

71  
2ej



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA

SIMULACION AMBIENTAL

TRANSPORTE Y DISTRIBUCION DE LOS OXIDOS  
DE NITROGENO EN LA ATMOSFERA URBANA



EXAMENES PROFESIONALES  
FAC. DE QUIMICA

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE

INGENIERO QUIMICO

P r e s e n t a

JOSE ANTONIO MONTOYA ZURITA

Ciudad Universitaria 1991

**FALLA DE ORIGEN**



Universidad Nacional  
Autónoma de México



## **UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso**

### **DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

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

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

## INDICE

	página
Introducción .....	1
CAPITULO I	
El sistema natural .....	4
1.1 La corteza terrestre .....	5
1.2 La hidrosfera .....	7
1.3 La atmosfera .....	10
CAPITULO II	
La contaminación .....	15
2.1 Contaminación atmosférica .....	16
2.2 El "esmog" .....	17
2.3 El "esmog clásico " .....	21
2.4 El "esmog" fotoquímico .....	23
2.5 Principales fuentes de contaminantes .....	25
CAPITULO III	
Reacciones fotoquímicas de los contaminantes en la atmósfera .	28
3.1 El dióxido de azufre ( $SO_2$ ) .....	28
3.2 El dióxido de carbono ( $CO_2$ ) .....	29
3.3 El dióxido de nitrógeno ( $NO_2$ ) .....	30
3.4 Nitrógeno reactivo en la troposfera .....	32

3.5 Fuentes y comportamiento químico .....	33
3.6 Distribución y transporte .....	39

CAPITULO IV

El modelo de distribución de contaminantes .....	45
4.1 Modelos Eulerianos .....	46
4.2 Modelos Lagrangianos .....	47
4.3 Fenomenos asociados con la distribución de contaminantes .....	48
4.4 Calculo de los coeficientes de difusión .....	51
4.5 Construcción del modelo de dispersión .....	52
4.6 Balance de masa .....	53
4.7 Balance de energía .....	59

CAPITULO V

Aplicación .....	70
5.2 Campos metereológicos .....	72
Tabla 5.1 .....	82
Tabla 5.2 .....	86
Tabla 5.3 .....	89
Tabla 5.4 .....	92
Tabla 5.5 .....	96
Tabla 5.6 .....	99
Tabla 5.7 .....	102
Tabla 5.8 .....	105

Tabla 5.9 .....	108
Tabla 5.10.....	112
Tabla 5.11.....	115
Tabla 5.12.....	118
Discusión de resultados .....	120
Conclusiones .....	124
Medidas adoptadas por el gobierno de la Cd. de México para combatir la contaminación .....	129
APENDICE I .....	132
APENDICE II .....	1135
Calculo de la altura de inversión .....	135
Concentración de ozono diciembre de 1989 IMECA .....	138
Concentración de ozono diciembre de 1989 ppm .....	139
Concentración de SO <sub>2</sub> diciembre de 1989 IMECA .....	140
Concentración de SO <sub>2</sub> diciembre de 1989 ppm .....	141
Concentración de NO <sub>2</sub> diciembre de 1989 IMECA .....	142
Concentración de NO <sub>2</sub> diciembre de 1989 ppm .....	143
Datos metereológicos .....	144
BIBLIOGRAFIA.....	146

## INTRODUCCION

El problema de la contaminación ha venido en incremento a la par del desarrollo tecnológico, pero la preocupación del hombre por ésta es reciente, debido a que las sustancias contaminantes provenientes de los procesos desarrollados por él se han ido acumulando hasta alcanzar niveles que están alterando de manera perceptible las condiciones ambientales y por ende la vida de los organismos que se encuentran en contacto con éste ambiente (1).

La humanidad ha presentado cambios culturales y tecnológicos, sobre todo durante la segunda mitad del siglo XX . Los cambios presentados en este período de transición de la edad de las máquinas a la edad de los sistemas, han sido rápidos y profundos.

En la actualidad el ser humano se propone a evaluar y en todo caso a reinterpretar a la sociedad como una red de sistemas interactivos con la finalidad de proponer una serie de estrategias para rediseñar el entorno en el cual se desarrolla la vida humana. Esta reestructuración de la forma de vida ataca los problemas que han provocado crisis en nuestra actual forma de vivir.

Estos problemas inciden en las áreas: educativa, salud, ecología, transporte, alimentación y población (2).

Cada uno de ellos representa por sí mismo un grave problema , pero analizandolos como una serie de efectos concatenados se puede ver que todos ellos se desarrollan al mismo tiempo y en un solo sitio.coexistiendo bajo una relación intrínseca por lo que la

solución de uno de ellos implica en cierta medida resolver los demás. Por lo que es necesario plantearse la alternativa de una solución global en la que el plan de acción debe ser cuidadosamente diseñado y controlado para que se puedan cuantificar las consecuencias y beneficios rápidamente y decidir si la acción emprendida está funcionando de manera adecuada y a la vez tener un respaldo de alternativas que se puedan utilizar de manera responsable y autocrítica para los momentos en los que la acción tomada conduzca a resultados opuestos a los esperados. (3)

El presente trabajo tiene por objeto exponer los conceptos básicos y la aplicación de los modelos de dispersión de contaminantes en la atmósfera.

En la primera parte se describen las interacciones que existen entre los fenómenos químicos y los procesos de transporte de partículas en la atmósfera.

El problema más serio que se presenta en la atmósfera urbana de la ciudad de México es la contaminación fotoquímica por lo que en el presente trabajo se dedicará al estudio del comportamiento de los contaminantes fotoquímicos desde el punto de emisión hasta un punto determinado de manera convencional.

En la segunda parte se integran los conceptos discutidos en la primera etapa se propone y se aplica un modelo de dispersión. La información generada a través de este tipo de modelos permite la planeación racional de los asentamientos humanos en las ciudades, así como la construcción uso e implementación de sistemas de tratamiento de desechos en su forma sólida, líquida o gaseosa, considerando un criterio técnico-económico que permita lograr la

excelencia en la calidad del estándar de vida de la población .

Debido al uso que se hace de algunos términos es necesario incluir su significado tomado en el contexto de este trabajo ( s )

**Ambiente .-** Se denomina así al conjunto de elementos naturales o inducidos por el hombre que interactúan en un espacio y tiempo determinado con todo organismo vivo ó sistemas de interés .

**Contaminación .-** Es la presencia en el ambiente de uno o mas contaminantes o de cualquier combinación de ellos que cause desequilibrios ecológicos

**Desequilibrios ecológicos .-** Es la alteración de las relaciones de interdependencia entre los elementos naturales que conforman el ambiente , que afectan negativamente la existencia , transformación y desarrollo del hombre y los demás seres vivos

**Ecosistema .-** La unidad funcional básica de interacción de los organismos vivientes entre sí y de éstos con el medio ambiente

**Contaminante .-** Toda materia o energía en cualquiera de sus formas, que al incorporarse o actuar en la atmósfera, agua, suelo, flora, fauna o cualquier elemento natural altere o modifique su composición y condición natural .



## CAPITULO I

### EL SISTEMA NATURAL

El sistema es el medio que rodea a un conjunto de organismos , hechos ó procesos que se realizan en un espacio y tiempo determinado. Por lo que su definición simplifica la comprensión del mecanismo de evolución del proceso ó hecho que se desea estudiar . Desde el punto de vista de la ecología el ser humano ha creado un subsistema asociado al sistema natural , éste es el sistema urbano en el que se ha cambiado el paisaje vegetal por una composición pintoresca de asfalto y concreto .

El hombre ha creado todo un sistema que le permite satisfacer sus necesidades soportado por el sistema natural que a la vez sirve de almacén a los desechos generados por el hombre .

Esta relación causal entre el hombre y el sistema es del tipo proveedor - consumidor y consumidor - contaminante , como se muestra en la figura 1.1

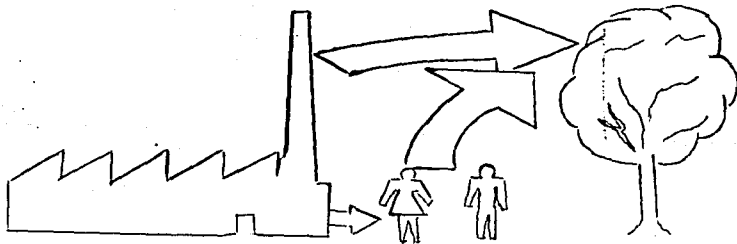


figura 1.1 El hombre y su interacción con el medio ambiente

El sistema natural está compuesto por la corteza terrestre , la atmósfera y la hidrósfera , que interaccionan entre sí . El equilibrio dinámico entre estos elementos conduce a la formación de un equilibrio fisicoquímico y energético , del que dependen los cambios en las características del suelo , aire , agua , y a su vez determina las condiciones apropiadas para la existencia de los seres vivos .

Los seres vivos forman por sí mismos , pequeños sistemas que producen y convierten la energía , transformando materias primas en productos , que son utilizados a su vez como materia prima por otros organismos , hasta integrarlos al sistema global como componentes naturales del medio ambiente .

A continuación se describen las partes del sistema natural .

### 1.1 LA CORTEZA TERRESTRE

La corteza terrestre es la parte sólida de la Tierra y está formada en mayor proporción por roca y una delgada capa compuesta por vegetación , tierra humus , arena y grava como se muestra en la figura 1.2 .

La composición interna se puede considerar constante durante largos períodos de tiempo y se pueden distinguir diferentes estratos intercalados desde el centro o núcleo terrestre hasta la roca superficial . Estos estratos presentan diferencias físicas y químicas , por ejemplo los lechos marinos en donde se presentan , a

diferencia de las capas continentales , cambios significativos en la composición química en los primeros 6 km de profundidad .

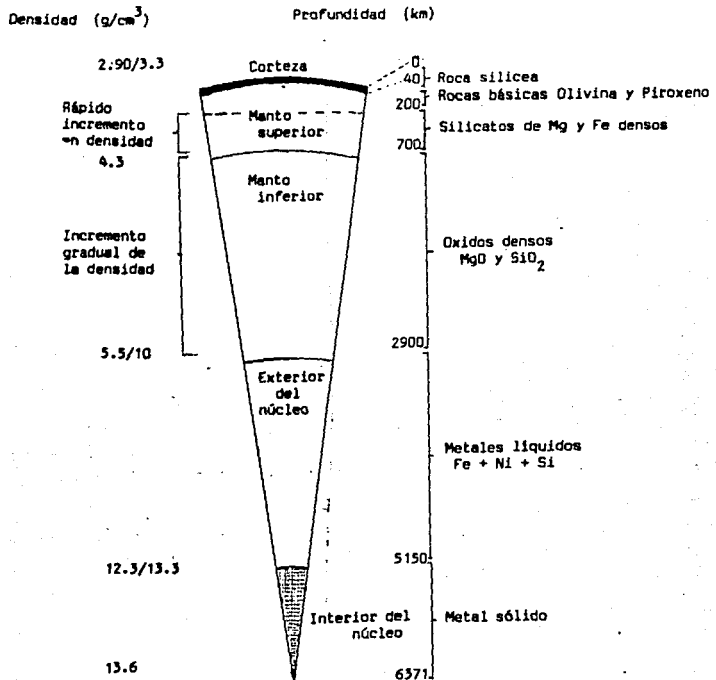


fig.1.2 la corteza terrestre ,su composición y disposición física.

Las reacciones características que se realizan entre estrato y estrato son las reacciones de oxidación y para su estudio se dividen en tres grandes grupos :

- a) La oxidación de la materia orgánica , es decir ,los compuestos que contienen carbono y que se encuentran en las rocas

sedimentarias .

b) La oxidación de especies inorgánicas generadas por la actividad geológica , por ejemplo el  $\text{Fe}^{2+}$  y algunos minerales expuestos a los gases reductores provenientes de la actividad volcánica .

c ) La oxidación de material orgánico , es decir , la descomposición de la vegetación , desperdicios y la respiración , fenómeno conocido como decaimiento oxidativo .

En este grupo se encuentran además de los ciclos de respiración , los de conversión de energía realizados por los sistemas biológicos , y la absorción de gases sobre la superficie de la corteza terrestre .

## 1.2 LA HIDROSFERA

Se denomina hidrósfera a la capa de agua que cubre las tres cuartas partes de la superficie total de la Tierra formando los océanos .

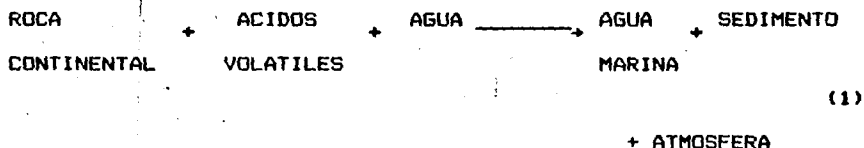
El agua de los océanos desempeña un papel muy importante en el mecanismo de regulación de la temperatura de la superficie terrestre así como en la humedad y disposición de los vientos .

A pocos metros sobre la superficie del mar la composición del aire es rica en vapor de agua que al condensarse forma grandes depresiones atmosféricas lo que provoca que el aire comience a

desplazarse alrededor de estos puntos de baja presión ,creandose el viento .

La composición química de la hidrósfera está determinada por las condiciones geológicas y atmosféricas de la región .

El constante movimiento del agua provoca el desgaste de las rocas y la consecuente disolución de las sales minerales contenidas en la arena alterando la concentración del agua oceánica.La presencia de gases que se solubilizan causan el mismo efecto . Este fenómeno puede ser representado de manera esquemática mediante la ecuación 1



Esta ecuación esta perfectamente balanceada con aproximadamente sesenta elementos que el agua contiene disueltos .

La composición del agua depende fuertemente de la partición de los elementos entre la roca y la fase soluble .

Así , un mojado rápido produce una solución con un pH relativamente bajo ( 5- 6 ) y una fuerza iónica de ( c.a.  $10^{-3}$  M ) que disuelve partículas minerales llevandolas hacia el seno oceánico que se caracteriza por una fuerza iónica alta ( 0.7 M ) y un pH de 8.2 . Los materiales disueltos permanecen suspendidos en el agua durante cierto tiempo , hasta que se sedimentan y empieza el proceso

de remoción , en el cual se transfieren los componentes volátiles a la atmósfera como son el oxígeno ( $O_2$ ) y el bióxido de carbono ( $CO_2$ ). Existe un proceso de incorporación de los componentes sólidos a la corteza terrestre , debido a la inclusión de los sedimentos o por la oclusión ocasionada através del agua intersticial que produce una serie de formaciones en cavernas subterráneas ( estalactitas ). Este conjunto de procesos se muestra en el esquema de la figura 1.3

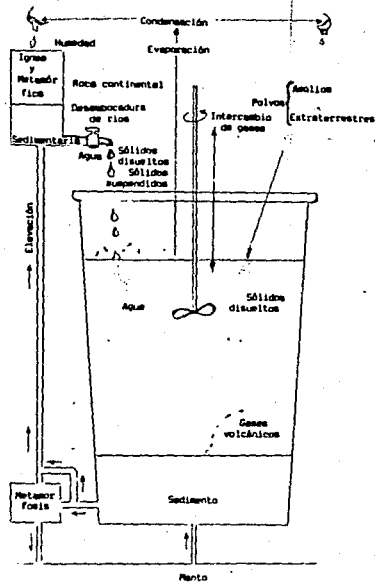


figura 1.3 DIAGRAMA ESQUEMATICO DE EL OCEANO

### 1.3 LA ATMOSFERA

La atmósfera se divide en cuatro regiones térmicas a partir de la superficie terrestre :

Tropósfera  
Estratósfera  
Mesósfera  
Termósfera

Tres cuartas partes de la masa total de la atmósfera se encuentran concentradas en la capa inferior , la tropósfera , junto con las nubes y el polvo .

La primera mitad de la tropósfera se localiza aproximadamente a 5300 m de altura de la corteza terrestre . En los primeros 1,800 m se encuentran contenidos la mitad del agua atmosférica y la mitad del material sólido atmosférico ( polvo ) .

La vida se desarrolla en la parte baja de la tropósfera la composición del aire en esta región se presenta en la tabla 1

Componente		% Presión parcial
Nitrógeno	N <sub>2</sub>	78.084
Oxígeno	O <sub>2</sub>	20.946
Argón	Ar	0.934
Dióxido <sub>2</sub> de carbono	CO <sub>2</sub>	0.033

Tabla 1 composición característica de la tropósfera

Además de los gases antes mencionados existen pequeñas cantidades de helio (He), metano (CH<sub>4</sub>), criptón (Kr), óxido nítrico (NO), hidrógeno (H<sub>2</sub>), xenón (Xe), ozono (O<sub>3</sub>), que en conjunto representan menos de el 0.01% del vol. total.

El límite superior de la tropósfera se denomina tropopausa , y determina el área através de la cual se realiza el intercambio de aire caliente y frío , aproximadamente a 8 km de altura en los polos y a 19 km. en el ecuador .

En la tropósfera se registra un descenso de temperatura de 2.5°C en promedio por cada 300 m de elevación .

La estratósfera se extiende aproximadamente de 15 a 25 km de altura de la corteza terrestre y en ella se producen una serie de cambios fisico-químicos significativos .

En la parte superior de la estratósfera se genera ozono que absorbe el exceso de las radiaciones ultravioleta de la luz solar y hace posible la vida en la Tierra . A partir de los 16 km se extiende la capa de máxima ionización de rayos cósmicos .

En la mesósfera , localizada aproximadamente a los 80 km de altura ; se producen una serie de cambios fisico-químicos aún mas significativos .

El primer cambio apreciable es la aparición de el ozono al que se le denomina oxígeno pesado siendo este un estado peroxidado del propio oxígeno cuya molécula consta de tres átomos de oxígeno y es producido por descargas eléctricas y radiaciones ultravioleta que atraviezan las moléculas de oxígeno .



Debido a este fenómeno de absorción de radiaciones ultravioleta , el ozono forma una barrera protectora que filtra la mayoría de las radiaciones ionizantes provenientes del espacio exterior . Las capas ricas en ozono actúan a su máxima efectividad como una pantalla absorbente de la radiación a una altura de 30 a 50 Km sobre el nivel de el mar .

En esta región la temperatura desciende a 76 C bajo cero , y en ella se observan diversas reacciones fotoquímicas .

La ionósfera se localiza aproximadamente a los 80 km y se extiende hasta los 500 km en esta región ocurren los cambios mas radicales de la atmósfera .

Los rayos X y ultravioleta , provenientes del sol ionizan el aire enrarecido , produciendo átomos y moléculas cargadas y electrones libres .

En esta región el componente principal es el oxígeno , y la temperatura se eleva hasta unos 1,100°C por lo que el aire es poco denso.

La totalidad de la ionósfera representa el 0.001% del peso total de la atmósfera y a pesar del gradiente de temperatura la transferencia de calor en esta zona es muy baja .

Esta capa altamente ionizada permite la reflexión de las ondas radioeléctricas permitiendo la transmisión de radio de larga distancia .

La ionósfera se divide para su estudio en cuatro capas subsecuentes la capa E localizada a 100 km sobre el nivel del mar llamada de

Kennelly-Heaviside y una capa E esporádica que aparece en verano y desaparece en invierno por lo que el ancho de ésta es variable .

Las capas F<sub>1</sub> localizada a 200 y F<sub>2</sub> a 300 km sobre el nivel del mar forman la capa appleton .

