concreto mantiene sus características iniciales, fue resguardado en un cuarto aislado de la luz solar y sin presencia de algún tipo de desgaste mecánico.

Tabla 19. Monitoreo interior día 7.

Día 7-20/11/2024		
Defecto	Grado	Descripción
Cantidad de defectos	0	Ninguno, es decir no se detectan defectos.
Tamaño de defectos	0	No visibles con 10 aumentos.
Intensidad del cambio	0	Inalterado, es decir, ningún cambio perceptible.
Grado de ampollamiento	0	
Grado de descamación	0	0 %

El bloque muestra una ligera decoloración color ámbar a pesar de no tener ningún tipo de interacción con la luz solar.

Tabla 20. Monitoreo interior día 21.

Día 21-04/12/2024		
Defecto	Grado	Descripción
Cantidad de defectos	0	Ninguno, es decir no se detectan defectos.
Tamaño de defectos	0	No visibles con 10 aumentos.
Intensidad del cambio	2	Ligero, es decir cambio perceptible.
Grado de ampollamiento	0	
Grado de descamación	0	0 %

La muestra conservó las propiedades registradas la semana anterior; el único cambio perceptible fue un ligero oscurecimiento del recubrimiento sobre el concreto.

Tabla 21. Monitoreo interior día 30.

Dia 30-13/12/2024		
Defecto	Grado	Descripción
Cantidad de defectos	0	Ninguno, es decir no se detectan defectos.
Tamaño de defectos	0	No visibles con 10 aumentos.
Intensidad del cambio	3	Moderado, es decir, cambio muy altamente perceptible
Grado de ampollamiento	0	
Grado de descamación	0	0 %

El seguimiento en intemperie mostró un comportamiento estable durante la primera semana, con acentuación de ampollas preexistentes asociada a la evaporación del solvente; hacia la tercera semana se evidenció un amarilleamiento progresivo y descamación incipiente coincidentes con episodios de lluvia intensa; y, en la última fecha de evaluación, se constató un aumento de la descamación junto con una decoloración más marcada hacia tonos oscuros. En conjunto, estas observaciones describen un patrón de degradación compatible con exposición UV y ciclos higrotérmicos, útil para interpretar el desempeño del recubrimiento bajo condiciones reales. A partir de estos resultados, se sugiere firmemente que la aplicación en interiores o en áreas cubiertas constituye la opción óptima para el desarrollo y uso del recubrimiento, al minimizar la exposición a rayos UV, a la lluvia y a cargas mecánicas que aceleran la degradación.

Conclusiones

Objetivo general.

Se demostró la viabilidad técnica de un recubrimiento para uso interior obtenido por disolución de residuos de EPS, alcanzando adherencias de hasta 4A (ASTM D3359) con formulaciones ricas en solvente ($\approx 1:3$) y tiempos de mezclado intermedios (~ 24 min). En términos de viabilidad económica, la elección de gasolina como solvente operativo —por costo y disponibilidad locales— y el empleo de residuos como materia prima sugieren un esquema de bajo costo relativo y alto potencial de aprovechamiento. El desempeño en exteriores fue limitado (amarilleamiento y descamación), por lo que el uso recomendado es ambiental interior.

1) Caracterización y selección de solventes.

La comparación de candidatos bajo parámetros de solubilidad, costo, disponibilidad, toxicidad y estabilidad condujo a seleccionar gasolina como solvente operativo. En las pruebas preliminares, la gasolina mostró compatibilidad con el EPS (disoluciones homogéneas y procesables), mientras que D-limoneno presentó sedimentación y falta de coalescencia, con adherencia nula (0A); por ello fue descartado. La gasolina equilibró poder disolvente, manejo y accesibilidad, con las debidas precauciones de seguridad.

2) Pruebas de disolución (1:3, 1:2, 1:1; 10–30 min) y registro de homogeneidad/adherencia.

Las formulaciones 1:3 (EPS: solvente) generaron mezclas homogéneas, de viscosidad manejable y adherencias altas (4A); 1:2 produjo materiales más gomosos con adherencias intermedias (1A–2A); 1:1 mostró pobre homogeneidad y adherencia (0A). La evidencia respalda que mayor fracción de solvente y tiempos intermedios favorecen humectación, nivelación y anclaje mecánico sobre sustratos porosos.

3) Diseño experimental de segundo orden (ASTM D3359).

El DOE 3×3 con punto central permitió estimar efectos principales, interacción y curvatura, y aportó error puro para evaluar falta de ajuste. La superficie resultante

delineó una región operativa con máximo desempeño cerca de 1:3 y ~24 min, coherente con los patrones fisicoquímicos observados en mezcla y aplicación.

4) Modelo de aprendizaje supervisado.

La comparación entre RSM cuadrático, SVR-RBF y GPR (Matérn 3/2) mediante LOOCV favoreció al RSM por su mayor R^2 (≈ 0.945) y menor RMSE (≈ 0.313), además de su parsimonia e interpretabilidad. El modelo recomienda, por interpolación, condiciones próximas a 1:3 y ~24 min, con adherencia predicha ≈ 4.3 ; las recomendaciones se restringen al dominio experimental.

5) Monitoreo en interiores (30 días; NMX-U-122-SCFI-2016).