La capa G que es una región intermitente que se presenta , en las regiones ecuatoriales .Estas capas se esquematizan en la figura 1.4

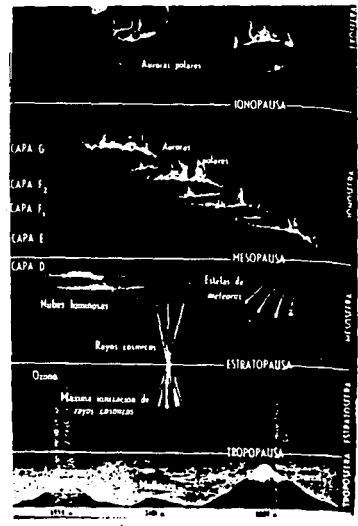


fig.1.4 estructura de la atmósfera

La densidad iónica de las capas D , E y F están en relación directa con la cantidad de luz solar a la que están expuestas . Esa densidad es mayor al mediodía,decrece al atardecer ,llega al mínimo durante la noche y vuelve a aumentar al amanecer .

La Exósfera se encuentra a 650 km de altura aproximadamente y está constituida de Helio y una delgada capa de Hidrógeno , la cual se extiende hasta desvanecerse en el espacio exterior .

La superficie terrestre es un gran reactor alimentado energéticamente por el sol y en donde se llevan a cabo una gran variedad de reacciones químicas . Debido a que la energía solar no se distribuye uniformemente sobre la superficie de la Tierra , la distribución de contaminantes se ve determinada por la diferencia entre el grado de incidencia de las radiaciones solares el grado de absorción de y el grado de reflexión de las mismas como se muestra en la figura 1.5

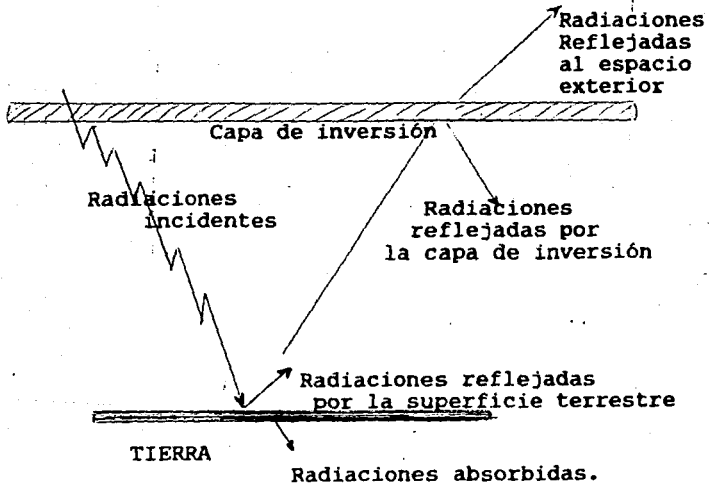


figura 1.5.-esquema de absorción y reflexión de las radiaciones solares

## CAPITULO II

### LA CONTAMINACION

Actualmente se habla de manera incesante de la contaminación , sin embargo no existe un concepto científico que lo defina . Este término se utiliza en un sentido legal ( s ) .

También se utiliza para describir el resultado de el desequilibrio entre entrada o producción y salida o descomposición de ciertos materiales , sin que el sistema retorne a sus condiciones iniciales , esto es , la obstrucción de el ciclo natural de conversión de la materia y energía .

Las actividades industriales , el desproporcionado crecimiento demográfico y los asentamientos humanos establecidos de manera incontrolada , afectan de manera perceptible la operación de el sistema corteza terrestre - atmósfera - hidrósfera .

Estos factores han ocasionado una serie de cambios energéticos y químicos que afectan a los sistemas biológicos de los seres vivos que lo habitan . Debido a que las actividades humanas son las principales causantes del desequilibrio ecológico el hombre puede ser considerado como el responsable del futuro del habitat de todos los organismos vivientes de la tierra .

La contaminación se clasifica en : orgánica , química , térmica , radiactiva , atmosférica etcetera. (12) . Estos tipos de contaminación no se presentan de manera aislada , sino que coexisten y dan lugar a

una serie de desequilibrios en el medio ambiente natural que causan cambios en los organismos y pueden significar la desaparición de algunas especies.

La contaminación química resulta de la liberación de sustancias poco frecuentes en estado natural o sustancias nuevas a las que los organismos vivos no han tenido ocasión de adaptarse todavía y que penetran en las células y obstruyen los ciclos naturales del sistema afectado .

## 2.1 CONTAMINACION ATMOSFERICA

La atmósfera es la porción mas pequeña del sistema aire-agua-suelo y sus componentes tienen dos papeles muy importantes :

a ) Son utilizados por los sistemas biológicos para realizar sus funciones básicas , síntesis de alimentos y oxidación de la glucosa para obtener energía .

b ) Determinan la composición del agua que se precipita en forma de lluvia determinando el grado de remoción de los gases y partículas suspendidas en la atmósfera

El aumento progresivo de la concentración de determinados gases y partículas en la atmósfera produce el enrarecimiento del aire contenido en la tropósfera .

Uno de los fenómenos mas notables causado por este aumento en la

concentración de determinados compuestos en la atmósfera es el "esmog" o "niebla de humo"

## 2.2 ESMOG

Se denomina así a la mezcla de compuestos gaseosos que al interaccionar con la humedad del aire forman aerosoles que disminuyen la visibilidad, al obstruir el paso de los rayos solares.

Sus principales componentes son el monóxido y el bióxido de carbono, sulfatos, monóxido y bióxido de azufre, hidrocarburos provenientes de la oxidación deficiente de los combustibles, partículas de metales pesados y polvos que son suspendidos en el aire por la acción de los vientos.

La formación del esmog sigue un ciclo que depende de una serie de factores físicos, químicos y meteorológicos. La mayoría de los contaminantes del aire son producto de la combustión, esto implica que los gases arrojados a la atmósfera se encuentran a una mayor temperatura que los gases atmosféricos por lo que tienden a formar columnas de emisión debido a su baja densidad.

A medida que los gases emitidos van ganando altura disminuyen su temperatura hasta alcanzar el equilibrio térmico con las capas atmosféricas subsecuentes, realizándose la expansión del gas con un consecuente descenso de presión.

A el equilibrio térmico que se realiza entre el contaminante y el aire de los alrededores se le conoce como rapidez adiabática de distribución de contaminantes y está determinado por la dirección

del viento , cantidad de radiaciones solares y la topografía del lugar .

Si la rapidez con la que disminuye la temperatura es mayor a la velocidad adiabática , la columna de contaminantes se encuentra más caliente que los alrededores por lo que el humo toma la forma de una " pluma " . esto es , una columna de humo delgada que se mueve rápidamente produciendo una espiral y el sistema se considera altamente inestable y los contaminantes se dispersan rápidamente como se muestra en la figura 2.1

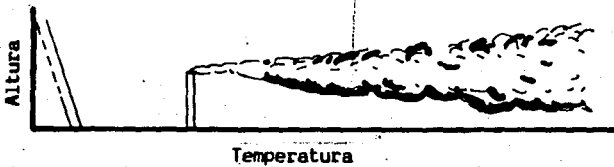


figura 2.1 Comportamiento de las emisiones de contaminantes gaseosos en condiciones favorables para la dispersión

Si la disminución de la temperatura es menor que la velocidad adiabática el cuerpo de contaminantes calientes se desplaza lentamente , y después de una serie de diluciones y enfriamientos debidos a la expansión del gas , la masa contaminante se estabiliza por lo que no hay dispersión como se ve en la figura 2.2

En condiciones de dispersión , la masa de contaminantes puede moverse y ser reemplazada por aire limpio y frío , proveniente de las capas

superiores de la tropósfera , permitiendo un buen mezclado y minimizando el gradiente térmico entre las capas superior e inferior debido a la transferencia de calor por convección forzada. como se muestra en la figura 2.3

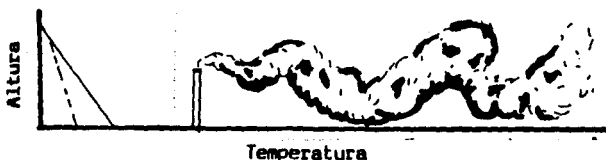


figura 2.2 comportamiento de las emisiones de contaminantes gaseosos en condiciones de baja transferencia de calor

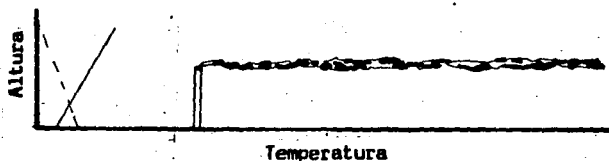


figura 2.3 comportamiento de las emisiones de contaminantes gaseosos en condiciones de inversión térmica

A la altura a la que el aire caliente se transporta y mezcla con el aire frío y alcanza su temperatura de equilibrio se le denomina profundidad de mezclado .

La profundidad de mezclado determina la máxima dispersión de los contaminantes ; y está en función de las estaciones del año, la temperatura del medio , la tasa de incidencia de rayos solares y



otros factores meteorológicos .

Así por ejemplo en un día soleado , considerando una temperatura promedio de 22 °C la profundidad de mezclado se lleva a cabo a varios miles de metros . sin embargo a bajas temperaturas y una baja incidencia de radiaciones solares , ésta se verifica a unos pocos cientos de metros ( cien o doscientos ) de altura . Lo que provoca que durante el mezclado de las capas de aire , la masa de contaminantes disminuya su altura y se compacte formando una especie de nata que no permite una transferencia de calor eficiente , por lo que el cambio de temperatura en los niveles inferiores es muy rápido y marcado .

A este fenómeno se le conoce con el nombre de inversión térmica y se presenta con mucha frecuencia en regiones que se encuentran a alturas superiores a los 1800 m sobre el nivel del mar , y que están fuertemente influidas por la presencia de masas de agua como lagos , presas , ríos o simplemente por la humedad del medio ambiente .

La contaminación es un problema que necesita de una referencia legal a fin poder cuantificar su variación .

El término "aire limpio" se utiliza para describir a aquel que además de sus componentes naturales presenta cierta cantidad de partículas consideradas nocivas y que pueden modificar las condiciones del habitat . Estas partículas a bajas concentraciones no tienen efectos tóxicos sobre los organismos con los que se encuentra en contacto La tabla 2 muestra las especificaciones que establece la EPA ( Environmental Protection Agency ) para

diferenciar entre aire "limpio " o " contaminado " (21)

Sustancia	Aire limpio	Aire contaminado
Dióxido de azufre (SO <sub>2</sub> )	0.001 - 0.01 ppm	0.02 - 2 ppm
Dióxido de Carbono (CO <sub>2</sub> )	310 - 330 ppm	350 - 700 ppm
monóxido de Carbono (CO)	< 1 ppm	5 - 200 ppm
Dióxido de nitrógeno (NO <sub>x</sub> )	0.001 - 0.01 ppm	0.01 - 0.1 ppm
Hidrocarburos	< 1 ppm	1 - 20 ppm
Partículas suspendidas	10 - 20 µg/m <sup>3</sup>	70 - 700 µg/m <sup>3</sup>

Tabla 2.1 Especificaciones de aire limpio y contaminado según EPA

La operación sinérgica entre las sustancias contaminantes y los sistemas donde se producen los efectos , muestran una asociación intrínseca por lo que es mejor examinar en etapas , el proceso de contaminación del aire por el esmog .

Se han reconocido dos tipos de esmog , los cuales se describen a continuación .

### 2.3 " ESMOG " CLASICO

Está formado principalmente por monóxido de carbono , bióxido de azufre y óxidos de nitrógeno los cuales actúan sobre los ciclos de respiración y fotosintético .

El primer producto del esmog clásico es el ácido sulfúrico , que es un producto de oxidación del bióxido de azufre , que es catalizado por partículas de carbón y algunos metales como el hierro , magnesio

y vanadio y su posterior disolución en el agua contenida en la atmósfera .

Al condensarse el vapor de agua disuelve al trióxido de azufre produciendo la precipitación llamada lluvia ácida ( en algunos lugares el pH de esta lluvia llega a tener valores de 4.5 ) .

Los óxidos de nitrógeno se hidrolizan de la misma manera formando ácido nítrico , que guarda una relación importante en la asociación de los compuestos que forman la masa total de contaminantes y que provocan una serie de reacciones que dan lugar a contaminantes secundarios de mayor reactividad que dañan a los sistemas tanto físicos como biológicos .

Por lo tanto se han estudiado y establecido los límites de exposición máximos permisibles a los contaminantes atmosféricos mas importantes según EPA (21) ; los cuales se muestran en la tabla 2.2

CLASE DE CONTAMINANTE	PERIODO MAXIMO PERMISIBLE	CONCENTRACION ESTANDAR MAXIMA ppm
Monóxido de carbono (CO)	8 h PROMEDIO	9.00
	1 h PROMEDIO	35.00
Oxidos de azufre ( SO <sub>x</sub> )	PROMEDIO ANUAL	0.03
	24 h PROMEDIO	0.14
Oxidos de nitrógeno ( NO <sub>x</sub> )	PROMEDIO ANUAL	0.05
OXIDANTES	1 h PROMEDIO	0.08

tabla 2.2 .-Límites de exposición máximos permisibles según la EPA

## 2.4 "ESMOG FOTOQUIMICO"

El esmog fotoquímico fue diferenciado del esmog clásico en 1943 en Los Angeles y ha sido detectado en muchas partes del mundo .

Es una mezcla compleja de productos que reaccionan en presencia de la luz del sol , y sus componentes principales son el óxido nítrico ( NO ) e hidrocarburos ligeros que son producto de la evaporación de combustibles .

Otras sustancias contaminantes como el dióxido de azufre ( SO<sub>2</sub> ) pueden participar en la formación del esmog fotoquímico , pero no de manera apreciable debido a que necesita de mayor energía que la proporcionada por la luz solar para que reaccione .

La diferencia en la composición de oxidantes suspendidos en la atmósfera es resultado de la variación de la mezcla de hidrocarburos que se encuentran presentes en determinadas regiones del medio ambiente . Los hidrocarburos que se encuentran con mas frecuencia en la atmósfera son el metano e hidrocarburos insaturados , producto de la mala combustion de gasolinas y combustóleos y a la evaporación de los mismos .

Los hidrocarburos insaturados disminuyen de manera notable la concentración del óxido nítrico , debido a su reactividad por lo que es importante mencionar que la concentración de los compuestos oxidantes presentan un patrón de comportamiento cíclico , determinado por las estaciones del año lo que provoca que el fenómeno ocurra de igual manera en cualquier región del mundo

La presencia de humedad en el medio ambiente disminuye la velocidad con que viaja el esmog fotoquímico , formando aerosoles , como el ácido nítrico .Con la presencia de partículas sólidas , suspendidas en la atmósfera los aerosoles tienden a sedimentarse .

La sedimentación se incrementa al aumentar la humedad y debido a esto la visibilidad en las zonas urbanas ,altamente contaminadas , mejora de manera apreciable después de una precipitación pluvial .

Se puede establecer , en un principio , que la visibilidad es inversamente proporcional a la concentración de partículas suspendidas según la siguiente relación

$$V \propto 1/M \quad (2.1)$$

Introduciendo una constante que se determina de manera experimental para cada compuesto la ecuación 2 puede escribirse como :

$$V = K/M \quad (2.2)$$

donde K tiene valores característicos para cada compuesto y tiene valores comprendidos entre 900 y 3600 km g/m<sup>3</sup>, así por ejemplo cuando la concentración de sólidos suspendidos es de 100 g/m<sup>3</sup> la visibilidad deberá ser de 18 km . En ciudades altamente contaminadas ocurre con frecuencia que la visibilidad es menor de 6 km , considerando una K promedio de 1800 kmg/m<sup>3</sup> la concentración de partículas suspendidas debe ser de 300 g/m<sup>3</sup> .

La producción de aerosoles aumenta cuando la humedad relativa de el aire es del 70 % con la consecuente disminución de visibilidad al 50 % , a humedades relativas del 90 % y en un sistema bajo condiciones iniciales iguales a la del primer ejemplo , la visibilidad se reduce a una tercera parte .

## 2.5 PRINCIPALES FUENTES EMISORAS DE CONTAMINANTES

### Máquinas de combustión interna

Son las principales fuente emisoras de contaminantes debido a la gran cantidad de emisores existentes y la distribución irracional de los mismos .(11,12)

Un factor importante es la reducción de la eficiencia en el proceso de combustión , debida al poco mantenimiento que se da a los motores de combustión interna , así como hornos de todo tipo lo que provoca una combustión incompleta , la cual arroja no sólo monóxido de carbono , bióxido de carbono y agua al medio ambiente , sino que ocasiona la vaporización de los hidrocarburos de bajo peso molecular que forman parte del combustible .

### Industrias

Son consideradas como la segunda fuente de contaminantes y se denominan fuentes contaminantes estacionarias y puntuales , ya que sus emisiones son continuas y no presentan un desplazamiento espacial .

Emiten sustancias contaminantes parecidas a la de los motores de

combustión interna ya que también consumen combustibles fósiles, éstos se utilizan en procesos de generación de energía eléctrica, térmica o mecánica mediante su combustión, durante la cual se emiten óxidos gaseosos de azufre, nitrógeno carbono. Los polvos y gases originados principalmente por procesos industriales metalúrgicos, refinerías y la industria química ocupan el tercer lugar en importancia, ya que si bien la cantidad de contaminantes arrojados a la atmósfera es menor, el grado de toxicidad de los mismos es mucho mayor que las emisiones de contaminantes provenientes de los procesos de combustión. Las principales emisiones de estas industrias son: Metalúrgica.-Polvos de roca, polvos venenosos de berilio, cadmio, plomo y arsénico, óxidos de hierro y azufre los que se precipitan en forma de lloviznas de ácidas y otros compuestos.

Refinerías de petróleo.-Emiten una gran cantidad de contaminantes dentro de los cuáles se pueden mencionar compuestos de azufre, óxidos de nitrógeno, amoníaco y algunos hidrocarburos de el mismo combustible que utilizan para sus procesos.

industria química. Los contaminantes que produce la industria química son mas peligrosos que los mencionados anteriormente como lo son compuestos que contienen arsénico, cianuro compuestos mutagénicos y cancerígenos que en cualquier momento

pueden entrar en contacto con el medio ambiente y producir contaminación .

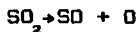
Algunos desechos gaseosos provocan lloviznas de ácido clorhídrico ( $\text{HCl}$ ), nítrico ( $\text{HNO}_3$ ), fosfórico ( $\text{H}_3\text{PO}_4$ ) y sulfúrico ( $\text{H}_2\text{SO}_4$ ), que corroen de manera apreciable los materiales de construcción . También emite óxidos de nitrógeno , de azufre y de flúor .



## CAPITULO III

### REACCIONES FOTOQUIMICAS DE LOS CONTAMINANTES EN EL AIRE

3.1  $\text{SO}_2$  El dióxido de azufre tiene su máximo de absorción a una longitud de onda ( $\lambda$ ) de 2850 Å por lo que que la absorción es muy débil en la región del ultravioleta y visible . La energía de disociación del enlace , según la reacción :



es de 135 Kcal /mol ;correspondiente a una energía proporcionada por una radiación de longitud de onda igual a 2180 Å . Dado que esta energía no está disponible en la baja atmósfera , el proceso fotoquímico primario que acompaña a la absorción de la luz solar por el  $\text{SO}_2$  es la formación de cualquiera de las dos especies excitadas  $^1\text{SO}_2$  o  $^3\text{SO}_2$  llamadas singulete y triplete respectivamente .

Los óxidos de azufre forman aerosoles cuya caracterización se realiza através de parámetros empíricos como lo son la velocidad de depositación y el factor de lavado propuesto por Chamberlain en 1965 (7). La velocidad de depositación es un factor de proporcionalidad que mide la relación de material depositado al material suspendido en el aire .Este parámetro debe de combinar todas las influencias físicas y metereológicas de las condiciones de estabilidad ,por lo que su concentración se va a ver disminuida por depositación física y adsorción sobre los

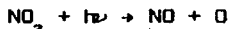
diferentes medios que existen en el medio ambiente como lo son vegetales , minerales y animales . por lo que los SO<sub>x</sub> no contribuyen de manera apreciable a la formación de el esmog fotoquímico

3.2 CO<sub>x</sub> Bajo estas siglas se agrupan a los compuestos CO , CO<sub>2</sub> . El monóxido de Carbono es un gas tóxico incoloro e inodoro que se produce al quemar carbon o hidrocarburos en atmósferas con deficiencia de oxígeno . Su longitud de enlace es intermedia entre la de un enlace doble y uno triple . Se obtiene de manera industrial através de la reacción del " gas de agua " o mediante la combustión incompleta de hidrocarburos , o por la reducción de CO<sub>2</sub> con carbon caliente . Al deshidratar el ácido fórmico con ácido sulfúrico concentrado se obtiene monóxido de carbono puro . Es muy útil como materia prima en la síntesis de muchas sustancia orgánicas .

El dióxido de carbono es un gas incoloro e inodoro . Es producto de la combustión total del carbon y de los hidrocarburos . Las reacciones fotoquímicas son mínimas pero en presencia de vapor de agua absorbe radiaciones del espectro electromagnético correspondientes a la longitud de onda del infrarrojo por lo que es parcialmente responsable del llamado efecto invernadero , ya que no permite la emisión de la energía térmica que irradia la tierra hacia el espacio exterior , con el

consecuente aumento de temperatura .

3.3.  $\text{NO}_2$  El dióxido de nitrógeno es la molécula mas importante de la atmósfera urbana con respecto a su capacidad absorbente . Absorbe radiación a lo largo de todo el intervalo de radiación visible y ultravioleta del espectro solar en la baja atmósfera . Por debajo de los 4200 Å el  $\text{NO}_2$  se descompone según la reacción



Su rendimiento cuántico primario en función de la longitud de onda  $\lambda$  es de más de un 90 % de las moléculas absorbentes de  $\text{NO}_2$  que se disocian en NO y O .

Por encima de los 3700 Å este porcentaje disminuye rapidamente y al llegar a los 4200 Å no se produce disociación .

La energía del enlace entre O y NO es de 74 Kcal/mol . Esta energía está disponible en las radiaciones con una longitud de onda de aproximadamente 4000 Å , por lo que a longitudes de onda mayores no se produce reacción debido a que el bajo contenido de energía es insuficiente para producir la ruptura del enlace .

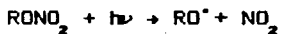
El punto en el cual las moléculas de  $\text{NO}_2$  dejan de disociarse, no esta esta bien determinado debido a que no se conoce exactamente la energía interna y cinética que posee la molécula en su estado energético de referencia antes de la absorción .

Experimentalmente se ha observado una zona de transición gradual que se presenta entre los 3700 y 4200 Å lo que demuestra la existencia de una variación energética de 10 Kcal/mol (49)

Esta franja de transición puede recorrerse a valores de

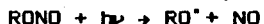
longitudes de onda mayores debido a un aumento en la temperatura lo que provoca el consiguiente aumento de la energía del sistema en su estado de referencia .

$\text{HNO}_3$  ( Acido nítrico ) y  $\text{RONO}_2$  ( nitratos de alquilo ) La mayoría de los experimentos indican que los nitratos de alquilo (  $\text{RONO}_2$  ) se descompone mediante el proceso primario :



donde  $\text{RO}^\bullet$  es el radical alcoxilo . La velocidad de absorción de los nitratos de alquilo es pequeña por encima de los  $3000 \text{ \AA}$  , de tal manera que estos compuestos no son importantes dentro de la fotoquímica de la contaminación del aire .

$\text{HNO}_2$  ( Acido nitroso ) y nitritos alquilos Los nitritos de alquilo se disocian según la reacción :



Los nitritos son probablemente las especies absorbentes mas importantes después del  $\text{NO}_2$  ( 26 , 28 ) .

Es importante mencionar que existen una gran cantidad de reacciones adicionales en el sistema de  $\text{NO}_x$  ,  $\text{H}_2\text{O}$  ,  $\text{CO}$  , y aire y la gran mayoría son de naturaleza térmica ( 29 , 30 ) . .

La tabla 3.1 muestra las constantes de velocidad de reacción para algunos  $\text{NO}_x$  .

Es importante hacer notar que las reacciones entre el oxígeno molecular y los óxidos de nitrógeno se realizan tanto en fase húmeda como en fase seca .

Reacción. Constante de velocidad de reacción a 298°K

Reacción	Constante de velocidad de reacción a 298°K	Depende de la intensidad de la luz
$\text{NO}_2 + h\nu \rightarrow \text{NO} + \text{O}$		
$\text{O}_3 + \text{NO} \rightarrow \text{NO}_2 + \text{O}_2$	$2.95 \times 10^4$	$\text{ppm}^{-1} \text{min}^{-1}$
$2\text{NO} + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{NO}_2$	$7.62 \times 10^{10}$	$\text{ppm}^{-2} \text{min}^{-1}$
$\text{O} + \text{NO}_2 + \text{M} \rightarrow \text{NO}_3 + \text{M}$	$4.5 \times 10^{-3}$	$\text{ppm}^{-2} \text{min}^{-1}$
$\text{NO}_3 + \text{NO} \rightarrow 2\text{NO}_2$	$1.48 \times 10^4$	$\text{ppm}^{-1} \text{min}^{-1}$
$\text{O} + \text{NO} + \text{M} \rightarrow \text{NO}_2 + \text{M}$	$2.34 \times 10^{-3}$	$\text{ppm}^{-2} \text{min}^{-1}$
$\text{NO}_3 + \text{NO}_2 \rightarrow \text{N}_2\text{O}_5$	$4.43 \times 10^3$	$\text{ppm}^{-1} \text{min}^{-1}$
$\text{N}_2\text{O}_5 \rightarrow \text{NO}_3 + \text{NO}_2$	$1.38 \times 10^4$	$\text{min}^{-1}$
$\text{NO}_2 + \text{O}_3 \rightarrow \text{NO}_3 + \text{O}_2$	$4.6 \times 10^{-3}$	$\text{ppm}^{-1} \text{min}^{-1}$

Tabla 3.1 Constantes de velocidad de reacción para algunos  $\text{NO}_x$  presentes en la atmósfera

### 3.4 NITROGENO REACTIVO EN LA TROPOSFERA

La toxicidad del esmog fotoquímico aumenta debido a la presencia del dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ), halocarbonos ( $\text{R-X}$  donde R representa una cadena hidrocarbonada y X a un halógeno), metano ( $\text{CH}_4$ ), ozono ( $\text{O}_3$ ), monóxido de carbono ( $\text{CO}$ ), y el radical hidroxilo ( $\text{OH}^\bullet$ ).

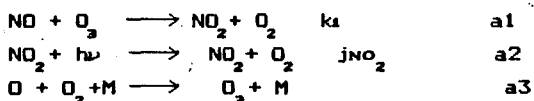
Los óxidos de nitrógeno producen cambios climáticos en la biósfera, por lo que es necesario completar el conocimiento sobre su mecanismo de transporte y de reacción para controlar sus efectos sobre la atmósfera y su repercusión en la vida humana y consecuencias sobre el medio ambiente.

### 3.5 FUENTES Y COMPORTAMIENTO QUIMICO

Los óxidos de nitrógeno son emitidos como óxido nítrico ( NO ) por una gran variedad de fuentes emisoras , pero en estudios recientes se ha determinado que el 70 - 90 % de las emisiones son de carácter antropogénico de las cuales el 95 % se deben a la combustión de hidrocarburos provenientes de los motores de combustión interna ( transporte principalmente ) . ( 6 )

La concentración de óxido de nitrógeno disminuye rápidamente debido a la reacción de oxidación en presencia de ozono para dar como producto el dióxido de nitrógeno , el dióxido de nitrógeno absorbe luz de longitud de onda relativamente altas (  $\lambda=420$  nm luz ultravioleta ) fotolizándose rápidamente y dando por resultado ozono y monóxido de nitrógeno .

El cambio global en la concentración de ozono y de óxido nítrico es nulo como se muestra en los equilibrios a1..a3 por lo que utilizando la teoría del estado estacionario se puede determinar la concentración máxima del ozono .



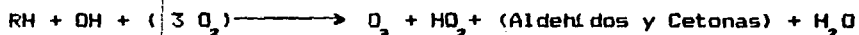
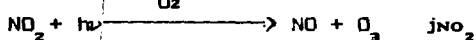
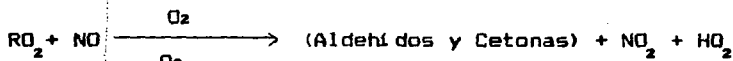
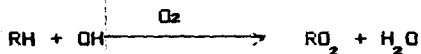

---

Secuencia nula

Estas no son las únicas reacciones que se llevan a cabo en la atmósfera. En la tropósfera el óxido nítrico reacciona con otras

especies como lo es el radical hidroperóxi ( $\text{HO}_2$ ) el cuál es originado por reacciones fotoquímicas del radical hidroxil y átomos de oxígeno ; también reacciona con otros peroxiradicales orgánicos ( $\text{RO}_2$ ) producidos por una gran variedad de procesos iniciados por la oxidación de hidrocarburos .

A continuación se muestra la secuencia de oxidación de un alcano :



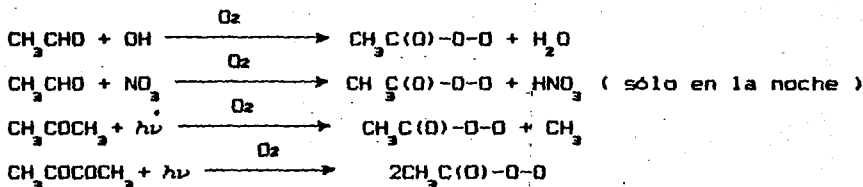
Estas reacciones producen ozono debido a que el óxido nítrico se oxida a dióxido de nitrógeno , sin que exista el consumo de ozono por lo que es lógico que cuando se presentan episodios de esmog fotoquímico los niveles de ozono aumenten considerablemente ( « » ). Esto se debe a que el dióxido de nitrógeno y el óxido nítrico se encuentran en un ciclo catalítico en el cuál la producción de ozono depende de la relación de  $\text{NO}_2 / \text{NO}$  , por lo que la concentración de ozono creado es mucho mayor que la concentración inicial de los  $\text{NO}_x$  . Además se producen aldehídos y cetonas que son precursores de los radicales peróxiacetil  $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})-\text{O}-\text{O}$  los cuáles son muy reactivos y en presencia de el dióxido de nitrógeno forman el peroxiacetilnitrato ( PAN ) según la siguiente reacción :



Los compuestos del grupo carbonilo que forman fácilmente el radical peroxiacetil son el acetaldehído ( $\text{CH}_3\text{CHO}$ ), la acetona ( $\text{CH}_3\text{COCH}_3$ ) y el biacetil ( $\text{CH}_3\text{COCOCH}_3$ ), los cuales son productos de oxidación de los hidrocarburos.

El acetaldehído es un producto de reacción de todos los n - alcanos y alquenos ; la acetona es un producto de oxidación de los reactivos :  $\text{C}_3\text{H}_8$ ,  $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$ ,  $i\text{-C}_5\text{H}_{12}$ . El biacetil es un producto de oxidación del  $\sigma$ -xileno .

El PAN es probablemente el producto de oxidación mas abundante y sigue la siguiente secuencia de formación :

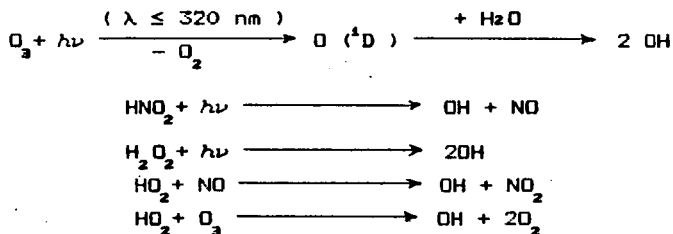


También se producen compuestos como el ácido peroxinitrico ( $\text{HO}_2\text{NO}_2$ ) el peroxi-propionil-nitrato (PPN) y el peroxi-benzoil-nitrato (PBzN)

El papel que desempeña el radical hidroxil en la formación del radical peroxiacetil es muy importante, se cree que este radical es producido durante la fotólisis del ozono ; el reciclado de otros radicales libres y la fotólisis de productos secundarios



son fuentes adicionales de radicales hidroxil , aunque su principal ruta de formación es la siguiente:



La importancia en la formación de ozono y PAN a partir de los óxidos de nitrógeno está fuertemente influidas por la concentración de radicales hidroperoxil vía  $\text{HO}_2 + \text{NO}$  que es la reacción mas importante .

El ácido nitroso (  $\text{HNO}_2$  ) es relativamente estable en la noche pero se fotoliza fácilmente durante el transcurso de la mañana , observandose una máxima producción del radical hidroxil hacia el medio día .

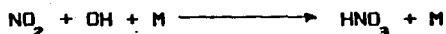
El radical hidroxil es sumamente reactivo y es el responsable de la remoción química de la mayoría de las especies químicas inyectadas a la atmósfera , ya sea por emisiones antropogénicas o naturales .

En presencia de hidrocarburos y  $\text{NO}_x$  , se produce la fotólisis de el ozono y de el PAN . En un sistema bajo inversión térmica se tiene la máxima reactividad de los hidrocarburos de origen antropogénico ( como los alcanos , alquenos y aromáticos ) y de origen biogénico

( como el isopreno y los terpenos ) por lo que las concentraciones de ozono y PAN son considerados los principales indicadores de la concentración de el esmog fotoquímico, producido por el hombre .

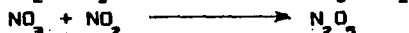
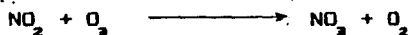
El PAN a diferencia de el ozono no se produce en la atmósfera libre es decir a alturas entre 12 y 50 km sobre la superficie terrestre por lo que es un indicador específico del perfil de contaminantes fotoquímicos en las interacciones hidrocarburo - NOx

El ácido nítrico es determinante en el mecanismo de depositación húmeda por lo que para propósitos prácticos es un producto fotoquímico removido por precipitación y por depositación superficial en un período comprendido entre 1 y 10 días . Durante el día el dióxido de nitrógeno reacciona rápidamente con el radical hidroxil para formar el ácido nítrico ,pero en la noche , se llevan a cabo reacciones en fase líquida y en fase gaseosa que dan por resultado la formación del ácido nítrico através de una reacción de descomposición del  $N_2O_5$  ( 24 )



favorecida durante

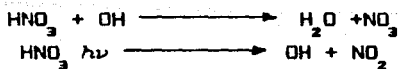
el día



favorecidas durante

la noche

En teoría , el ácido nítrico en fase gaseosa puede participar en la química del nitrógeno atmosférico através de la depositación de los iones nitrato y nitrito

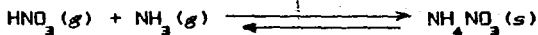


Las velocidades de reacción son tan lentas que no afectan de manera apreciable el balance de nitrógeno en la atmósfera baja (troposfera). Sin embargo en la troposfera alta, el  $\text{HNO}_3$  puede estar en equilibrio con el dióxido de nitrógeno y si esta masa de aire está estática como sucede durante los períodos de inversión en los que la velocidad de depositación es baja esta masa puede viajar bajo un patrón de flujo laminar durante cientos de kilómetros.

Al ocurrir cualquier cambio drástico en las condiciones de humedad se producen precipitaciones pluviales y en poco tiempo la depositación se realiza, afectando perceptiblemente el balance de nitrógeno en la atmósfera baja.

Esta es una de las razones que justifican el suponer que el equilibrio atmosférico está influenciado por el equilibrio entre el  $\text{HNO}_3$  el  $\text{NH}_3$  gaseoso y el nitrato de amonio sólido (7).

Este equilibrio  $\text{HNO}_3 - \text{NH}_3 - \text{NH}_4\text{NO}_3$  es altamente sensible a los cambios de temperatura, observándose un aumento de aproximadamente cuatro veces las concentraciones al equilibrio en un rango de temperaturas de 20 a 30 °C.



### 3.6 ) DISTRIBUCIÓN Y TRANSPORTE

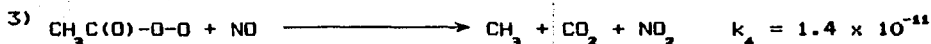
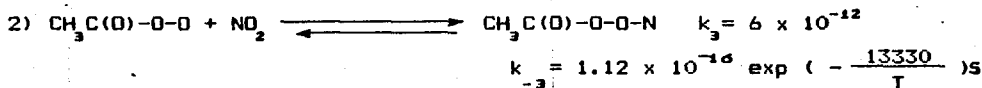
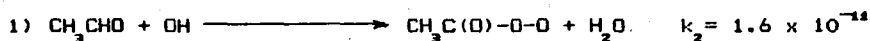
Los óxidos de nitrógeno son emitidos a la atmósfera como óxido nítrico, éste reacciona rápidamente para formar una gran variedad de especies, la gran mayoría no han sido identificados ni medidos .

Tomando como base la reacción de los  $\text{NO}_x$  con el radical hidroxilo, se ha observado que los óxidos de nitrógeno , bajo las condiciones climáticas estacionales de verano tienen un tiempo de vida media que varía aproximadamente de un día hasta un mínimo de 4 a 8 horas dependiendo de la velocidad de los vientos y la profundidad de mezclado y de aproximadamente una semana en invierno . Este período de vida media tan corto limita su viaje a unos cuantos cientos de kilómetros .Sin embargo el ácido nítrico puede ser transportado através de mayores distancias ya que desempeña un papel poco importante en el sistema de reacciones fotoquímicas y está fuertemente influido por una serie de procesos físicos de depositación húmeda y depositación seca ( 37 , 8 ) .

En años recientes se ha encontrado ( 38 ) que el PAN actúa como reservorio de nitrógeno y como un compuesto que determina el transporte global de los óxidos de nitrógeno en la atmósfera por lo que ha sido objeto de estudios minuciosos y dirigidos a determinar su comportamiento en fluidos turbulentos y con compuestos reaccionantes ( 39 ) .

Se ha encontrado que su concentración se ve fuertemente influenciada por pequeños cambios en la temperatura ;para el estudio de su comportamiento se supone que todos los radicales peroxiacetil son

producidos por la oxidación del acetaldehído, los equilibrios de formación y descomposición de PAN son descritos a continuación:



El tiempo de vida media del PAN es el tiempo que tarda en reducirse la concentración del contaminante a la mitad de su concentración inicial por lo que basándose en el principio de el estado estacionario y suponiendo que no hay formación de PAN nuevamente en la atmósfera se expresa de manera analítica el tiempo de vida media como:

$$\tau_{\text{PAN}} = \frac{k_3/k_4 + [\text{NO}]/[\text{NO}_2]}{(k_3 + k_5[\text{OH}] + j_{\text{PAN}}) [\text{NO}]/[\text{NO}_2] + k_3/k_4 (k_5[\text{OH}] + j_{\text{PAN}})} \quad (3.1)$$

La ecuación 3.1 se obtiene al resolver la ecuación diferencial de velocidad de reacción del contaminante:

$$\frac{d[\text{PAN}]}{dt} = \frac{k_2 k_3 [\text{OH}][\text{CH}_3\text{CHO}]}{k_3 + k_4 [\text{NO}]/[\text{NO}_2]} - \frac{[\text{PAN}]}{\tau_{\text{PAN}}}$$

Esta ecuación muestra que durante el día el transporte de PAN en la atmósfera está fuertemente asociado con la síntesis continua de PAN durante el período de viaje .