En condiciones interiores (sin sol ni tránsito) se registraron cambios visuales mínimos y ausencia de degradación funcional relevante conforme a los criterios de la NMX, confirmando la estabilidad del recubrimiento en ambiente controlado.

6) Monitoreo en zona peatonal (30 días; NMX-U-122-SCFI-2016).

Bajo exposición solar y tránsito, se observó amarilleamiento progresivo y aumento de descamación, en consonancia con el estrés UV-mecánico; esto no compromete las conclusiones de interior, pero desaconseja su uso exterior sin modificaciones de formulación (p. ej., aditivos anti-UV, endurecedores o sistemas híbridos).

Recomendaciones

Una mejora sustancial al modelo predictivo implementado en este estudio radica en su extensión hacia un enfoque interpolativo continuo, lo que permitiría optimizar las proporciones de disolución del poliestireno expandido (EPS) más allá de los niveles discretos evaluados experimentalmente. Este refinamiento puede lograrse mediante el ajuste de modelos de regresión polinomial de segundo orden o algoritmos de aprendizaje supervisado capaces de manejar variables numéricas continuas. Al permitir que las variables de formulación, como la proporción EPS: solvente y el tiempo de mezclado, adopten valores intermedios dentro del dominio experimental, el modelo no solo incrementaría la precisión en la predicción de la adherencia, sino que también facilitaría la exploración de combinaciones mixtas de solventes, como mezclas proporcionales de gasolina y D-limoneno. Esto posibilitaría el diseño de formulaciones híbridas que integren las ventajas de ambos solventes, optimizando la eficiencia de disolución, las propiedades fisicoquímicas del recubrimiento y su adherencia al sustrato, todo ello fundamentado en una predicción ajustada a una superficie de respuesta continua.

Anexos

Anexo 1

Código de diagnóstico y evaluación del modelo

```
import numpy as np
```

```
import pandas as pd
```

```
import matplotlib.pyplot as plt
```

```
from sklearn.pipeline import Pipeline
```

```
from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures
```

```

from sklearn.linear_model import LinearRegression

from sklearn.model_selection import LeaveOneOut

from sklearn.metrics import r2_score, mean_squared_error, mean_absolute_error

from scipy import stats

# =====

# Funciones auxiliares

# =====

def loocv_metrics(model, X, y):
    """Valida con LOOCV y devuelve y_true, y_pred (out-of-fold) y métricas
    globales."""
    loo = LeaveOneOut()
    y_true, y_pred = [], []
    for tr, te in loo.split(X):
        model.fit(X[tr], y[tr])
        pred = model.predict(X[te])[0]
        y_pred.append(pred)
        y_true.append(y[te][0])
    y_true = np.array(y_true)
    y_pred = np.array(y_pred)
    r2 = r2_score(y_true, y_pred)

```

```
rmse = np.sqrt(mean_squared_error(y_true, y_pred))
```

```
mae = mean_absolute_error(y_true, y_pred)
```

```
return y_true, y_pred, r2, rmse, mae
```

```
def cooks_distance(X_design, resid):
```

```
    """
```

```
    Calcula distancia de Cook para un modelo lineal ordinario:
```

```
    - X_design: matriz de diseño con columna de unos (intercepto) incluida
```

```
    - resid: residuales del ajuste (y - y_hat) del modelo final
```

```
    """
```

```
    # Proyección (hat matrix)
```

```
    XtX = X_design.T @ X_design
```

```
    try:
```

```
        XtX_inv = np.linalg.inv(XtX)
```

```
        H = (X_design @ XtX_inv) @ X_design.T
```

```
        h = np.diag(H)          # leverage
```

```
        n, p = X_design.shape   # p incluye intercepto
```

```
        mse = (resid**2).sum() / (n - p)    # MSE del ajuste final
```

```
        # Fórmula de Cook:  $D_i = e_i^2 / (p * MSE) * h_i / (1 - h_i)^2$ 
```

```
        # Agregar una pequeña constante al denominador para evitar divisiones por  
        # cero si 1-h es muy pequeño
```

```
        D = (resid**2 / (p * mse)) * (h / (1 - h)**2 + 1e-10) # Added a small constant
```

```
    return D, h
```

```

except np.linalg.LinAlgError:

    print("Error: La matriz (X.T @ X) es singular. No se pudo calcular la distancia
de Cook.")

    # print(f'Condición de la matriz (X.T @ X): {np.linalg.cond(XtX)}') # Optional:
print condition number

    return None, None

```

```

def bootstrap_coefs(df, degree=2, B=1000, random_state=42):

    """

    Bootstrap de casos para IC 95% de coeficientes.

    Devuelve DataFrame con estimaciones puntuales e intervalos.

    """

    rng = np.random.default_rng(random_state)

    X = df[['Solvente', 'Proporcion', 'Tiempo']].values
    y = df['Adherencia'].values

    pipe = Pipeline([

        ('poly', PolynomialFeatures(degree=degree, include_bias=False)),

        ('lin', LinearRegression())

    ])

    # Ajuste final con todos los datos (estimación puntual)

    pipe.fit(X, y)