La magnitud del primer término de la ecuación indica la velocidad de formación de PAN y el segundo la velocidad de desaparición del mismo . La descomposición térmica de el PAN está dada por la ecuación 2 y cuantificada através del valor de (  $k_{-3}$  ) es dependiente de la temperatura y ocurre dentro de el rango de tiempos esperados (  $1/k_{-3}$  ) de 1 h a 298 °K , de 2 días a 273 °K , 148 días a 250 °K y de 42 años a 230 °K . La figura 1 muestra la relación que guarda la concentración de los diferentes contaminantes a diferentes altitudes a 45 °N .

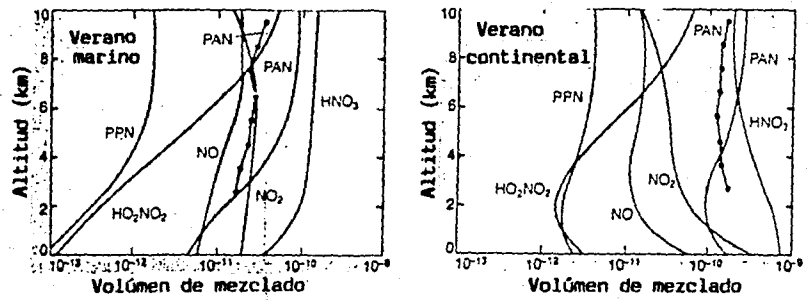


fig.11 Variación de las concentraciones de algunos contaminantes en función de la altura . .

Las mediciones realizadas através de sistemas de monitoreo montados en aviones han demostrado que la principal forma reactiva del nitrógeno encontrada en la atmósfera alta y media es el PAN ; de las reacciones de equilibrio (  $k_3, k_{-3}$  ) se observa que las masas de aire frío provenientes de la troposfera alta liberarán dióxido nitroso debido que el equilibrio se desplaza rápidamente hacia la formación de reactivos ,por lo que en la troposfera alta el PAN transporta el dióxido de nitrógeno a altitudes y latitudes mas bajas donde existen temperaturas templadas . El ciclo de vida de los óxidos de nitrógeno así como su distribución son función del ciclo estacional .

Una serie de experimentos ~~en~~ demuestran que el PAN es insoluble en soluciones acidas por lo que la depositación superficial sobre el oceano y lagos es practicamente nulo .

Sobre la tierra se tiene una velocidad de depositación de .25 cm/s ( 22 ) , la mayor pérdida de PAN se realiza durante la noche cuando se efectua la depositación en la capa límite entre la atmósfera y la corteza terrestre .

De esta forma los productos del esmog fotoquímico pueden viajar hasta 10,000 km en la troposfera alta y la variación en concentraciones en la atmósfera baja se debe a las condiciones climatológicas de la región donde esta masa contaminante se encuentra localizada .

Además de provocar procesos de transferencia de momentum y calor, estudios metereologicos ~~en~~ demuestran que existe un transporte

vertical de los elementos que componen la atmósfera en su totalidad y que la fuerza de transporte es el peso molecular de cada elemento así como la temperatura del mismo .

También se determinó que este transporte tenía un límite y que éste variaba en función de las estaciones del año .

Así mismo la forma en la que se distribuían las especies contaminantes cambiaba a una altura de 100 km siendo la difusión molecular mas importante que la difusión de Eddy. (40)

La diferencia de temperaturas entre las capas de la atmósfera se pueden explicar en función de la teoría cinética de los gases la cuál establece que una partícula que se mueve a una velocidad igual a la velocidad molecular media, tiene una temperatura específica que puede ser determinada en función de la presión del gas , el volumen que ocupa y el número de partículas que se encuentran presentes.

Un numero grande de partículas produce un gran número de colisiones , por lo que el reparto de la energía molecular es homogéneo y se puede hablar de una temperatura única (39 , 40 ) .

La frecuencia de colisiones determina la transferencia de energía molecular y por lo tanto también afecta el curso de las reacciones que se llevan a cabo en la misma, hasta que alcanza un nivel crítico en el que se llega a un equilibrio cinético y químico .

A alturas superiores a 120 km la frecuencia de colisiones disminuye, ya que las partículas hallan un espacio libre, debido a la baja interacción del campo magnético y gravitacional terrestre .

Esto sugiere que a estas alturas la velocidad de las partículas



estará directamente relacionada con su peso molecular, así una molécula de hidrógeno tendrá el doble de velocidad que una de helio siendo más sencillo que estas puedan escapar de los efectos gravitacionales de la Tierra .

Por todo lo anterior , para predecir el comportamiento de la atmósfera y sus componentes es necesario "crear" un modelo que represente todas o la mayoría de los fenómenos que se realizan en ella .

El hecho de que se pueda representar el comportamiento global de la contaminación fotoquímica a través del comportamiento químico de los óxidos de nitrógeno, será aprovechado por este trabajo que está dirigido a estudiar este comportamiento y a aplicar un modelo estadístico complementado con el esquema cinético para predecir las concentraciones de cada compuesto a determinadas distancias de el punto de emisión y en una dirección preestablecida .

## CAPITULO IV

### EL MODELO DE DISTRIBUCION DE CONTAMINANTES

Los modelos para predecir la distribución de contaminantes se pueden clasificar como ( 4 ) :

1 ) Determinísticos

2 ) Estadísticos o estocásticos

Los modelos determinísticos son aquellos cuyas variables o parámetros tienen uno y sólo un valor asociado para cualquier conjunto de condiciones determinadas .

Los modelos estocásticos son aquellos que introducen el elemento de incertidumbre , es decir , los parámetros utilizados para describir las relaciones de producción - alimentación y la estructura de sus elementos , no se conocen de una manera precisa .

Por lo que se le atribuye a cada parámetro una función estadística que representa la probabilidad de que el evento ocurra ó que el valor del parámetro coincida con el designado y que éste se mantenga constante a lo largo del tiempo de análisis . Los modelos que se usan para describir el transporte , la difusión y las reacciones químicas del material depositado en la atmósfera se pueden agrupar en dos grandes categorías : los modelos Eulerianos y los modelos Lagrangianos .

#### 4.1 MODELOS EULERIANOS :

Se basan en el principio de continuidad de los fluidos incompresibles y tiene la siguiente forma :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U_i \frac{\partial C}{\partial x_i} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x_i \partial x_j} + S \quad (4.1)$$

donde

C es la concentración del material en un punto fijo en el espacio en función de  $U_i$  que es la velocidad del fluido .

D es la difusividad molecular del material depositado en el fluido .

S es una función que describe las fuentes de emisión y depositación del material .

La ecuación obtenida através de un modelo basado en el esquema Euleriano es una ecuación tensorial , cuya solución es compleja, ya que se utilizan esquemas de cerradura analítica para atacar el problema matemático que representa este tipo de modelos .

Los esquemas de cerradura analítica son aproximaciones estrictamente matemáticas que no se basan en modelos físicos .Por lo que en su solución aparecen funciones de autocorrelación Euleriana para las fluctuaciones de la velocidad que se suponen conocidas .

Los modelos de difusión Euleriana, permiten calcular los promedios

de la concentración en términos de los promedios de la velocidad medida en puntos fijos del fluido . Es por lo tanto un modelo determinístico .

#### 4.2 MODELOS LAGRANGIANOS

Utilizan los esquemas de cerradura fenomenológica, los cuales se basan en modelos físicos de procesos de difusión turbulenta .

El modelo lagrangiano más utilizado se basa en la hipótesis de la longitud de mezclado propuesta por Prandtl (11) .

En general la ecuación lagrangiana de difusión no puede resolverse de manera analítica y es necesario utilizar técnicas numéricas de integración para obtener soluciones aproximadas .

Lamb ( 1972 ) (12) demostró, que la ecuación de difusión turbulenta de Prandtl es aplicable cuando las variaciones temporales y espaciales en la distribución de la concentración son mucho mayores que las escalas de tiempo lagrangianas y de longitud de turbulencia, estableciendo las siguientes restricciones para el uso de estos modelos :

- 1) Determinar las condiciones iniciales y finales (a la frontera ) de la distribución de concentraciones
- 2) Conocer la dirección e intensidad de los vientos para

determinar la velocidad media de los mismos y además la magnitud de la componente horizontal de el viento a una altura de  $x$  metros y el perfil de velocidades a diferentes alturas sobre el nivel de la Tierra las que son función de la altura de las construcciones y relieves geográficos característicos de la región de estudio.

#### 4.3 FENOMENOS ASOCIADOS CON LA DISTRIBUCION DE CONTAMINANTES

##### DIFUSION

Se le denomina difusión al transporte molecular de materia que se lleva a cabo utilizando, como fuerza motriz, la diferencia de concentraciones que existe en un medio determinado hasta alcanzar el equilibrio termodinámico, por lo que se puede decir, que existe una difusión térmica y una difusión de momentum que fueron de los primeros fenómenos de transporte estudiados, y para los cuales se tienen ecuaciones representativas, que son construidas bajo la suposición de continuidad espacial ( 10 , 15 , 16 ).

La difusión térmica se analiza mediante la ley de conducción de calor de Fourier, la cual relaciona el flujo de calor con una diferencia de temperaturas.

La transferencia de momentum se estudia através de la ley de Newton y relaciona el flujo de momentum con la diferencia de velocidades.

La difusión de masa de un componente a través de otro se denomina

difusión y se puede describir de manera similar a la transferencia de calor convectivo utilizando la primera ley de Fick  $\omega$ . Esta analogía establece que el flujo másico del componente  $i$  por unidad de área transversal perpendicular a la dirección del flujo es proporcional a la diferencia de concentración entre el punto inicial y final del gas, a través del cual se efectúa la transferencia de masa se puede expresar como :

$$J_i = -\rho D \frac{dw_i}{dz} \quad (4.2)$$

Donde

- $\rho$  = concentración masica
- $D$  = coeficiente de difusión
- $dw_i/dz$  = Fuerza impulsora o fracción masa

El signo negativo indica que el componente  $i$  se difunde en dirección al medio de menor concentración .

Los gases pueden ser tratados utilizando la teoría cinética de los gases que proporciona las herramientas para predecir el comportamiento de los coeficientes de difusión en mezclas gaseosas binarias ya que en los límites de bajas presiones y altas temperaturas se cumplen los siguientes supuestos :

Las moléculas están lo suficientemente separadas unas de otras por lo que no hay interacciones intramoleculares , magnéticas ó eléctricas , sufren choques perfectamente elásticos y prácticamente

no hay pérdida de energía .

Por lo general en todo proceso se presentan estos tres tipos de difusión :

Transferencia de masa.

Transferencia de calor.

Transferencia de momento.

Existe una interdependencia entre estos tres fenómenos de transporte por lo que para llevar a cabo el estudio del sistema se considerará el caso límite en el cual el mecanismo que describe de una manera determinante el comportamiento global del sistema es la transferencia de momentum .

La difusión puede ser definida como un fenómeno básicamente irreversible en el cual la materia , grupo de partículas, población etcetera, se esparcen através de un espacio libre de acuerdo a su movimiento aleatorio . El término irreversible debe ser interpretado en el sentido estadístico; esto no implica que una serie de partículas que han sido esparcidas no puedan adoptar su configuración original, sino que la velocidad de movimiento aleatorio aumenta conforme se incrementa el número de partículas que se hallan en movimiento. Por lo que la probabilidad de regresar al estado original disminuye y en el límite la difusión se vuelve estrictamente irreversible . Así por ejemplo siempre que una partícula pueda regresar instantáneamente a su posición original en

un tiempo dado a una distancia promedio, la raíz cuadrada de la desviación estándar, con respecto al valor central se incrementa con el tiempo ( 17 ).

#### 4.4 CALCULO DE LOS COEFICIENTES DE DIFUSIÓN PARA GASES

Los coeficientes de difusión para un gas ideal se pueden calcular usando la aproximación de Sherwood y colaboradores ( 1975 ). Utilizando la teoría cinética de los gases se supone que el coeficiente de difusión es directamente proporcional a la velocidad media (  $\bar{U}$  ) de las partículas y a la trayectoria libre media de la partículas (  $\lambda$  ), como se muestra en la ecuación

$$D \propto \bar{U} \lambda \quad ( 4.3 )$$

La trayectoria libre media  $\lambda$  es inversamente proporcional tanto al área de la sección transversal promedio como a la densidad másica, (n) de todas las moléculas de un volumen determinado ya que la densidad másica de un gas ideal varía directamente con la presión e inversamente con la temperatura como se muestra en la ecuación siguiente :

$$\lambda \propto 1/nA \propto T/PA \quad ( 4.4 )$$

La velocidad molecular media se relaciona con la temperatura y el



peso molecular de la molécula mediante la expresión 4.5 :

$$\bar{U} \propto (T/M)^{1/2} \quad (4.5)$$

donde

$\bar{U}$  es la velocidad molecular media

M es el peso molecular .

T es la temperatura

Así para un sistema binario se puede combinar las ecuaciones 4.3 , 4.4 y 4.5 y ampliar para obtener 4.6:

$$D_{AB} \propto [ ( T / M_A ) + ( T / M_B ) ]^{1/2} [ T / P_A ] \quad (4.6)$$

Rearreglando y simplificando se obtiene la siguiente ecuación :

$$D_{AB} = [ ( 1 / M_A ) + ( 1 / M_B ) ]^{1/2} [ T^{3/2} K / P_A ] \quad (4.7)$$

Donde

A es el área promedio de la sección transversal de ambos componentes de la mezcla .

K es una constante de proporcionalidad

#### 4.5 CONSTRUCCION DEL MODELO DE DISPERSION

La construcción de todo modelo se inicia através de el análisis de los requerimientos y comportamiento de la materia y energía que

interactúan dentro de los límites que establecen las fronteras del sistema ( 4 .13 ).

La base para el inicio de este análisis son el balance de materia y el balance de energía que definen física y termodinámicamente al sistema .

Asociado a estos, se realiza el estudio del comportamiento cinético, que describe la dependencia del balance de masa y energía con el parámetro tiempo que no se incluye de manera explícita con la naturaleza química de los elementos reaccionantes

#### 4.6 BALANCE DE MASA

Los balances de materia constituyen una aplicación de la ley de conservación de masa, excepto para el caso de conversión de masa en energía y viceversa ,

Considerando un sistema con mezclado completo se tiene que durante un período de tiempo y espacio determinado se puede representar de manera general por :

$$\left[ \begin{array}{l} \text{Entrada de masa} \\ \text{al sistema en el} \\ \text{período de tiempo} \\ \Delta t \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{l} \text{Salida de masa} \\ \text{al sistema en el} \\ \text{período de tiempo} \\ \Delta t \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{l} \text{Velocidad de} \\ \text{desaparición} \\ \text{del reactante A} \\ \text{en el reactor} \\ \text{debido a la} \\ \text{reacción Química} \end{array} \right] +$$

+ [ acumulación ]

Para cada especie reaccionante se tiene una ecuación de balance de materia. Una de ellas se define através del balance global de masa por lo que se tienen para  $c$  componentes  $c-1$  ecuaciones que representan el balance de masa por componente. Desde un punto de vista estrictamente matemático la solución matricial del sistema de ecuaciones diferenciales debe de acotar el valor resultante ya que se trata de materia, por lo que al sistema original se le asocia una matriz de restricciones que represente las condiciones de no negatividad (esta restricción toma el lugar de una función objetivo en los planteamientos de programación lineal) de la forma:

$$\begin{aligned}
 C_{11} & \geq 0 \\
 C_{22} & \geq 0 \\
 C_{33} & \geq 0 \\
 & \geq 0 \\
 & \geq 0 \\
 C_{nn} & \geq 0
 \end{aligned}$$

A su vez se utiliza la restricción del balance de materia global de la forma:

$$C_{11} + C_{22} + C_{33} + \dots + C_{nn} = C_{Nt} \quad (4.6)$$

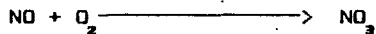
dónde  $C_{Nt}$  es la especie precursora de los demás compuestos. En el presente trabajo las especies que se modelan son los óxidos de nitrógeno cuya especie precursora es el óxido nítrico (NO) por lo que las concentraciones de los productos de reacción están dadas en equivalentes de NO.

Como los contaminantes se hallan en la atmósfera en pequeñas proporciones las unidades de concentración mas adecuadas para su cuantificación son las partes por millón ( ppm ) .

Para normalizar el sistema se utiliza la relación de pesos moleculares :

$$1\text{ppm NO produce } \frac{62 \text{ mg NO}_3/1}{30 \text{ mg NO/1}} = 2.07 \text{ ppm de NO}_3$$

Como un mol de NO tiene una concentración de 30 ppm cuando se difunde de manera homogénea en un volumen de  $1 \text{ m}^3$ , si la velocidad de formación de  $\text{NO}_3$  es muy alta y la reacción :



tiene una conversión de prácticamente el 100 % existiendo una concentración de 62 ppm de  $\text{NO}_3$  .

La densidad de los contaminantes se calcula en función de la temperatura y con una base de un mol, usando la ley de los gases ideales :

$$PV = nRT \quad ( 4.7 )$$

Considerando las condiciones de la ciudad de México :

$$P = 585 \text{ mm Hg}$$

$$V = 29.1 \text{ l}$$

$$n = 1 \text{ mol}$$

$$R = 0.0825 \text{ Atm l } / ^\circ\text{K mol}$$

$$\rho = \frac{P \text{ (pm)}}{RT}$$

$$\rho_{\text{NO}} = \frac{0.77 \text{ ATM (30 g/mol)}}{0.0825 \frac{\text{ATM l}}{^\circ\text{K mol}} (298^\circ\text{K})} = 0.939 \text{ g/l}$$

Con base en este procedimiento se genera la tabla 4.1 en el cuál se muestran los datos que permiten normalizar el balance de materia

COMPUESTO	ESTADO DE AGREGACION	PM g/mol	DENSIDAD ( 25°C )	EQUIVALENTES DE NO
NO	gaseoso	30	0.939	1.000
NO <sub>2</sub>	gaseoso	46	1.440	1.533
HNO <sub>3</sub>	gaseoso	63	1.502	2.100
NO <sub>3</sub>	sólido	62	--	2.070
PAN	gaseoso	121	3.788	4.033

Tabla 4.1 Propiedades físicas de los óxidos de nitrógeno que forman parte del aire-ambiente de la atmósfera urbana

Por lo tanto el balance de materia global se representa mediante la siguiente ecuación :

$$[\text{NO}]_T = [\text{NO}]_L + \frac{1}{1.533}[\text{NO}_2] + \frac{1}{2.100}[\text{HNO}_3] + \frac{1}{2.070}[\text{NO}_3] + \frac{1}{4.033}[\text{PAN}]$$

( 4.8

La cinética de reacción modifica este balance al incluir el parámetro del tiempo. Como los balances de materia y energía están acoplados describen el sistema de una manera dinámica.

La formulación de este modelo se realiza a través del estudio y descripción diferencial de una parcela de aire. Para evitar la resolución numérica de la función de difusión se utiliza un sistema de coordenadas alineadas al vector de movimiento del fluido. Esto permite incluir simultáneamente la dispersión y el cambio químico. La figura 4.1 ilustra de manera esquemática los componentes que son más importantes para el análisis y formulación del modelo.

Una vez emitidos, los gases contaminantes tienen una temperatura superior a la del aire ambiente, por lo que el mezclado es instantáneo, hasta alcanzar la temperatura de equilibrio; por lo que la concentración inicial depende de la masa emitida y de un volumen equivalente :

$$C_{0i} = m_i / \text{vol}_{eq}$$

donde Vol. eq. = función de la velocidad del viento, temperatura de emisión temperatura de equilibrio densidad de la masa contaminante .

Estableciendo un límite arbitrario al sistema e iniciando con un volumen teórico, calculado considerando el equilibrio térmico , y haciendo coincidir la línea de movimiento de la masa contaminante con el eje X como se muestra en la figura 4.2 se puede determinar la cantidad de contaminantes que sale de una rejilla y entra a la siguiente siendo el valor final de concentraciones de la rejilla n-1 el valor inicial de concentración de la rejilla n y así sucesivamente hasta llegar a la rejilla final ( 41 , 42 ).

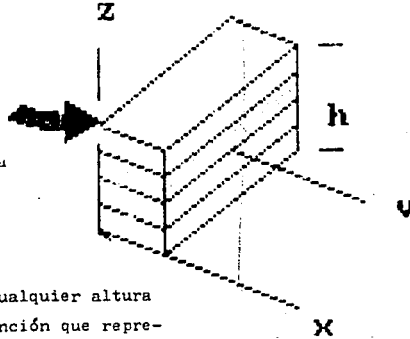


El mezclado es dependiente del tiempo, al igual que la velocidad de reacción; los que son calculados para un elemento diferencial de la atmósfera



Radiaciones solares como una función del tiempo

Lineas espacio-tiempo, através de la fuente, hacia la rejilla de análisis; Esta se especifica através de la velocidad del viento



Los flujos de contaminantes a cualquier altura son calculados através de la función que representa a la fuente de emisión.

Figura 4.1.- Elementos considerados en el análisis diferencial del sistema

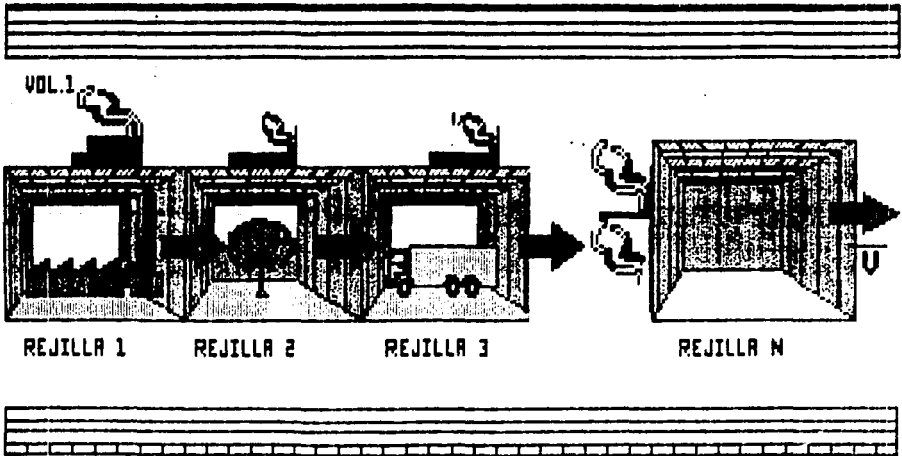


Figura 4.2.-Modelo híbrido de trayectorias y rejillas.

## BALANCE DE ENERGIA

La primera ley de la termodinámica establece que la energía del universo es constante ( 20 ).

$$\left[ \begin{array}{l} \text{Flujo de} \\ \text{entrada de} \\ \text{energía} \\ \text{calorífica} \\ \text{al elemento} \\ \text{de volúmen} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{l} \text{Flujo de} \\ \text{salida de} \\ \text{energía} \\ \text{calorífica} \\ \text{del elemento} \\ \text{de volúmen} \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{l} \text{desaparición} \\ \text{de energía} \\ \text{debido a la} \\ \text{reacción química} \\ \text{en el elemento} \\ \text{de volúmen} \end{array} \right] +$$
$$+ \left[ \begin{array}{l} \text{acumulación} \\ \text{de energía} \\ \text{calorífica} \\ \text{en el elemento} \\ \text{de volúmen} \end{array} \right]$$

En el análisis de sistemas físicos y químicos es necesario considerar todas las formas de energía que entran y salen del sistema, considerando las equivalencias de energía correspondientes a la cantidad neta de calor absorbido por el sistema y el trabajo neto hecho sobre el sistema.

El balance de energía del sistema se realiza bajo el supuesto de que la parcela de aire analizada se halla en estado estacionario. Si el sistema se halla bajo un estado de inversión, se tiene un sistema estratificado y por lo tanto la transferencia de calor es pequeña ya que no existe turbulencia. Lo que produce una condición de estratificación térmica del fluido debido a la temperatura potencial  $\Theta$ , que es variable existiendo una serie de variaciones



de densidad que se deben a las fluctuaciones de temperatura y se pueden cuantificar a través de la ecuación de equilibrio hidrostático

( 4.1 , 4.2 )

$$E_p = -\rho g \delta_{ij} \quad ( 4.9 )$$

dónde :

$\rho$  = densidad másica

$g$  = Aceleración de la gravedad

$\delta_{ij}$  = delta de Kronecker

El balance de energía toma la forma diferencial, expresado como :

4.10 )

$$\partial/\partial t ( 1/2 \langle q^2 \rangle ) = -\partial/\partial x_j \langle u'_j [ ( p / \rho ) + ( 1 / 2 ) q^2 ] \rangle$$

$$+ \nu ( \partial / \partial x_j ) u'_i ( \partial u'_i / \partial x_j ) + \partial u_j / \partial x_i -$$

$$- \nu \langle ( \partial u'_i / \partial x_j ) [ ( \partial u'_i / \partial x_j ) + ( \partial u_j / \partial x_i ) ] \rangle$$

$$- \partial u'_i / \partial x_j \langle u'_i u'_j \rangle + g [ \langle u'_z \theta' \rangle / \bar{\theta} ]$$

De donde cada término corresponde a :

Trabajo realizado por la presión total :

$$-\partial/\partial x_j \langle u'_j [ ( p / \rho ) + ( 1 / 2 ) q^2 ] \rangle$$

Trabajo realizado por los esfuerzos viscosos :

$$\nu ( \partial / \partial x_j ) u'_i ( \partial u'_i / \partial x_j ) + \partial u_j / \partial x_i$$

## Disipación viscosa de la energía

$$\nu \left\langle \left( \frac{\partial u_i'}{\partial x_j} \right) \left[ \left( \frac{\partial u_i'}{\partial x_j} \right) + \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] \right\rangle$$

Transferencia de energía debida a la perturbación ( movimiento entre capas de aire ).

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left\langle u_i' u_j' \right\rangle$$

Energía asociada a las fluctuaciones de temperatura debido a la estratificación térmica

$$g \left[ \left\langle u_z' \theta' \right\rangle / \bar{\theta} \right]$$

Si la estratificación es estable ,  $g \left[ \left\langle u_z' \theta' \right\rangle / \bar{\theta} \right] < 0$  y la turbulencia se halla amortiguada ya que la capa mas fría se halla a la altura menor.

Si la estratificación es inestable como sucede en el punto de emisión  $x_0$  y cuando se inicia la dispersión  $g \left[ \left\langle u_z' \theta' \right\rangle / \bar{\theta} \right] > 0$  la turbulencia se amplifica .

En el caso extremo , cuando el flujo del viento solamente es horizontal y bidireccional  $\bar{u}$  varía sólo en el eje vertical  $z$  , por lo cuál la producción de energía por fuerzas de gravedad y empuje  $g \left[ \left\langle u_z' \theta' \right\rangle / \bar{\theta} \right]$  dividido entre el término que representa el corte del viento horizontal  $\left\langle u_1' u_2' \right\rangle d\bar{u} / dz$  es el número de Richardson

( Rf ) el cuál describe el comportamiento del flujo de las capas de aire ( 43 ).

$$Rf = g [ \langle u_z' \theta' \rangle / \bar{\theta} ] / [ \langle u_z' u_z' \rangle / \bar{u} ] / dz ] . \quad ( 4.11 )$$

El modelo propuesto debe de ser constituido por un vector estadístico que represente la probabilidad mas alta de localizar una partícula emitida desde un punto en función de un movimiento aleatorio .Por lo cuál se utilizará un modelo gaussiano y describir el comportamiento de una partícula en una caja para determinar la densidad de probabilidad de que la partícula se encuentre en un punto  $\vec{I}^*$  a un tiempo  $\tau$  o una densidad de posición a través de un vector auxiliar  $p$  que dependa del tamaño del incremento del tiempo (  $\tau - \tau_0$  ). La probabilidad de que la partícula se encuentre en la posición  $\vec{I}^*$  en el tiempo  $\tau$  es :

$$p ( \vec{I}^*, \tau \mid \vec{I}_0^*, \tau_0 ) = p ( \vec{I}_0^* - \vec{I}^*, \tau - \tau_0 ) \quad ( 4.12 )$$

Batcelor ( 1949 ) y Lamb ( 1973 ) demostraron teóricamente que la concentración es una función de la posición y del tiempo así como de la continuidad de la emisión

$$\langle C ( \vec{I}^*, \tau ) \rangle = \iint_{\tau_0}^{\tau} p ( \vec{I}^*, \tau \mid \vec{I}^*, \tau' ) S ( \vec{I}^*, \tau' ) d\vec{I}^* d\tau' \quad ( 4.13 )$$

donde  $S ( \vec{I}^*, \tau' )$  es la función de intensidad de emisión de la fuente . Para representar una fuente puntual continua ( chimenea )

la función utilizada es :

$$S(\vec{I}, \tau) = S_p(\tau) \delta(\vec{I}_0 - \vec{I}) \quad (4.14)$$

Donde

$\vec{I}_0$  es la localización de la fuente

$S_p$  es la masa del contaminante emitida por unidad de tiempo

La masa de contaminantes se determina a partir de la velocidad de escape y la concentración inicial de el contaminante y el diámetro de la chimenea se obtiene la siguiente ecuación :

$$S_p(\tau) = (\pi d^2/4) C_0(\tau) V(\tau) \quad (4.15)$$

Por consiguiente reordenando se obtiene la ecuación :

(4.16)

$$S(\vec{I}, \tau) = (\pi d^2/4) C_0(\tau) V(\tau) \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - H)$$

Donde :

Velocidad de escape

= V

altura de equilibrio termodinámico

= H =  $\Delta H + h_b$

conocido como la altura efectiva de la chimenea

El modelo anterior puede complementarse incluyendo las emisiones provenientes de fuentes lineales , por ejemplo una avenida con tránsito intenso la ecuación toma la forma de :

$$S(\vec{I}, \tau) = S_l(x, y, \tau) \delta(y - s(x)) \delta(z - H) \quad (4.17)$$

donde :

$s(x)$  es la línea que está en el plano  $z = H$

Si  $(x, y, z)$  es la masa de contaminante emitida por unidad de longitud por unidad de tiempo, desde el punto  $(x, y, H)$  en el tiempo  $t$ .

Esta función está dada para una unidad de longitud, por lo cual, la contribución de las demás fuente emisoras, pueden ser sumadas de manera vectorial tomando en cuenta la distribución de vientos y disminuyendo el tamaño del intervalo de análisis para que la aproximación del modelo de la pluma gaussiana describa de manera mas detallada el proceso (12,44).

Complementando el modelo con una función de probabilidad de posición generada através de la función de densidad de probabilidad de que la partícula emitida en un punto  $(r_0, t_0)$  esté en el punto  $(r, t)$  se calcula utilizando la termodinámica estadística através de una función de partición que se puede dividir en dos partes, una que depende de la naturaleza química del compuesto y que se estudia por la cinética de la reacción, através de la expresión diferencial:

$$\frac{dc}{dt} = -k \int (T) * c^n \quad (4.18)$$

y por un radio vector que es determinado por la intensidad y dirección del viento, si se denomina a la parte cinética como  $\psi$  se puede expresar la probabilidad de decaimiento de una partícula con la función:

$$P(r, t | r_0, t_0) = \psi(t - t_0) p^2(r, t | r_0, t_0) \quad (4.19)$$

La probabilidad de que una partícula no decaiga durante un tiempo de viaje  $t - t_0$  está dada por :

$$\psi ( t - t_0 ) = \exp ( - \int k dt ) \quad ( 4.20 )$$

La difusión se determina de manera empírica a través de los parámetros o coeficientes de dispersión  $\alpha_x, \alpha_y$  y  $\alpha_z$  los cuales dependen exclusivamente del tiempo de viaje y de las condiciones del patrón de flujo observado en la región ( 45 , 46 ). Desde el punto de vista matemático representan la componente diagonal del tensor de probabilidad ya que la difusión de una partícula se puede aproximar a través de el modelo del caminante aleatorio .

Tomando en cuenta que la tierra es parcialmente adsorbente de los contaminantes y que existe una capa de inversión se debe utilizar una función de distribución de probabilidad dada por la ecuación diferencial:

$$\partial p_z / \partial \tau = k(\tau) \cdot \partial^2 p_z / \partial z^2 \quad ( 4.21 )$$

Donde

$\partial p_z / \partial \tau =$  cambio de presión parcial del componente debida a la adsorción

La ecuación 4.14 debe considerar como condiciones a la frontera la capa de inversión y la presencia de la tierra, como un elemento parcialmente adsorbente y reflector , resolviendo la función bajo ésta condición , se obtiene la ecuación :

$$P_z(z, z_0, \tau) = \sum \frac{2(\lambda^2 + \beta^2) \cos(\lambda(h-z_0)) \cos(\lambda(h-z))}{h(\lambda^2 + \beta^2) + \beta} \exp(-\lambda^2 \sigma_z^2)$$

donde :

$\beta$  es el coeficiente del polinomio trascendental :

$$\lambda \tan(\lambda h) = \beta \quad ( 4.23$$

A continuación se construye la función de distribución de concentración para los contaminantes .Para ello se considera una fuente de emisión puntual, como lo es una chimenea de cualquier proceso de generación de potencia, mediante la combustión de compuestos orgánicos .

a )La función de emisiones esta dada por :

$$S(r, t) = Q \delta(r - r_0) \quad ( 4.24$$

donde  $Q$  es la masa de contaminante emitida por unidad de tiempo .

b )El viento medio es constante y uniforme por lo que  $\bar{U} = (\bar{u}, 0, 0)$

c )La difusión turbulenta en la dirección de el transporte es aproximada por la difusión de cada uno de los contaminantes en el aire considerando que no influye la presencia de otro contaminante.

d) El estado estacionario se alcanza mientras las condiciones metereológicas se mantengan estables .

e) Por simplicidad se elige el sistema de referencia cuyo eje  $x$  coincida con la dirección del viento medio .El origen de este sistema estará en el suelo bajo el punto de emisión .

Este conjunto de suposiciones permite expresar la concentración de manera analítica como :

$$C(r,t) = \int \int_0^t p(r,t|r_0,t_0) S(r,t) dt dr \quad (4.25)$$

sustituyendo cada función se obtiene la ecuación explícita :

$$C(r,t) = \int \int_0^t \left\{ \frac{2(\lambda^2 + \beta^2) \cos(\lambda(h-z_0)) \cos(\lambda(h-z))}{h(\lambda^2 + \beta^2) + \beta} \exp(-\lambda^2 \sigma_z^2) - k C_0 \right. \\ \left. \delta(r - r_0) \right\} dt dr \quad (4.26)$$

Los valores del coeficiente de dispersión vertical serán calculados mediante la expresión :

$$\sigma_z = B x^b \quad (4.27)$$

donde B y b serán determinados para el tipo de patrón de flujo de los vientos dominantes .

La rapidez del viento promedio, deberá ser el promedio en el eje vertical de la pluma gaussiana . La concentración media relativa al nivel del suelo en un sector de ángulo de  $1/8$  de  $\pi$  alrededor de  $\Theta$  .

Si  $\sigma_z$  ,  $\bar{u}$  y  $\Theta$  permanecieran constantes el contaminante se distribuiría de manera total en el sector representado por  $\Theta$  pero como se ha seccionado el sistema hay que tomar cada una de las contribuciones por separado de tal manera, que la combinación de todas las contribuciones den como resultado la distribución total de los contaminantes.



El plano horizontal se divide en 16 sectores cada uno de  $1/8$  de  $\pi$  los cuales, representan las 16 posibles direcciones de el viento. La difusión turbulenta se aproxima a cero, ya que la emisión es continua y porque el tiempo de emisión es mayor que el tiempo de viaje  $\tau$ , desde la fuente hasta la localidad en estudio, lo que se puede demostrar utilizando transformadas de Fourier (4.28) que:

$$\lim_{\sigma_x \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{2\pi\sigma_x} \exp\left[-\frac{(x-x_0-\Delta x)^2}{2\sigma_x^2}\right] \right\} = \delta(x-x_0) \quad (4.28)$$

A su vez realizando un cambio de variable  $\xi = \bar{u}\tau$

(4.29)

$$C(r,t) = \int_0^{\bar{u}\tau} \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \left\{ \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \exp\left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{2(\lambda^2 + \beta^2) \cos(\lambda(h-z_0)) \cos(\lambda(h-z))}{h(\lambda^2 + \beta^2) + \beta} k\right] \right\} \delta(x-\xi) d\xi$$

donde  $\sigma_y$  y  $\sigma_z$  son funciones de  $x/\bar{u}$ .

Tomando el límite cuando el tiempo (t) tiende a infinito se puede utilizar la siguiente propiedad:

$$\int_a^b f(x) \delta(x-x_0) dx = f(x_0) \quad \text{si} \quad a < x_0 < b \quad (4.30)$$

Y se obtiene ecuación para el cálculo de la concentración media para el

estado estacionario

( 4.31

$$C(r) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \left\{ \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \exp\left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[\frac{2(\lambda^2 + \beta^2) \cos(\lambda(h-z_0)) \cos(\lambda(h-z))}{h(\lambda^2 + \beta^2) + \beta} - k(\tau)\right] \right\}$$

Esta ecuación relaciona directamente la cinética química, con los fenómenos de transporte de masa. Esta peculiaridad del modelo demanda la descripción paso a paso de la evolución química de los compuestos contaminantes y a la vez refleja los efectos acumulativos de los procesos de difusión y su dependencia con el tiempo y las condiciones meteorológicas.

Este tipo de esquemas de análisis demuestran la aplicación de modelos que combinan las características de los modelos estadísticos y estocásticos, con el análisis diferencial lo que permite obtener mediante diversas técnicas de integración (analítica, matricial, numérica) el perfil de concentraciones de los compuestos contaminantes.

El modelo puede ser complementado a través de ecuaciones integro-diferenciales que aportarían mayor información.

Esta mejora es justificable en la medida que se obtenga información más detallada en la generación de un banco de datos para el uso de el modelo.

## CAPITULO V

### APLICACION

El modelo matemático empleado en el estudio del comportamiento del perfil de las concentraciones de los óxidos de Nitrógeno se genera con los elementos descritos en los capítulos III y IV que complementan a la ecuación 5.1 .