```

```
feature_names = pipe.named_steps['poly'].get_feature_names_out(['Solvente','Proporcion','Tiempo'])
```

```
beta_hat = np.r_[pipe.named_steps['lin'].intercept_,  
pipe.named_steps['lin'].coef_]
```

```
# Almacenar betas bootstrap (incluye intercepto)
```

```
betas = np.zeros((B, beta_hat.size))
```

```
n = len(df)
```

```
for b in range(B):
```

```
    idx = rng.integers(0, n, size=n) # remuestreo con reemplazo
```

```
    Xb = X[idx]
```

```
    yb = y[idx]
```

```
    pipe.fit(Xb, yb)
```

```
    bh = np.r_[pipe.named_steps['lin'].intercept_, pipe.named_steps['lin'].coef_]
```

```
    betas[b, :] = bh
```

```
# IC por percentiles
```

```
lower = np.percentile(betas, 2.5, axis=0)
```

```
upper = np.percentile(betas, 97.5, axis=0)
```

```
coef_df = pd.DataFrame({
```

```
    'Término': np.r_['-1', ['Intercepto'], feature_names],
```

```
    'Estimación': beta_hat,
```

```

        'IC95%_inf': lower,
        'IC95%_sup': upper
    })
    return coef_df

#Datos
data = {
    'Solvente': [0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 0, 1, 0],
    'Proporcion': [-1, -1, 0, 0, 1, 1, -1, -1, 0, 0, 1, 1, 0, 0, -1],
    'Tiempo': [-1, 1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, 0, 0, 0],
    'Adherencia': [3, 4, 2, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 4]
}
df = pd.DataFrame(data)

# 1) MODELO (regresión polinomial de 2º orden) en pipeline
pipe = Pipeline([
    ('poly', PolynomialFeatures(degree=2, include_bias=False)),
    ('lin', LinearRegression())
])

X = df[['Solvente', 'Proporcion', 'Tiempo']].values
y = df['Adherencia'].values

```

2) VALIDACIÓN CRUZADA LOOCV (métricas globales)

```
y_true_oof, y_pred_oof, R2, RMSE, MAE = loocv_metrics(pipe, X, y)
print(f"LOOCV — R²: {R2:.3f} | RMSE: {RMSE:.3f} | MAE: {MAE:.3f}")
```

3) AJUSTE FINAL (para diagnósticos sobre todo el conjunto)

```
pipe.fit(X, y)
y_pred_all = pipe.predict(X)
resid_all = y - y_pred_all
```

Matriz de diseño con intercepto para influencia

```
Xp = pipe.named_steps['poly'].transform(X)
X_design = np.c_[np.ones((Xp.shape[0], 1)), Xp] # añade intercepto
D_cook, leverage = cooks_distance(X_design, resid_all)
```

4) GRÁFICOS DE DIAGNÓSTICO

4.1 Paridad (observado vs predicho) usando predicciones out-of-fold

if y_true_oof is not None and y_pred_oof is not None:

```
plt.figure()

plt.scatter(y_true_oof, y_pred_oof)

miny, maxy = min(y_true_oof.min(), y_pred_oof.min()), max(y_true_oof.max(),
y_pred_oof.max())

plt.plot([miny, maxy], [miny, maxy], linestyle='--') # línea identidad

plt.xlabel('Adherencia observada (LOOCV)')

plt.ylabel('Adherencia predicha (LOOCV)')

plt.title('Gráfico de paridad (observado vs predicho)')

plt.grid(True)

plt.tight_layout()

plt.show()
```

else:

```
print("No se pudieron generar gráficos de paridad o residuales debido a errores
en LOOCV.")
```

4.2 Residuales (out-of-fold) vs predicción (out-of-fold)

if y_true_oof is not None and y_pred_oof is not None:

```
resid_oof = y_true_oof - y_pred_oof

plt.figure()

plt.scatter(y_pred_oof, resid_oof)

plt.axhline(0, linestyle='--')
```

```
plt.xlabel('Adherencia predicha (LOOCV)')
plt.ylabel('Residuales (observado - predicho)')
plt.title('Residuales vs predicción (LOOCV)')
plt.grid(True)
plt.tight_layout()
plt.show()
```

4.3 Histograma de residuales (out-of-fold)

if y_true_oof is not None and y_pred_oof is not None:

```
resid_oof = y_true_oof - y_pred_oof
plt.figure()
plt.hist(resid_oof, bins=8)
plt.xlabel('Residuales (LOOCV)')
plt.ylabel('Frecuencia')
plt.title('Histograma de residuales')
plt.grid(True)
plt.tight_layout()
plt.show()
```

4.4 Q-Q plot de residuales (out-of-fold)

if y_true_oof is not None and y_pred_oof is not None:

```
resid_oof = y_true_oof - y_pred_oof
```

```
plt.figure()
stats.probplot(resid_oof, dist="norm", plot=plt)
plt.title('Q-Q plot de residuales (LOOCV)')
plt.tight_layout()
plt.show()
```

4.5 Distancia de Cook (ajuste final) — umbral de referencia $4/n$

if `D_cook` is not None:

```
n = len(df)
umbral = 4 / n
plt.figure()
plt.stem(range(1, n+1), D_cook, use_line_collection=True)
plt.axhline(umbral, linestyle='--')
plt.xlabel('Índice de observación')
plt.ylabel('Distancia de Cook')
plt.title('Distancia de Cook (influencia)')
plt.tight_layout()
plt.show()
```