Esta considera la resolución de la ecuación de difusión para cada una de las especies. Además de la caracterización del comportamiento químico que se realiza através del término R .

$$\frac{\partial \langle C_i \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{U} \langle C_i \rangle) = \nabla \cdot (k \nabla \langle C_i \rangle) + R_i \quad (5.1)$$

En donde :

$\bar{U}$  = Velocidad promedio del viento .

k = Tensor difusividad de Eddy

$\langle C_i \rangle$  = Tensor concentracion de la especie i

La ecuación 4.30 obtenida en capítulo anterior incorpora además de estos elementos, una componente que depende de la difusión vertical y el cálculo de las concentraciones aproximadas mediante un polinomio de interpolación. Esta suposición es válida debido a la continuidad espacio tiempo dentro de este análisis .

$$C_n = \sigma_{xy} [\sigma_{xz} (2\Delta t)] C_{n-1} \quad (5.2)$$

donde :

$\alpha_x$  y  $\alpha_y$  = Aproximaciones numéricas a los operadores de transporte horizontal .

$\alpha_z$  = Aproximación numérica al operador de transporte vertical

$n$  = Paso de iteración o número de rejilla

$\Delta t$  = Incremento de tiempo

Se utilizará una fuente de emisión puntual como lo es una chimenea ubicada en la refinería de Azcapotzalco .

En el presente trabajo se incorporan los avances obtenidos en la investigación de velocidades de reacción de sistemas químicos y fotoquímicos que involucran a especies nitrogenadas (  $\text{NO}$  ,  $\text{NO}_2$  ,  $\text{NO}_x$  )

.. Por lo que es posible la descripción de los procesos que alteran la concentración total de los óxidos de nitrógeno .

La región modelada es la cuenca del valle de México y está comprendida entre el límite natural impuesto por la cordillera del Ajusco al sureste y por el límite político establecido con el estado de México .

El área aproximada de toda la cuenca es de  $360 \text{ km}^2$ . Se consideran quince segmentos de áreas de igual dimensión,  $5 \times 5 \text{ km}$ , dividiéndose de la siguiente manera, 3 rejillas para la zona central, 3 rejillas para la zona noroeste, 3 rejillas para la zona noreste, 3 para la zona sureste y 3 para la zona suroeste .

## 5.2 CAMPOS METEREOLÓGICOS

Los campos metereológicos se determinan mediante la interpolación de datos individuales reportados por la estación metereologica del aeropuerto internacional de la ciudad de México Así como la caracterización de cada uno de los días modelados através de los datos obtenidos através de los reportes diarios de la Secretaría de Desarrollo Urbano y Ecología ( SEDUE ). ( 40 )

Los datos se obtienen através de la red de monitoreo automático (RAMSA) de dicha secretaria la localización de las estaciones de monitoreo se muestran en el mapa 1a en el apéndice II.

Estos datos permiten establecer un modelo estadístico de trayectorias mediante el análisis del comportamiento de la masa de contaminantes y la velocidad del viento .

Las características geológicas se aproximan con el cálculo de la relación de adsorción / reflexión del concreto que es un material de construcción común en la ciudad de México.

La distribución urbana como se muestra en el mapa 2a sugiere realizar esta aproximación

El programa generado para el modelo propuesto en este trabajo ( apéndice I ) permite calcular con los datos correspondientes a cualquier estación del año , el perfil de concentraciones de los contaminantes  $NO$  ,  $NO_2$  ,  $HNO_3$  ,  $HNO_2$  ,  $HNO_4$  ,  $NO_3^-$  , PAN .

Si se varían las condiciones de humedad, se puede aplicar a un día lluvioso y variando la tasa de insolación, se aplica a un día caluroso .

Los datos reportados por SEDUE obtenidos através de RAMSA y que se utilizan en este

trabajo pertenecen a la estación invernal en el D.F. Se selecciona esta ya que en este período se observan con mayor frecuencia los fenómenos de inversión térmica. Esta información se presenta en el apéndice II así como el cálculo de la altura de inversión y los coeficiente de adsorción - reflexión .

Los días modelados son el 1°, 15 y 31 de Diciembre del año de 1989 por ser días típicos en los que las condiciones de inversión se presentaron con mayor continuidad .

En esta simulación se varía el parámetro temperatura y se pretende mostrar el efecto sobre el perfil de distribución de los óxidos de Nitrógeno, generados por una fuente fija de alto potencial contaminante, como lo es una planta refinadora de petróleo de mediano tamaño y que según estudios ( 23 , 40 ) realizados emite un promedio de 1000 tons. de contaminantes por año de los cuales el 33 % son  $\text{NO}_x$  el 36.6 % son  $\text{CO}_x$  y el 29.9 % son  $\text{SO}_x$  lo que nos da como resultado un gasto másico de 37.6 kg /h de  $\text{NO}_x$  , 42 kg/h de  $\text{CO}_x$  y de 34.13 kg/h de  $\text{SO}_x$  sumando un gasto másico promedio igual a 113.73 kg/h de contaminantes gaseosos emitidos a la atmósfera .

La ubicación de la fuente contaminante sera en el noroeste de la Ciudad de México y las rejillas están alineadas con el vector velocidad del viento con un area de  $1 \text{ km}^2$  y una altura igual a la altura de emisión ( 40 m ). Se consideran las siguientes condiciones:

a) El viento medio es constante y uniforme por lo que dos de sus componentes vectoriales son iguales a cero  $\bar{U} = (\bar{u}, 0, 0)$

b) La difusión turbulenta en la dirección del transporte es calculada por la difusión de cada uno de los contaminantes de interés en el aire considerando que no influye la presencia de otros contaminantes.

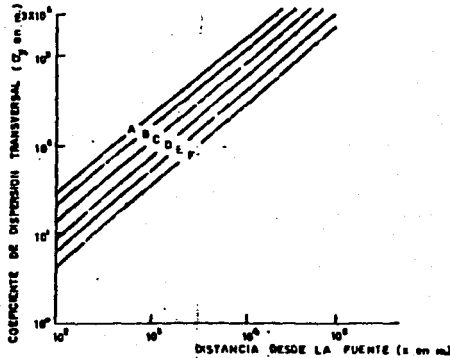
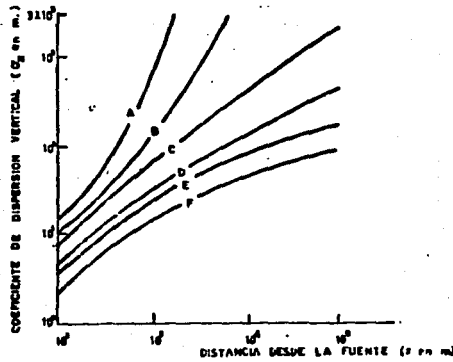
c) El estado estacionario se alcanza mientras las condiciones meteorológicas se mantengan estables .

d) El sistema elegido es un sistema de referencia cuyo eje x coincida con la dirección promedio del viento .El origen de este sistema estará en el suelo bajo el punto de emisión .

El coeficiente de dispersión vertical  $\sigma_z$  se puede estimar en función de la distancia a la fuente x y de la clase de estabilidad presente . El coeficiente de dispersión se aproxima através de las curvas de Pasquill Gifford, que se muestran en las figuras 5.1 y 5.2; estas deben ser pues son determinadas de manera experimental en sitios cuya topografía es plana; la modificación considera la función de difusión turbulenta y los datos promedio de SEDUE sobre la distribución de contaminantes .

El manejo de la función de difusión turbulenta se justifica debido a que la topografía de la zona urbana provoca una serie de

corrientes de aire debidas a el movimiento de rotación de la Tierra .como se muestra en la figura 5.3.



Figuras 5.1 y 5.2 Curvas de Pasquill-Gifford que relacionan los coeficientes de dispersión transversal y vertical en función de la distancia



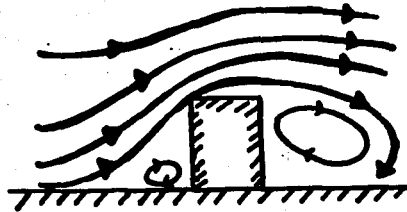


Fig.5.3 Variación de la dirección del viento debido a la topografía urbana

Tomando como base el experimento de Reynolds (44) para determinar el patrón de flujo de un fluido en tubos cilindricos se determinará la velocidad límite del aire que caracteriza el paso de un régimen laminar a un régimen de flujo turbulento .

Definición del número de Reynolds :

$$Re = \frac{d v \rho}{\mu}$$

$v$  = Velocidad del fluido

$\mu$  = Viscosidad dinámica ( centipoises )

$\rho$  = Densidad

$$v = \frac{Re \mu}{\rho z}$$

para que el flujo presente características turbulentas , debe cumplirse la siguiente condición

$$Re \geq 2100$$

Confinando al fluido de manera que lo haría un tubo y si se sustituye el valor del número de Reynolds para un flujo turbulento y

tomando el valor promedio de  $\mu/\rho$  a  $20^{\circ}\text{C}$  de  $0.15 \text{ cm}^2/\text{s}$  para una altura de 1 m se tiene que la velocidad mínima para tener un régimen de flujo turbulento es

$$v_{crit} = 3.15 \text{ cm/s}$$

Por ésta razón y comparando con las estadísticas de velocidad del viento proporcionadas por SEDUE se concluye que se tiene una atmósfera con flujo turbulento constante .

Los perfiles característicos de las diferentes zonas se muestran en la figura 5.4

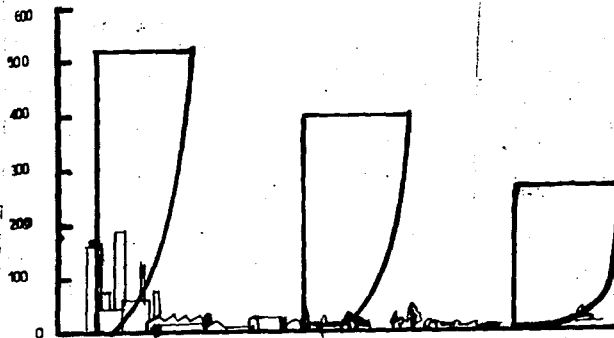


Fig. 5.4 Perfiles de viento observados en distintas zonas ;observe el efecto que causa los obstáculos sobre éstos perfiles

Las reacciones consideradas para el estudio del comportamiento de los  $\text{NO}_x$  , se analizan mediante un tratamiento matemático similar al efectuado sobre el PAN mostrado en el capítulo 3 pero ya que este

sistema es un poco más grande se resolverá de manera analítica de forma matricial . Las reacciones consideradas se muestran en la tabla 5.1

Reacción	Constante de velocidad de Reacción ppm min K
$O_3 + NO \rightarrow NO_2 + O_2$	$1.04 \times 10^7 T^{-1}$
$NO_2 + O(^3P) \rightarrow NO + O_2$	$\exp(-1450/T)$
$NO + O(^3P) \rightarrow NO_2$	$3.99 \times 10^7 T^{-1}$
$NO_2 + O(^3P) \rightarrow NO_2$	$1.67 \times 10^7 T^{-1}$
$NO_2 + O(^3P) \rightarrow NO_2$	$\exp(584/T)$
$O_3 + NO_2 \rightarrow NO_2 + O_2$	$1.07 \times 10^7 T^{-1}$
	$5.19 \times 10^7 T^{-1}$
$NO_2 + NO \rightarrow 2NO_2$	$\exp(-2450/T)$
$NO + OH \rightarrow HNO_2$	$8.05 \times 10^7 T^{-1}$
$HNO_2 + h\nu \rightarrow NO + OH$	$5.07 \times 10^7 T^{-1}$
$HO_2 + NO_2 \rightarrow HNO_2 + O_2$	$a$
$HNO_2 + OH \rightarrow H_2O + NO_2$	$17.37^{-1} \exp(1006/T)$
$NO_2 + HO_2 \rightarrow HNO_2$	$2.91 \times 10^7 T^{-1}$
	$1.73 \times 10^7 T^{-1}$
$HNO_2 \rightarrow HO_2 + NO_2$	$\exp(1006/T)$
	$1.80 \times 10^{13}$
$HO_2 + NO \rightarrow NO_2 + OH$	$\exp(-9950/T)$
$RO_2 + NO \rightarrow NO_2 + RO$	$3.58 \times 10^7 T^{-1}$
$RCO_2 + NO \rightarrow NO_2 + RCO_2 + CO_2$	$3.58 \times 10^7 T^{-1}$
$NO_2 + OH \rightarrow HNO_2$	$3.36 \times 10^7 T^{-1}$
	$4.53 \times 10^7 T^{-1}$
$RCO_2 + NO_2 \rightarrow PAN$	$2.05 \times 10^7 T^{-1}$
$PAN \rightarrow RCO_2 + NO_2$	$4.77 \times 10^{18}$
$NO_2 + NO_2 \rightarrow N_2O_4$	$\exp(-12516/T)$
$N_2O_4 \rightarrow NO_2 + NO_2$	$7.40 \times 10^3 T^{-1}$
	$4.06 \times 10^{18}$
$H_2O + N_2O_4 \rightarrow 2HNO_2$	$\exp(-11080/T)$
	$5.66 \times 10^{-1} T^{-1}$
	0.43
$NO_2 + HCHO (+O_2) \rightarrow HNO_2 + HO_2 + CO$	1.98
$NO_2 + RCHO (+O_2) \rightarrow HNO_2 + RCO_2$	$a$
$NO_2 + h\nu \rightarrow NO_2 + O(^3P)$	1826.77 <sup>-1</sup>
$NO_2 + OLE \rightarrow RPN$	0.59
$NO_2 + NO_2 \rightarrow NO_2 + NO + O_2$	$b$
$HNO_2 + NH_3 \rightarrow NH_4NO_2$	
$RO + NO \rightarrow RONO$	$4.38 \times 10^7 T^{-1}$
$RO + NO_2 \rightarrow RNO_2$	$2.19 \times 10^7 T^{-1}$
$RO + NO_2 \rightarrow RCHO + HNO_2$	$1.91 \times 10^7 T^{-1}$

Tabla 5.1 Reacciones consideradas en el cálculo de las concentraciones de los NOx

Considerando cada equilibrio de la forma :

$$\frac{dc}{dt} = R(c)$$

donde  $c$  es el vector de concentración de especies (  $c_1, c_2, \dots, c_s$  )  $R(c)$

Es el vector de velocidad de reacción de la especie química

$$c = \begin{Bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_s \end{Bmatrix} \quad R(c) = \begin{Bmatrix} R_1(c) \\ R_2(c) \\ \vdots \\ R_s(c) \end{Bmatrix}$$

donde  $s$  es el número de especies químicas .

El tamaño de la matriz disminuye utilizando el principio del estado estacionario ,para predecir la concentración de los radicales libres que se forman en la atmósfera como lo son el  $HO_2$   $OH$  ,  $O$ , el radical peroxi .

El sistema matricial de ecuaciones diferenciales se resuelve utilizando el operador transformada de Laplace (15), el cual tiene la propiedad de transformar el problema diferencial a un problema algebraico (15), una vez resuelto el problema algebraico se utiliza la transformada de Laplace inversa (15), para expresar el problema en función de un tensor velocidad de reacción para cada una de las especies .

Con la expresión analítica para representar la concentración de cualquier especie , el espacio se divide en regiones pequeñas para que los supuestos del modelo se ajusten lo mas posible a la realidad física del sistema ,pequeños tiempos de viaje , turbulencia total ,

homogeneidad de la superficie ,temperatura promedio más probable y consistencia en los cálculos de los coeficientes de dispersion axial y vertical .

Por lo tanto el modelo toma la forma de una rejilla de cubos concentricos cuya frontera representa la etapa de un proceso de reacción , flujo de fluidos , transferencia de calor y de masa y sirven como datos iniciales para el segundo proceso o la segunda rejilla y así sucesivamente .

Debido a la sencillez de programación interpretación de datos construcción de tablas y la facilidad en el uso se codificó el diagrama de flujo en LOTUS 123 \*  
obteniendo los resultados que a continuación se muestran .

```

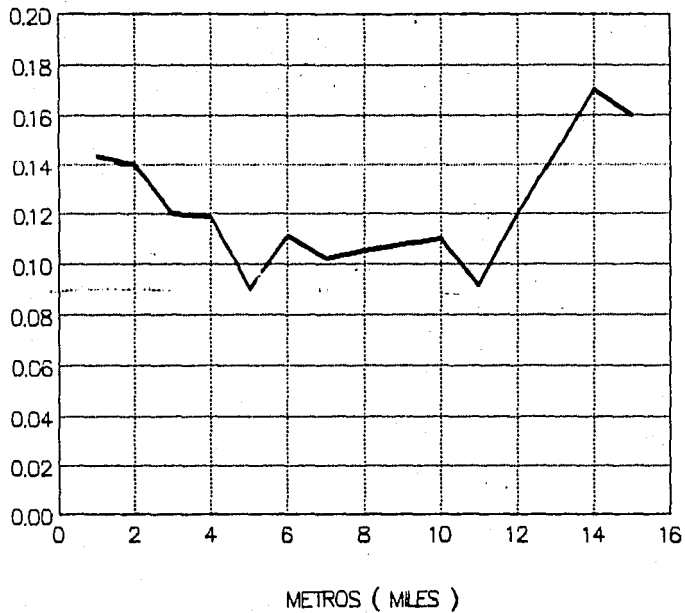
=====
)
)          SECCION DE DATOS          dia 1-12-89
)          =====
)  EMISION DE CONTAMINANTES ( g/a )  777500
)  TEMPERATURA ( GRADOS CENTIGRADOS )  273.15 K
)  DISTANCIA AL PUNTO DE ANALISIS ( METROS )  1000
)  ALTURA DE INVERSION ( METROS )  1024
)  VELOCIDAD DEL VIENTO ( m/min )  114
)  ALTURA DE INYECCION ( m )  65
)  REFLECTANCIA ( g/s )  2.25
)  ABSORBANCIA ( g/s )  9.00
)  ALTURA A LA QUE SE EFECTUA EL ANALISIS ( m )  10
)  CONCENTRACION INICIAL DE NO ( ppb )  0.0015
)  CONCENTRACION INICIAL DE OZONO ( ppb )  0.11
)  CONCENTRACION DE SOLIDOS SUSPENDIDOS (ppb)  0.0014
=====
)
)          UNIDADES = ppb/min
)
)  K1= 3.6E-07 K14= 2947.079 K27= 1.2E-11
)  K2= 0.001257 K15= 2704.174 K28= 1.13E-17
)  K3= 146.7736 K16= 1307.432 K29= 1.2E-07
)  K4= 72.0751 K17= 190.0655 a5z= 0.143E
)  K5= 13106.35 K18= 19.34545 a5Y= 0.05777
)  K6= 2.124077 K19= 13106.35 b5z= 0.8905E
)  K7= 5970060 K20= 14863.63 b5Y= 100
)  K8= -16584.29 K21= 0.024176 Sz = 70.0085E
)  K9= 479.59 K22= 18.89951 3Y = 179.77
)  K10= 0.272448 K23= 58741.97
)  K11= 2520.924 K24= 0.006801
)  K12= 13472.45 K25= 6E-12
)  K13= 0.59 K26= 7.15E-06
)
=====

```

TABLA 3.1 VALORES CALCULADOS DE LAS CONCENTRACIONES DE LOS OXIDOS DE NITROGENO Y LOS PRINCIPALES RADICALES LIBRES PARA EL DIA 1/12/89