(Opcional) imprimir observaciones con alta influencia

```
influyentes = np.where(D_cook > umbral)[0] + 1 # +1 para numeración humana
```

if `influyentes.size > 0`:

```
print(f"Observaciones con D_cook > {umbral:.3f}: {influyentes.tolist()}")
```

```
else:
```

```
    print("No se detectaron observaciones influyentes según el umbral 4/n.")
```

```
else:
```

```
    print("No se pudo calcular ni graficar la distancia de Cook debido a un error.")
```

```
# 5) COEFICIENTES CON IC 95% (bootstrap de casos)
```

```
coef_df = bootstrap_coefs(df, degree=2, B=1000, random_state=42)
```

```
print("\nCoeficientes del modelo (IC 95% por bootstrap):")
```

```
print(coef_df.to_string(index=False))
```

Anexo 2

```
import numpy as np
```

```
import pandas as pd
```

```
import matplotlib.pyplot as plt
```

```
from sklearn.pipeline import Pipeline
```

```
from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures
```

```
from sklearn.linear_model import LinearRegression
```

```
from sklearn.model_selection import LeaveOneOut
```

```
from sklearn.metrics import r2_score, mean_squared_error, mean_absolute_error
```

```
from scipy import stats
```

```
# 0) Rango
```

```
PHI_MIN, PHI_MAX = 0.25, 0.50    # dominio 1:3 a 1:1 -> phi = EPS/(EPS+solv)
```

```

T_MIN, T_MAX = 10.0, 30.0 # minutos

def phi_from_ratio(eps_g, solv_g):
    """Fracción másica de EPS en la mezcla:  $\phi = m_{\text{EPS}} / (m_{\text{EPS}} + m_{\text{solv}})$ ."""
    return eps_g / (eps_g + solv_g)

def code_phi(phi):
    """Codifica phi a [-1,1] usando min-max del dominio [0.25, 0.50]."""
    return 2*(phi - PHI_MIN)/(PHI_MAX - PHI_MIN) - 1

def code_time(t):
    """Codifica tiempo (10–30 min) a [-1,1]."""
    return 2*(t - T_MIN)/(T_MAX - T_MIN) - 1

def clamp01(y):
    """Acota predicciones a [0,5] (escala ASTM mapeada a 0–5)."""
    return np.clip(y, 0.0, 5.0)

def cooks_distance(X_design, resid):
    """Distancia de Cook para modelo lineal (X_design incluye intercepto)."""
    XtX_inv = np.linalg.inv(X_design.T @ X_design)
    H = (X_design @ XtX_inv) @ X_design.T
    h = np.diag(H)

```

```

n, p = X_design.shape
mse = (resid**2).sum() / max(n - p, 1)
D = (resid**2 / (p*mse)) * (h / (1 - h)**2)
return D, h

```

```

def ratio_str_from_phi(phi, nd=2):
    """Devuelve la proporción en formato '1:x' a partir de phi (EPS/(EPS+solv))."""
    x = (1 - phi) / phi
    return f"1:{round(float(x), nd)}"

```

```
# 1) Datos de entrada (SOLO gasolina)
```

```
# Columnas: EPS_g, Solvente_g, Tiempo_min, Adherencia (0–5)
```

```

data = [
    # EPS_g, Solvente_g, Tiempo_min, Adherencia
    [50, 150, 10, 3],
    [50, 150, 30, 4],
    [50, 100, 10, 1],
    [50, 100, 30, 2],
    [50, 50, 10, 0],
    [50, 50, 30, 1],
    [50, 100, 15, 2],
    [50, 150, 15, 4],
    [50, 150, 10, 3],

```

```

[50, 150, 30, 4],
[50, 100, 10, 1],
[50, 100, 30, 3],
[50, 50, 10, 0],
[50, 50, 30, 1],
[50, 100, 15, 2],
[50, 150, 15, 3],
[50, 150, 10, 3],
[50, 150, 30, 4],
[50, 100, 10, 1],
[50, 100, 30, 2],
[50, 50, 10, 0],
[50, 50, 30, 1],
[50, 100, 15, 2],
[50, 150, 15, 4],
]

```

```

df = pd.DataFrame(data,
columns=['EPS_g','Solvente_g','Tiempo_min','Adherencia'])

```

2) Variables continuas y codificadas

```

df['phi'] = phi_from_ratio(df['EPS_g'], df['Solvente_g']) # fracción másica EPS
df['x_phi'] = code_phi(df['phi']) # codificada [-1,1]

```

```
df['x_t'] = code_time(df['Tiempo_min']) # codificada [-1,1]
```

```
X = df[['x_phi','x_t']].values
```

```
y = df['Adherencia'].values
```

```
# 3) Modelo cuadrático (RSM) + LOOCV
```

```
pipe = Pipeline([  
    ('poly', PolynomialFeatures(degree=2, include_bias=False)),  
    ('lin', LinearRegression())  
])
```

```
# LOOCV: predicciones out-of-fold
```

```
loo = LeaveOneOut()
```

```
y_true_oof, y_pred_oof = [], []
```

```
for tr, te in loo.split(X):
```

```
    pipe.fit(X[tr], y[tr])
```

```
    y_hat = pipe.predict(X[te])[0]
```

```
    y_true_oof.append(y[te][0])
```

```
    y_pred_oof.append(y_hat)
```

```
y_true_oof = np.array(y_true_oof)
```

```
y_pred_oof = np.array(y_pred_oof)
```

```
# Acotar predicciones a [0,5] para reporte
```

```

y_pred_oof_c = clamp01(y_pred_oof)

R2 = r2_score(y_true_oof, y_pred_oof_c)

RMSE = mean_squared_error(y_true_oof, y_pred_oof_c)

MAE = mean_absolute_error(y_true_oof, y_pred_oof_c)

print(f"LOOCV — R²: {R2:.3f} | RMSE: {RMSE:.3f} | MAE: {MAE:.3f}")

# Ajuste final con TODOS los datos (para diagnósticos)
pipe.fit(X, y)

y_pred_all = pipe.predict(X)

resid_all = y - y_pred_all

# Matriz de diseño para influencia (incluye intercepto)
Xp = pipe.named_steps['poly'].transform(X)

X_design = np.c_[np.ones((Xp.shape[0], 1)), Xp]

D_cook, leverage = cooks_distance(X_design, resid_all)

# 4) Gráficos de diagnóstico

# 4.1 Paridad (LOOCV)

plt.figure()

plt.scatter(y_true_oof, y_pred_oof_c)

```

```
mn, mx = min(y_true_oof.min(), y_pred_oof_c.min()), max(y_true_oof.max(),
y_pred_oof_c.max())

plt.plot([mn, mx], [mn, mx], 'k--')

plt.xlabel('Adherencia observada (LOOCV)')

plt.ylabel('Adherencia predicha acotada (LOOCV)')

plt.title('Gráfico de paridad (observado vs predicho)')

plt.grid(True)

plt.tight_layout()

plt.show()
```

4.2 Residuales (LOOCV)

```
resid_oof = y_true_oof - y_pred_oof_c

plt.figure()

plt.scatter(y_pred_oof_c, resid_oof)

plt.axhline(0, linestyle='--', color='k')

plt.xlabel('Adherencia predicha (LOOCV)')

plt.ylabel('Residuales (obs - pred)')

plt.title('Residuales vs predicción (LOOCV)')

plt.grid(True)

plt.tight_layout()

plt.show()
```

4.3 Histograma de residuales

```
plt.figure()
plt.hist(resid_oof, bins=8)
plt.xlabel('Residuales (LOOCV)')
plt.ylabel('Frecuencia')
plt.title('Histograma de residuales')
plt.grid(True)
plt.tight_layout()
plt.show()
```

4.4 Q-Q plot

```
plt.figure()
stats.probplot(resid_oof, dist="norm", plot=plt)
plt.title('Q-Q plot de residuales (LOOCV)')
plt.tight_layout()
plt.show()
```

4.5 Distancia de Cook (ajuste final)

```
n = len(df)
umbral = 4/n
plt.figure()
plt.stem(range(1, n+1), D_cook)
plt.axhline(umbral, linestyle='--', color='k', label=f'4/n ≈ {umbral:.2f}')
plt.xlabel('Índice de observación')
```

```

plt.ylabel('Distancia de Cook')

plt.title('Distancia de Cook (influence)')

plt.legend()

plt.tight_layout()

plt.show()

# 5) Barrido interpolativo y recomendaciones

# Mallado en phi y tiempo dentro del dominio

phi_grid = np.linspace(PHI_MIN, PHI_MAX, 121)    # 0.25 a 0.50
t_grid = np.linspace(T_MIN, T_MAX, 101)        # 10 a 30 min
grid = np.array([(p,t) for p in phi_grid for t in t_grid])

# Codificación

grid_x = np.c_[code_phi(grid[:,0]), code_time(grid[:,1])]

# Predicción y acotado

yhat = clamp01(pipe.predict(grid_x))

res = pd.DataFrame({
    'phi': grid[:,0],
    'Tiempo_min': grid[:,1],
    'Adh_pred': yhat
})

# Ordenar por mayor adherencia predicha

```

```

res = res.sort_values('Adh_pred', ascending=False)

# Decodificación a formato 1:x

res['Proporcion_1_a_x'] = res['phi'].apply(ratio_str_from_phi)

# Top-N recomendaciones

TOP_N = 5

print("\nTop recomendaciones (gasolina):")

print(res[['Proporcion_1_a_x','Tiempo_min','Adh_pred']].head(TOP_N).to_string(index=False))

```

Anexo 3

Comparación de modelos interpolativos para adherencia (EPS:gasolina)

Modelos: RSM (polinomio 2º), Gaussian Process (GPR), SVR-RBF

Validación: LOOCV (R², RMSE, MAE)