FECHA	DISTANCIA	(O)	(PAN)	(OH <sup>•</sup> )	(HO2)	(O3)	(NO)	(NO2)	(NO)	(NO3)
DD/MM/AA	m	ppb	ppb	ppb	ppb	ppb	ppb	ppb	ppb	ppb
		0.0002	0.0002	0.0003	5	0.1436	12	9	5	5
1/12/89	1000	2.09E-04	1.39E-01	2.62E-03	5.00	0.14	12.39	3.62E+00	0.388452	5.16
1/12/89	2000	1.29E-10	7.39E+01	1.40E-02	5.00	1.20E-01	13.41	8.41E+00	0.258555	5.24
1/12/89	3000	9.10E-11	6.48E+01	1.27E-02	5.01	1.19E-01	14.00	8.14E+00	0.729142	5.27
1/12/89	4000	5.47E-11	2.00E+01	3.79E-03	5.01	9.00E-02	14.13	7.86E+00	1.082315	5.25
1/12/89	5000	4.08E-11	1.07E+01	2.02E-03	5.01	1.11E-01	14.13	7.58E+00	0.41533	5.19
1/12/89	6000	3.97E-11	2.67E+01	3.76E-03	5.01	1.02E-01	14.25	7.32E+00	0.406292	5.11
1/12/89	7000	3.38E-11	1.75E-01	3.30E-03	5.01	1.05E-01	14.32	7.06E+00	0.922497	5.01
1/12/89	8000	2.62E-11	7.62E+00	1.32E-03	5.01	1.09E-01	14.74	6.31E+00	1.211751	4.60
1/12/89	9000	1.23E-11	4.67E+00	8.89E-04	5.01	1.10E-01	14.75	6.57E+00	0.568249	4.76
1/12/89	10000	2.09E-11	5.89E+00	9.41E-04	5.01	9.17E-02	14.75	6.74E+00	1.269347	4.54
1/12/89	11000	1.34E-11	3.53E+00	6.75E-04	5.01	1.09E-01	14.77	6.11E+00	1.520451	4.51
1/12/89	12000	1.67E-11	2.13E+00	4.01E-04	5.01	1.45E-01	14.77	5.69E+00	2.397745	4.37
1/12/89	13000	1.87E-11	1.45E+00	2.73E-04	5.01	1.70E-01	14.77	5.49E+00	3.190485	4.24
1/12/89	14000	1.42E-11	1.01E+00	1.70E-04	5.01	1.50E-01	14.77	5.42E+00	4.280214	4.10
1/12/89	15000	1.00E-11	6.81E-01	1.26E-04	5.01	1.97E-01	14.77	5.29E+00	6.0347	3.96

PARTES POR MILLON



(03)

Tabla 5.0 Representación gráfica de la concentración de ozono reportada por SEDUE para el día 1/12/89

PARTES POR MILLON

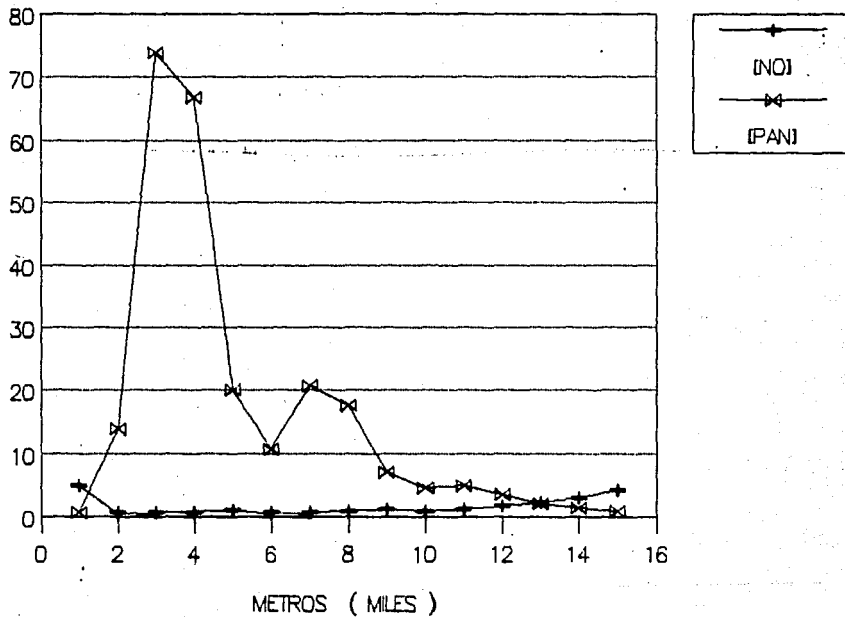


Tabla 5.1.-Representación gráfica de la concentración del óxido nítrico calculada mediante la simulación para el día 1/12/89



PARTES POR MILLON

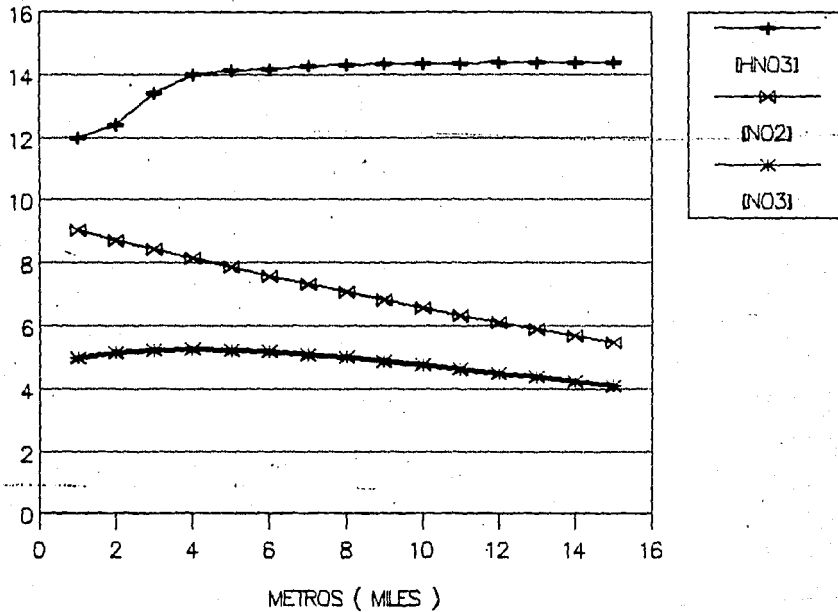


Tabla 5.1.-Representación gráfica de la concentración del óxido nítrico calculada para el día 1/12/89

```

(=====)
( )
(             SECCION DE DATOS             dia 1-12-89 ( )
( ===== )
( EMISION DE CONTAMINANTES ( g/a )         777600 ( )
( TEMPERATURA ( GRADOS CENTIGRADOS )       3 278.15 K ( )
( DISTANCIA AL PUNTO DE ANALISIS ( METROS ) 1900 ( )
( ALTURA DE INVERSION ( METROS )          1024 ( )
( VELOCIDAD DEL VIENTO ( m/s)              114 ( )
( ALTURA DE INYECCION ( m )                55 ( )
( REFLECTANCIA ( g/a )                      2.25 ( )
( ADECUANCIA ( g/a )                        7.12 ( )
( ALTURA A LA QUE SE EFECTUA EL ANALISIS ( m ) 10 ( )
( CONCENTRACION INICIAL DE NO ( ppb )       0.0009 ( )
( CONCENTRACION INICIAL DE O3 ( ppm )       0.11 ( )
( CONCENTRACION DE SOLIDOS SUSPENDIDOS (ppm) 0.0024 ( )
(=====)
( )
( MICHARES = ppm/min )
( )
( K1= 3.6E-07 K14= 1394.122 K27= 1.2E-11 ( )
( K2= 5.001244 K15= 1559.435 K28= 1.13E-13 ( )
( K3= 143.4473 K16= 7733.99 K29= 1.2E-07 ( )
( K4= 73.55259 K17= 136.59 s3= 0.1453 ( )
( K5= 12970.75 K18= 27.75947 s4= 0.09777 ( )
( K6= 2.167052 K19= 10370.75 s5= 0.59085 ( )
( K7= 5070000 K20= 14576.44 s6= 102 ( )
( K8= 16286.18 K21= 13027896 Sz = 70.00885 ( )
( K9= 470.9497 K22= 22.4184 Sy = 199.77 ( )
( K10= 0.524399 K23= 57332.44 ( )
( K11= 2317.62 K24= 0.091369 ( )
( K12= 13250.27 K25= 6E-12 ( )
( K13= 0.59 K26= 1.72E-05 ( )
( )
(=====)

```

TABLA 5.2 VALORES CALCULADOS DE LAS CONCENTRACIONES DE LOS OXIDOS DE NITROGENO Y LOS PRINCIPALES RADICALES LIBRES PARA EL DIA 1/12/89

FECHA	DISTANCIA (O)	[NO]		[NO <sub>2</sub> ]	[NO <sub>3</sub> ]	[HNO <sub>3</sub> ]	[NO <sub>2</sub> ]	[NO]	[HO <sub>2</sub> ]	
		a	ppb	ppm	ppb	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm
1/12/89	1000	2.00E-04	5.88E+00	2.57E-13	5.60	0.14	12.38	6.68E+00	0.335695	5.16
1/12/89	2000	1.29E-10	3.43E+01	1.39E-12	5.00	1.20E-01	13.37	8.40E+00	0.254015	5.24
1/12/89	3000	9.26E-11	3.25E+01	1.27E-12	5.01	1.17E-01	13.93	8.14E+00	0.675223	5.27
1/12/89	4000	5.53E-11	9.20E+00	3.96E-13	5.01	9.00E-02	14.69	7.65E+00	1.033212	5.25
1/12/89	5000	4.11E-11	4.34E+00	2.07E-13	5.01	1.11E-01	14.13	7.57E+00	0.408634	5.19
1/12/89	6000	4.08E-11	9.72E+00	3.95E-13	5.01	1.02E-01	14.21	7.31E+00	0.385444	5.11
1/12/89	7000	3.42E-11	3.36E+01	3.07E-13	5.01	1.05E-01	14.27	7.05E+00	0.363015	5.01
1/12/89	8000	2.15E-11	1.25E+00	1.15E-13	5.01	1.05E-01	14.23	6.31E+00	1.147519	4.90
1/12/89	9000	2.02E-11	2.10E+00	9.14E-14	5.01	1.07E-01	14.00	6.56E+00	0.394537	4.17
1/12/89	10000	2.11E-11	2.05E+00	1.01E-13	5.01	9.13E-02	14.71	6.37E+00	1.074632	4.54
1/12/89	11000	1.36E-11	1.70E+00	7.25E-14	5.01	1.20E-01	14.32	6.11E+00	1.654703	4.51
1/12/89	12000	1.67E-11	9.35E+01	4.75E-14	5.01	1.45E-01	14.32	5.63E+00	2.103993	4.37
1/12/89	13000	1.55E-11	6.36E+01	2.95E-14	5.01	1.70E-01	14.32	5.65E+00	2.707377	4.23
1/12/89	14000	1.44E-11	4.85E+01	1.12E-14	5.01	1.50E-01	14.32	5.47E+00	3.713716	4.10
1/12/89	15000	1.72E-11	9.71E+01	1.44E-14	5.01	1.70E-01	14.33	5.23E+00	5.170235	3.76

PARTES POR MILLON

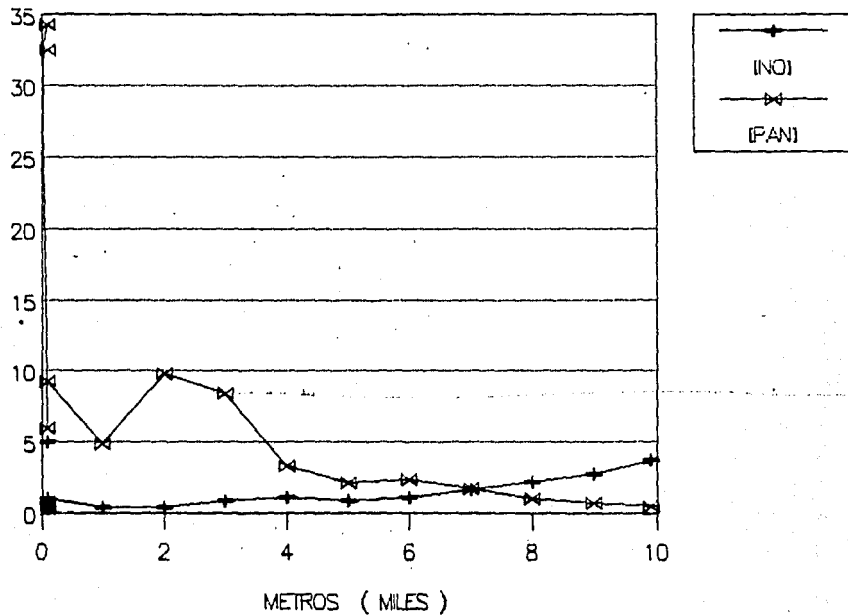


Tabla 5.2.-Representación gráfica de la concentración del óxido nítrico calculada para el día 1/12/89 para una temperatura de 5 C

PARTES POR MILLON

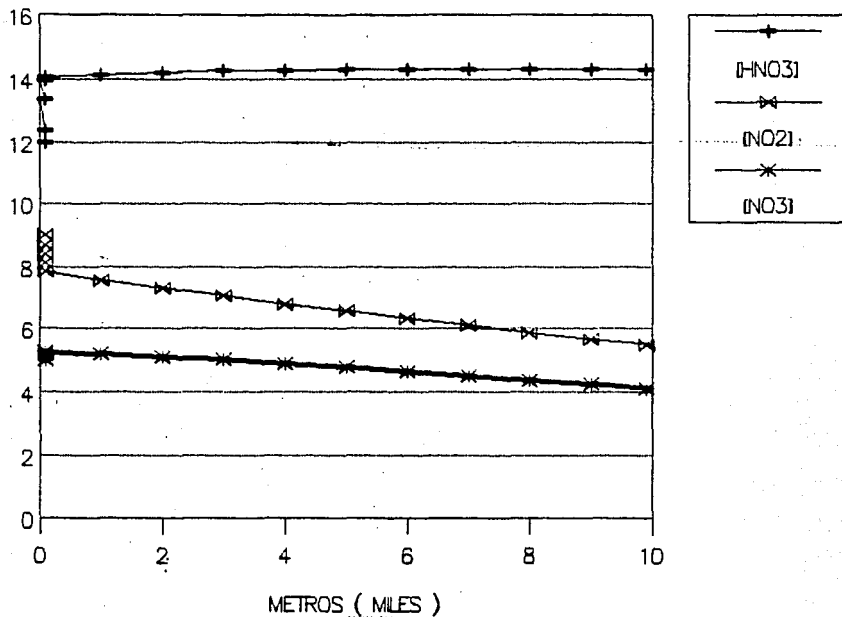


Tabla 5.2.-Representación gráfica de la concentración de los óxidos de nitrógeno calculadas para el día 1/12/89 para una temperatura de 5 C

```

=====
)
)
)          SECCION DE DATOS          dia 1-12-89
)          *****
)
)  EMISION DE CONTAMINANTES ( g/m )      777600
)  TEMPERATURA ( GRADOS CENTIGRADOS )    15      288.15 K
)  DISTANCIA AL PUNTO DE ANALISIS ( METROS ) 1000
)  ALTURA DE INVERSION ( METROS )        1024
)  VELOCIDAD DEL VIENTO ( m/min )        114
)  ALTURA DE INYECCION ( m )            65
)  REFLECTANCIA ( g/s )                  2.25
)  ABSORBANCIA ( g/s )                   9.12
)  ALTURA A LA QUE SE EFECTUA EL ANALISIS ( m ) 2
)  CONCENTRACION INICIAL DE NO ( ppm )    0.0009
)  CONCENTRACION INICIAL DE OZONO ( ppm ) 0.11
)  CONCENTRACION DE SOLIDOS SUSPENDIDOS (ppm) 0.0024
)
)          UNIDADES = ppm/min
)
)  K1= 3.5E-07 K14= 2793.684 K27= 1.2E-11
)  K2= 0.00101 K15= 2568.107 K28= 1.28E-13
)  K3= 138.4595 K16= 3609.231 K29= 1.2E-07
)  K4= 76.78662 K17= 180.1145 aS2= 0.1488
)  K5= 12424.08 K18= 23.55054 aS5= 0.09777
)  K6= 2.24835 K19= 12424.08 bS2= 0.89085
)  K7= 507000 K20= 14089.88 bS5= 102
)  K8= 15733.98 K21= 0.036556 Sz = 70.00885
)  K9= 454.2243 K22= 23.61847 SY = 199.77
)  K10= 1.51473 K23= 55873.68
)  K11= 1972.782 K24= 0.006526
)  K12= 12771.13 K25= 6E-12
)  K13= 3.59 K26= 9.09E-05
)
)
=====

```

TABLA 5.3 VALORES CALCULADOS DE LAS CONCENTRACIONES DE LOS OXIDOS DE NITROGENO Y LOS PRINCIPALES RADICALES LIBRES PARA EL DIA 1/12/89

DD/MM/AA	DISTANCIA	[O]	[PAN]	[OH*]	[HO2]	[O3]	[HNO3]	[NO2]	[NO]	[NO3]
	m	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm
		0.0002	0.002	0.0003	5	0.1436	12	9	5	5
1/12/89	1000	2.00E-04	1.13E+00	2.48E-03	5.00	0.14	12.35	8.68E+00	0.380537	5.16
1/12/89	2000	1.31E-10	7.04E+00	1.37E-02	5.00	1.20E-01	13.29	8.40E+00	0.245136	5.24
1/12/89	3000	9.48E-11	7.90E+00	1.27E-02	5.01	1.19E-01	13.85	8.13E+00	0.642958	5.27
1/12/89	4000	5.66E-11	1.96E+00	4.03E-03	5.01	9.00E-02	13.98	7.84E+00	0.958569	5.25
1/12/89	5000	4.18E-11	1.92E+00	2.15E-03	5.01	1.11E-01	14.03	7.57E+00	0.374751	5.19
1/12/89	6000	4.13E-11	2.08E+00	4.06E-03	5.01	1.02E-01	14.11	7.30E+00	0.349245	5.11
1/12/89	7000	3.53E-11	1.35E+00	3.58E-03	5.01	1.05E-01	14.17	7.05E+00	0.773777	5.01
1/12/89	8000	2.71E-11	7.39E-01	1.48E-03	5.02	1.08E-01	14.19	6.80E+00	1.025333	4.89
1/12/89	9000	2.35E-11	4.30E-01	9.79E-04	5.02	1.10E-01	14.20	6.55E+00	0.761748	4.77
1/12/89	10000	2.19E-11	5.76E-01	1.13E-03	5.02	9.13E-02	14.21	6.32E+00	0.911077	4.64
1/12/89	11000	1.91E-11	7.35E-01	3.36E-04	5.02	1.20E-01	14.22	6.09E+00	1.387356	4.50
1/12/89	12000	1.73E-11	2.29E-01	4.94E-04	5.02	1.45E-01	14.23	5.88E+00	1.763171	4.36
1/12/89	13000	1.59E-11	1.30E-01	3.50E-04	5.02	1.70E-01	14.23	5.66E+00	2.148851	4.23
1/12/89	14000	1.47E-11	1.13E-01	2.58E-04	5.02	1.60E-01	14.23	5.46E+00	2.849206	4.09
1/12/89	15000	1.35E-11	3.90E-02	1.76E-04	5.02	1.93E-01	14.23	5.26E+00	3.37529	3.95