Optimización: máximo dentro del dominio experimental

Gráficos: paridad del mejor modelo y mapa de contorno (interpolación)

```
import numpy as np
```

```
import pandas as pd
```

```
import matplotlib.pyplot as plt
```

```
from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures, StandardScaler
```

```
from sklearn.linear_model import LinearRegression
```

```
from sklearn.pipeline import Pipeline
```

```
from sklearn.gaussian_process import GaussianProcessRegressor
```

```
from sklearn.gaussian_process.kernels import ConstantKernel as C, WhiteKernel,
Matern

from sklearn.svm import SVR

from sklearn.model_selection import LeaveOneOut, GridSearchCV,
cross_val_predict

from sklearn.metrics import r2_score, mean_squared_error, mean_absolute_error
```

```
# =====
```

```
# 1) Datos embebidos (24 corridas: gasolina)
```

```
# Columnas: EPS_g, Solv_g, Tiempo_min, Adherencia (0-5)
```

```
# =====
```

```
data = [
    [50,150,10,3],
    [50,150,30,4],
    [50,100,10,1],
    [50,100,30,2],
    [50, 50,10,0],
    [50, 50,30,1],
    [50,100,15,2],
    [50,150,15,4],
    [50,150,10,3],
    [50,150,30,4],
    [50,100,10,1],
    [50,100,30,3],
    [50, 50,10,0],
    [50, 50,30,1],
    [50,100,15,2],
    [50,150,15,3],
    [50,150,10,3],
```

```

[50,150,30,4],
[50,100,10,1],
[50,100,30,2],
[50, 50,10,0],
[50, 50,30,1],
[50,100,15,2],
[50,150,15,4],
]
df = pd.DataFrame(data, columns=["EPS_g","Solv_g","Tiempo_min","Adherencia"])

# Variable de diseño continua: fracción polimérica (phi)
# (1:3 -> phi=0.25; 1:2 -> 0.3333; 1:1 -> 0.5)
df["phi"] = df["EPS_g"] / (df["EPS_g"] + df["Solv_g"])

# Matrices de entrada y salida
X = df[["phi","Tiempo_min"]].values.astype(float)
y = df["Adherencia"].values.astype(float)

# Dominio (para optimización y mapas, se respeta la interpolación)
phi_min, phi_max = X[:,0].min(), X[:,0].max()
t_min, t_max = X[:,1].min(), X[:,1].max()

# 2) Utilidad: validación LOOCV homogénea
def loocv_scores(model, X, y):
    """
    Devuelve R2, RMSE, MAE y predicciones LOOCV de un estimador scikit-learn.
    """
    loo = LeaveOneOut()

```

```

y_pred = cross_val_predict(model, X, y, cv=loo)
r2 = r2_score(y, y_pred)
rmse = np.sqrt(mean_squared_error(y, y_pred))
mae = mean_absolute_error(y, y_pred)
return r2, rmse, mae, y_pred

```

3) Modelos candidatos

```
results = {}
```

3.1) RSM: Polinomio de 2º grado (incluye interacción)

```

rsm_model = Pipeline([
    ("poly", PolynomialFeatures(degree=2, include_bias=False)),
    ("lin", LinearRegression())
])
r2, rmse, mae, yhat = loocv_scores(rsm_model, X, y)
results["RSM_Quadratic"] = {"r2": r2, "rmse": rmse, "mae": mae, "pred": yhat,
"model": rsm_model}

```

3.2) GPR: kernel Matérn 3/2 + ruido, con escalado previo

```

kernel = (C(1.0, (1e-3, 1e3)) *
    Matern(length_scale=[1.0, 1.0],
        length_scale_bounds=(1e-2, 1e3),
        nu=1.5)
    + WhiteKernel(noise_level=1e-3, noise_level_bounds=(1e-6, 1e-1)))

```

```

gpr = Pipeline([
    ("scaler", StandardScaler()),
    ("gpr", GaussianProcessRegressor(kernel=kernel,
        n_restarts_optimizer=5,

```

```

        normalize_y=True,
        random_state=42))
])
r2, rmse, mae, yhat = loocv_scores(gpr, X, y)
results["GPR_Matern32"] = {"r2": r2, "rmse": rmse, "mae": mae, "pred": yhat,
"model": gpr}

# 3.3) SVR-RBF con búsqueda pequeña de hiperparámetros (LOOCV interno)
param_grid = {
    "svr__C": [1.0, 10.0, 100.0],
    "svr__gamma": ["scale", 0.1, 1.0],
    "svr__epsilon": [0.01, 0.1, 0.2],
    "svr__kernel": ["rbf"],
}
svr_base = Pipeline([
    ("scaler", StandardScaler()),
    ("svr", SVR())
])
svr_grid = GridSearchCV(svr_base,
                        param_grid,
                        cv=LeaveOneOut(),
                        scoring="neg_mean_squared_error",
                        n_jobs=None)
svr_grid.fit(X, y)
best_svr = svr_grid.best_estimator_
r2, rmse, mae, yhat = loocv_scores(best_svr, X, y)
results["SVR_RBF"] = {"r2": r2, "rmse": rmse, "mae": mae, "pred": yhat,
"model": best_svr, "best_params": svr_grid.best_params_}

```

```

# 4) Selección del mejor modelo (mínimo RMSE LOOCV)

summary = []

for name, res in results.items():

    summary.append([name, res["r2"], res["rmse"], res["mae"]])

summary_df = pd.DataFrame(summary,
columns=["Modelo", "R2_LOOCV", "RMSE_LOOCV", "MAE_LOOCV"]).sort_values("
RMSE_LOOCV")

best_name = summary_df.iloc[0]["Modelo"]

best_model = results[best_name]["model"]

print("\n=== COMPARATIVA LOOCV ===")
print(summary_df.to_string(index=False))
print(f"\nMejor modelo (según RMSE-LOOCV): {best_name}")

# Ajuste final con todos los datos (para contornos/óptimo)
best_model.fit(X, y)

# 5) Gráfico de paridad (mejor modelo, predicción LOOCV)
y_pred_loocv = results[best_name]["pred"]

plt.figure(figsize=(6,6))

plt.scatter(y, y_pred_loocv)

lims = [min(y.min(), y_pred_loocv.min())-0.2, max(y.max(),
y_pred_loocv.max())+0.2]

plt.plot(lims, lims, linestyle="--")

plt.xlabel("Adherencia observada")

plt.ylabel("Adherencia predicha (LOOCV)")

plt.title(f"Paridad — {best_name}")

plt.grid(True)

plt.tight_layout()

```

```
plt.show()
```

```
# 6) Optimización (máximo dentro del dominio) + mapa de contorno
```

```
phi_grid = np.linspace(phi_min, phi_max, 121)
```

```
t_grid = np.linspace(t_min, t_max, 121)
```

```
PP, TT = np.meshgrid(phi_grid, t_grid)
```

```
gridX = np.column_stack([PP.ravel(), TT.ravel()])
```

```
Yhat = best_model.predict(gridX).reshape(PP.shape)
```

```
# Localizar máximo interno (interpolación)
```

```
idx_max = np.unravel_index(np.argmax(Yhat), Yhat.shape)
```

```
phi_opt = float(PP[idx_max])
```

```
t_opt = float(TT[idx_max])
```

```
y_opt = float(Yhat[idx_max])
```

```
# Conversión a proporción EPS:solvente  $\approx 1$  : denom
```

```
denom = (1 - phi_opt) / phi_opt
```

```
print(f"\nÓptimo interpolado (según {best_name}):")
```

```
print(f" - Fracción polimérica phi = {phi_opt:.3f} → EPS:solvente  $\approx 1$ :{denom:.2f}")
```

```
print(f" - Tiempo  $\approx$  {t_opt:.1f} min")
```

```
print(f" - Adherencia predicha  $\approx$  {y_opt:.2f}")
```

```
# Mapa de contorno
```

```
plt.figure(figsize=(7,6))
```

```
cs = plt.contourf(PP, TT, Yhat, levels=20)
```

```
plt.scatter(X[:,0], X[:,1], marker="o")
```

```
plt.scatter([phi_opt], [t_opt], marker="x")
```

```
plt.colorbar(cs, label="Adherencia predicha")
plt.xlabel("Fracción polimérica ( $\phi = \text{EPS}/(\text{EPS}+\text{solvente})$ )")
plt.ylabel("Tiempo de mezclado (min)")
plt.title(f"Mapa de contorno — {best_name}\nÓptimo:  $\phi={\phi\_opt:.3f}$  → EPS:solv  

 $\approx 1:{\text{denom}:.2f}$ , tiempo  $\approx {\text{t\_opt}:.1f}$  min, adherencia  $\approx {\text{y\_opt}:.2f}$ ")
plt.grid(True)
plt.tight_layout()
plt.show()
```

Referencias

- ASTM International. (2017). ASTM D-3359-17: Standard test methods for rating adhesion by tape test. ASTM International.
- **Avellaneda Díaz, D. C. (2017). Evaluación para la obtención de un recubrimiento con resina a base de poliestireno expandido reciclado a nivel laboratorio [Tesis de pregrado, Fundación Universidad de América]. Fundación Universidad de América, 23-46.**
- **Carmona Mora, B. C., & Correcha Bocanegra, D. S. (2024). Evaluación del reciclado de poliestireno expandido mediante la disolución con solventes para aplicación como base de pintura a nivel laboratorio [Tesis de pregrado, Fundación Universidad de América]. Fundación Universidad de América.28-55**
- Figueroa Pacheco, L., & Parra Bocanegra, S. A. (2022). Estudio de prefactibilidad para la instalación de una planta de producción de pintura a base de poliestireno expandido y de un solvente ecológico [Tesis de ingeniería, Universidad de Lima]. Facultad de Ingeniería y Arquitectura.
- **González Muñoz, J. S., Palacios Martínez, J. F., & Serna Londoño, L. E. (2022). Reducción de residuos de poliestireno expandido (EPS) mediante su disolución en solventes verdes (D-limoneno) y su aplicación como material adherente. En A. M. Zambrano & J. Martínez (Eds.), *Compilación de investigaciones científicas 2022* (pp. 192–203). Ediciones Iberoamericana.**
- International Organization for Standardization. (2016). ISO 4628-1/-2/-5: Paints and varnishes—Evaluation of degradation of coatings. ISO.
- James, G., Witten, D., Hastie, T., & Tibshirani, R. (2021). An introduction to statistical learning (2nd ed.). Springer.
- **Jiménez-Rojas, E., Pulgarín-Penagos, S., Vásquez-Tuberquia, M. A., Gómez-Jaramillo, C., Granda-Ramírez, C. F., & Hincapié-Mejía, G. (2022).**

Uso de un solvente verde para la reducción del volumen del poliestireno expandido en un establecimiento educativo. Ing-NOVA, 1(1), 18–29.
<https://doi.org/10.32997/rin-2022-3725>

- Montgomery, D. C. (2019). Design and analysis of experiments (9th ed.). Wiley.
- Myers, R. H., Montgomery, D. C., & Anderson-Cook, C. M. (2016). Response surface methodology (4th ed.). Wiley.
- **Perdomo González, L., Queiroz Bracarense, A., Quintana Puchol, R., Caires Pereira, E., Rodríguez Pérez, M., & Duffus Scott, A. (2012). Perspectiva de uso del poliestireno expandido, como alternativa de impermeabilizante, para electrodos empleados en la soldadura subacuática mojada. *Revista Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquia*, (62),<https://www.redalyc.org/pdf/430/43025115011.pdf> [Redalyc.org](https://www.redalyc.org), 103–113.**
- Pila Guagua, J. P. (2023). Diseño de un proceso de obtención de pintura acrílica con efecto impermeabilizante a partir de poliestireno expandido [Trabajo de titulación, Escuela Superior Politécnica de Chimborazo]. Facultad de Ciencias.
- **Secretaría de Economía. (2016). NMX-U-122-SCFI-2016: recubrimientos, pinturas, barnices y productos afines — evaluación de la degradación de recubrimientos — designación de la cantidad y tamaño de los tipos más comunes de defectos y de la intensidad de los cambios uniformes de apariencia. Dirección General de Normas,3-33.**
- **Sosa Olivier, J. A., Laines Canepa, J. R., González Díaz, A., Martínez Bautista, L., Sánchez Pedrero, L., & Ávila Lázaro, I. (2017, octubre–diciembre). Poliestireno expandido: potencial para su reciclado como aislante térmico. *Ciencia UANL*, 20(86).<https://cienciauanl.uanl.mx/?p=7398>**
- Speight, J. G. (2014). The chemistry and technology of petroleum (5th ed.). CRC Press.

- Stoye, D., & Freitag, W. (Eds.). (1998). *Paints, coatings and solvents* (2nd ed.). Wiley-VCH.
- Tracton, A. A. (2006). *Coatings Technology Handbook* (2nd ed.). CRC Press.
- Wicks, Z. W., Jones, F. N., Pappas, S. P., & Wicks, D. A. (2007). *Organic Coatings: Science and Technology* (3rd ed.). Wiley-Interscience.
- Hernández García, Á. I., Alejandro-Hernández, S., Cuevas-Carballo, Z. B., Galaviz-Pérez, J. A., Vázquez-Rodríguez, J. M., & Guerrero-Zárate, D. (2024). **Solubility/Insolubility: A Possible Option for Recycling Polystyrene.** *Applied Sciences*, 14(17), 7950. <https://doi.org/10.3390/app14177950>
- Saltos Barreiro, P. V. (2015). **Diseño del proceso de reciclaje de poliestireno expandido por el método de disolución-precipitación** [Proyecto previo a la obtención del título de Ingeniera Química, Escuela Politécnica Nacional]. Escuela Politécnica Nacional.
- Carl Roth GmbH + Co. KG. (2024). *Xileno (isómeros) >97 %, puro, para histología* [Ficha de datos de seguridad, versión 7.1 (es), revisión 09.10.2024]. Carl Roth GmbH + Co. KG. <https://www.carlroth.com/medias/SDB-9713-ES-ES.pdf?context=bWFzdGVyfHNIY3VyaXR5RGF0YXNoZWV0c3wzMTc4MDV8YXBwbGJlYXRpb24vcGRmfGFEYzVMMmd4TWk4NU1UYzRORFI6T1RJNE16VXdMMU5FUWw4NU56RXpYMFZUWDBWVExuQmtaZ3wzYzU5ZGNmMzQyMGY5OWJkODRkYzljYTQ1OTE4MGVIZWZlYmNkZmY5MGI0MDAwZjBINmE3YjM2YmEzZTkYmjl2>.
- Petróleos Mexicanos (PEMEX). (s. f.). *HDS SAC-3: Combustóleo pesado* [Hoja de datos de seguridad]. PEMEX. https://www.pemex.com/comercializacion/productos/HDS/refinados/HDS_SAC-3_combustoleo_pesado.pdf.
- Carl Roth GmbH + Co. KG. (2024). *D-(+)-Limoneno* [Ficha de datos de seguridad, versión 7.0 (es), revisión 19.09.2024]. Carl Roth GmbH + Co. KG. <https://www.carlroth.com/medias/SDB-6722-ES-ES.pdf?context=bWFzdGVyfHNIY3VyaXR5RGF0YXNoZWV0c3wzMjQ0ND>

[F8YXBwbGljYXRpb24vcGRmfGFETXhMMmczWWk4NU1UZ3dPREV4TIRJ
Mk1UYzBMMU5FUWw4Mk56SXIYMFZUWDBWVExuQmtaZ3xmYjk5Yjc1O
DU4Y2Y1MzdiOWU0NmQxZTY2YjEwOTcwYWQ5MmM5MDhjZjNmNzM4N
jU4YmUyZGFjYzY5Y2I5OWRm.](#)

- Carl Roth GmbH + Co. KG. (2020). *Acetato de etilo ROTIDRY® ≥99,8 % (≤100 ppm H₂O), seco* [Ficha de datos de seguridad, versión 2.1 (es), revisión 02.04.2020]. Carl Roth GmbH + Co. KG. <https://www.uv.mx/pozarica/cq/files/2022/04/3.-Acetato-de-Etilo.pdf>.