PARTES POR MILLON

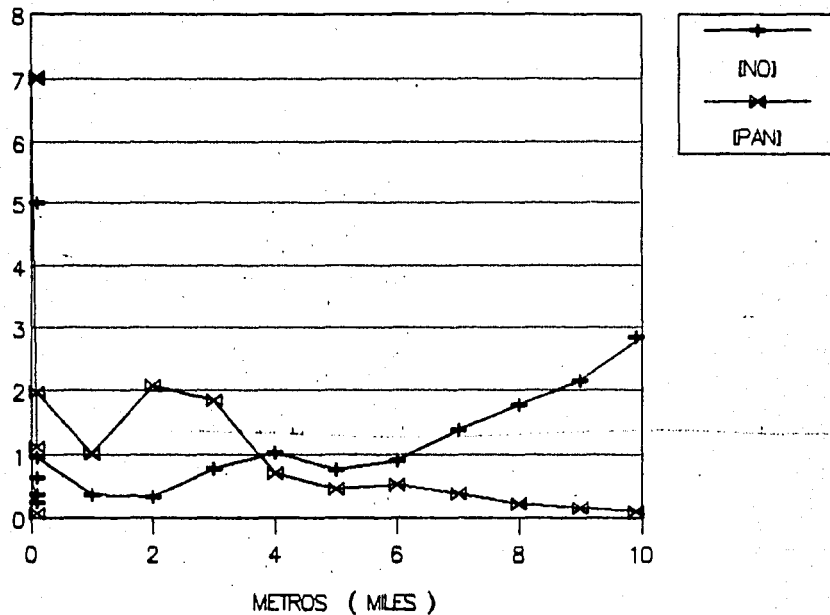


Tabla 5.3.-Representación gráfica de la concentración de los óxidos de nitrógeno calculadas para el día 1/12/89 para una temperatura de 15 C

PARTES POR MILLON

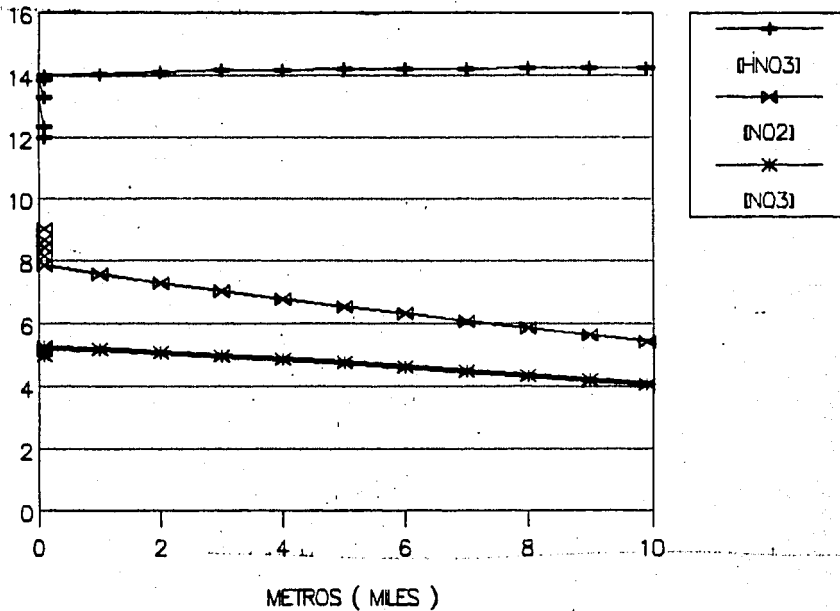


Tabla 5.3.-Representación gráfica de la concentración de los óxidos de nitrógeno calculadas para el día 1/12/89 para una temperatura  $\bar{a}$  de 15 C

SECCION DE DATOS				dia	1-12-89
EMISION DE CONTAMINANTES ( g/m )				777600	
TEMPERATURA ( GRADOS CENTIGRADOS )				20	293.15 K
DISTANCIA AL PUNTO DE ANALISIS ( METROS )				1000	
ALTURA DE INVERSION ( METROS )				1024	
VELOCIDAD DEL VIENTO ( m/min )				114	
ALTURA DE INYECCION ( m )				65	
REFLECTANCIA ( g/s )				2.25	
ABSORBANCIA ( g/s )				9.12	
ALTURA A LA QUE SE EFECTUA EL ANALISIS ( m )				2	
CONCENTRACION INICIAL DE NO ( ppa )				0.3009	
CONCENTRACION INICIAL DE OZONO ( ppa )				0.11	
CONCENTRACION DE SOLIDOS SUSPENDIDOS ( ppa )				0.0024	
UNIDADES = ppm/min					
k1=	3.4E-07	K14=	2746.034	K27=	1.2E-11
k2=	0.09118	K15=	2524.305	K28=	1.33E-13
k3=	136.1078	K16=	3547.672	K29=	1.2E-07
k4=	77.70429	K17=	177.0425	aSz=	0.1488
k5=	12212.18	K18=	25.22344	aSY=	0.09777
k6=	2.297685	K19=	12212.18	bSz=	0.89085
k7=	5070000	K20=	13849.57	bSY=	102
k8=	15452.84	K21=	0.04154	Sz =	70.00885
k9=	446.8702	K22=	25.2962	SY =	199.77
k10=	3.270343	K23=	54920.69		
k11=	1827.035	K24=	0.013689		
k12=	12553.3	K25=	6E-12		
k13=	0.59	K26=	0.0002		

TABLA 5.4 VALORES CALCULADOS DE LAS CONCENTRACIONES DE LOS OXIDOS DE NITROGENO Y LOS PRINCIPALES RADICALES LIBRES PARA EL DIA 1/12/89

FECHA	DISTANCIA	[O]	[PAN]	[OH*]	[HO2]	[O3]	[HNO3]	[NO2]	[NO]	[NO3]
DD/MM/AA	m	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm
		0.0002	0.002	0.0003	5	0.1436	12	9	5	5
1/12/89	1000	2.00E-04	5.12E-01	2.44E-03	5.00	0.14	12.34	8.68E+00	0.378121	5.16
1/12/89	2000	1.32E-10	3.25E+00	1.35E-02	5.00	1.20E-01	13.25	8.40E+00	0.241056	5.24
1/12/89	3000	9.58E-11	3.27E+00	1.27E-02	5.01	1.19E-01	13.80	8.12E+00	0.618219	5.27
1/12/89	4000	5.72E-11	9.32E-01	4.11E-03	5.01	9.00E-02	13.93	7.84E+00	0.922559	5.24
1/12/89	5000	4.21E-11	4.83E-01	2.20E-03	5.01	1.11E-01	13.99	7.56E+00	0.363235	5.19
1/12/89	6000	4.18E-11	9.82E-01	4.11E-03	5.02	1.02E-01	14.07	7.30E+00	0.333663	5.11
1/12/89	7000	3.59E-11	8.84E-01	3.67E-03	5.02	1.05E-01	14.13	7.04E+00	0.73293	5.00
1/12/89	8000	2.74E-11	3.41E-01	1.54E-03	5.02	1.08E-01	14.15	6.79E+00	0.974214	4.89
1/12/89	9000	2.37E-11	2.20E-01	1.01E-03	5.02	1.15E-01	14.16	6.55E+00	0.716121	4.77
1/12/89	10000	2.21E-11	2.60E-01	1.17E-03	5.02	9.13E-02	14.17	6.32E+00	0.337319	4.63
1/12/89	11000	1.94E-11	1.95E-01	8.90E-04	5.02	1.20E-01	14.18	6.09E+00	1.271097	4.50
1/12/89	12000	1.75E-11	1.14E-01	5.30E-04	5.02	1.45E-01	14.18	5.87E+00	1.606134	4.36
1/12/89	13000	1.61E-11	3.01E-02	3.76E-04	5.02	1.70E-01	14.18	5.66E+00	1.921953	4.27
1/12/89	14000	1.49E-11	5.99E-02	2.83E-04	5.02	1.60E-01	14.19	5.46E+00	2.513617	4.09
1/12/89	15000	1.36E-11	4.11E-02	1.96E-04	5.02	1.93E-01	14.19	5.26E+00	3.395966	3.95



PARTES POR MILLON

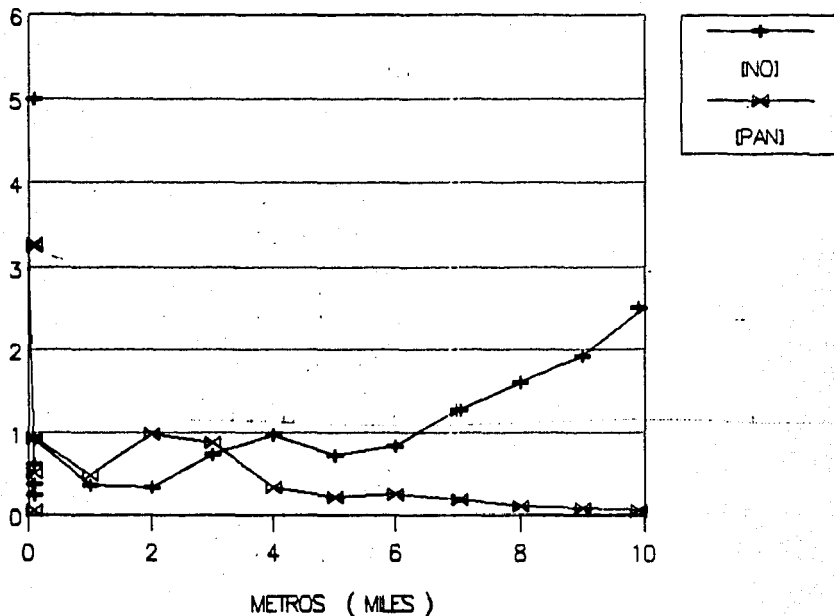


Tabla 5.4.-Representación gráfica de la concentración de los óxidos de nitrógeno calculadas para el día 1/12/89 para una temperatura de 520 C

PARTES POR MILLON

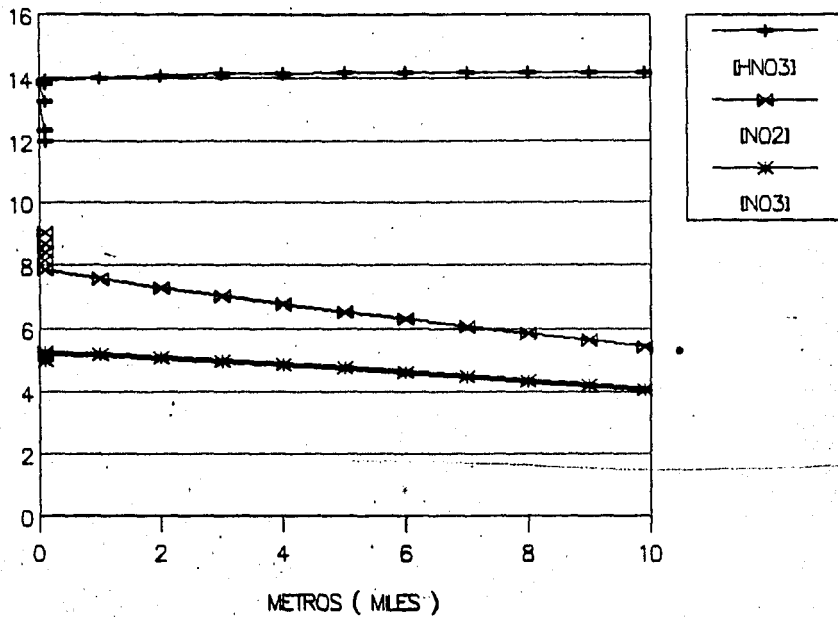


Tabla 5.4.-Representación gráfica de la concentración de los óxidos de nitrógeno calculadas para el día 1/12/89 para una temperatura de 20 C

```

=====
)
)
) SECCION DE DATOS dia 1-15-89
)
)
) EMISION DE CONTAMINANTES ( g/m ) 777600
) TEMPERATURA ( GRADOS CENTIGRADOS ) 0 273.15 K
) DISTANCIA AL PUNTO DE ANALISIS ( METROS ) 1000
) ALTURA DE INVERSION ( METROS ) 1024
) VELOCIDAD DEL VIENTO ( m/min ) 114
) ALTURA DE INYECCION ( m ) 65
) REFLECTANCIA ( g/s ) 2.25
) ABSORBANCIA ( g/s ) 9.12
) ALTURA A LA QUE SE EFECTUA EL ANALISIS ( a ) 2
) CONCENTRACION INICIAL DE NO ( ppa ) 9
) CONCENTRACION INICIAL DE O3NO ( ppa ) 0.17
) CONCENTRACION DE SOLIDOS SUSPENDIDOS (ppa) 0.00122
)
) UNIDADES = ppa/min
)
) k1= 3.5E-07 K14= 2947.999 K27= 1.2E-11
) k2= 0.001267 K15= 2709.134 K28= 1.13E-13
) k3= 146.0736 K16= 3807.432 K29= 1.2E-07
) K4= 72.0751 K17= 190.0055 aS2= 0.1489
) K5= 13106.35 K18= 19.84545 aSY= 0.09777
) K6= 2.124077 K19= 13106.35 bS2= 0.89085
) K7= 5070000 K20= 14863.63 bSY= 102
) K8= 16584.29 K21= 0.024176 Sz = 70.00885
) K9= 479.59 K22= 18.89931 SY = 199.77
) K10= 0.272448 K23= 58941.97
) K11= 2520.924 K24= 0.000601
) K12= 13472.45 K25= 6E-12
) K13= 0.59 K26= 7.16E-06
)
=====

```

TABLA 5.5 VALORES CALCULADOS DE LAS CONCENTRACIONES DE LOS OXIDOS DE NITROGENO Y LOS PRINCIPALES RADICALES LIBRES PARA EL DIA 15/12/89

FECHA DD/MM/AA	DISTANCIA m	[O]	[PAN]	[OH <sup>•</sup> ]	[HO2]	[O3]	[HNO3]	[NO2]	[NO]	[NO3]
		ppa	ppa	ppa	ppa	ppa	ppa	ppa	ppa	ppa
		0.0002	0.002	0.0003	5	0.17	12	9	5	5
1/12/89	1000	2.00E-04	1.02E+00	2.62E-03	5.00	0.14	12.39	8.68E+00	0.388454	5.16
1/12/89	2000	1.28E-10	5.54E+00	1.40E-02	5.00	1.34E-01	13.41	8.41E+00	0.258855	5.24
1/12/89	3000	9.52E-11	5.12E+00	1.27E-02	5.01	7.40E-02	14.00	8.14E+00	0.729163	5.27
1/12/89	4000	5.18E-11	1.57E+00	3.78E-03	5.01	9.00E-02	14.13	7.86E+00	1.082231	5.25
1/12/89	5000	4.08E-11	8.60E-01	2.02E-03	5.01	5.60E-02	14.18	7.58E+00	0.415307	5.19
1/12/89	6000	3.56E-11	1.70E+00	3.90E-03	5.01	7.40E-02	14.26	7.32E+00	0.406241	5.11
1/12/89	7000	3.18E-11	1.48E+00	3.30E-03	5.01	8.00E-02	14.32	7.06E+00	0.922425	5.01
1/12/89	8000	2.56E-11	6.10E-01	1.33E-03	5.01	3.60E-02	14.34	5.91E+00	1.2117	4.90
1/12/89	9000	2.24E-11	4.15E-01	8.20E-04	5.01	1.10E-01	14.35	4.57E+00	0.959151	4.79
1/12/89	10000	2.09E-11	4.58E-01	9.46E-04	5.01	2.13E-02	14.36	4.34E+00	1.205457	4.64
1/12/89	11000	1.84E-11	3.35E-01	5.75E-04	5.01	1.20E-01	14.37	6.11E+00	1.824545	4.51
1/12/89	12000	1.67E-11	2.05E-01	4.91E-04	5.01	1.25E-01	14.37	5.39E+00	2.397853	4.37
1/12/89	13000	1.52E-11	1.43E-01	2.73E-04	5.01	1.70E-01	14.37	5.68E+00	3.100192	4.24
1/12/89	14000	1.42E-11	1.03E-01	1.90E-04	5.01	1.60E-01	14.37	5.49E+00	4.280018	4.10
1/12/89	15000	1.30E-11	6.91E-02	1.25E-04	5.01	1.22E-01	14.37	5.28E+00	6.034507	3.96

PARTES POR MILLON

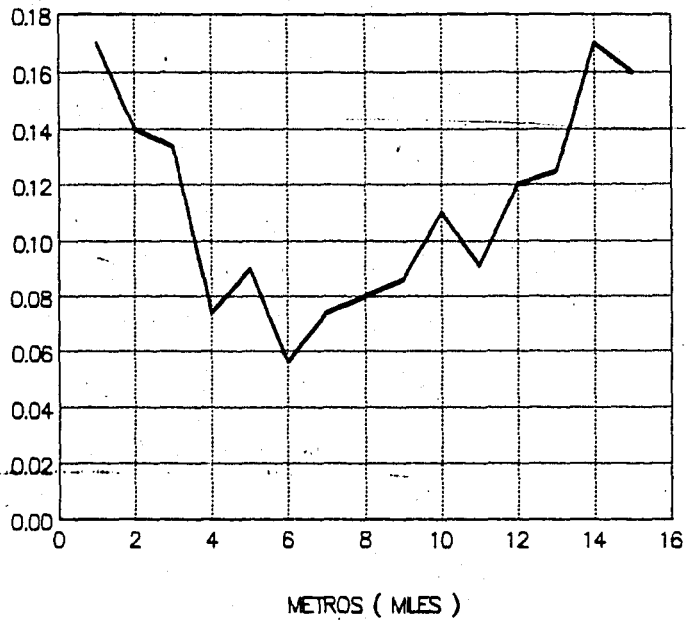


Tabla 5.5.-Representación gráfica de la concentración de ozono reportada por SEDUE para el día 15/12/89

PARTES POR MILLON

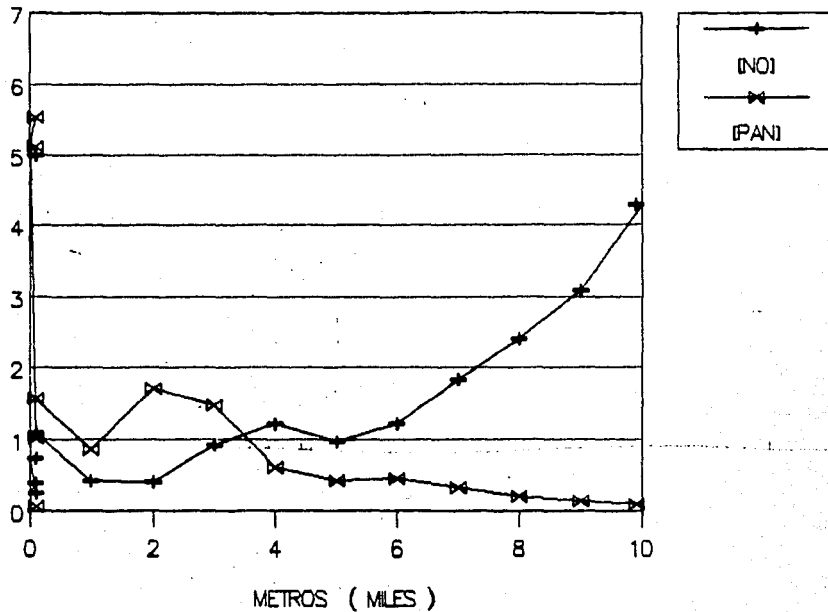


Tabla 5.5.-Representación gráfica de la concentración de los óxidos de nitrógeno calculadas para el día 15/12/89 para una temperatura de 10 C

PARTES POR MILLON

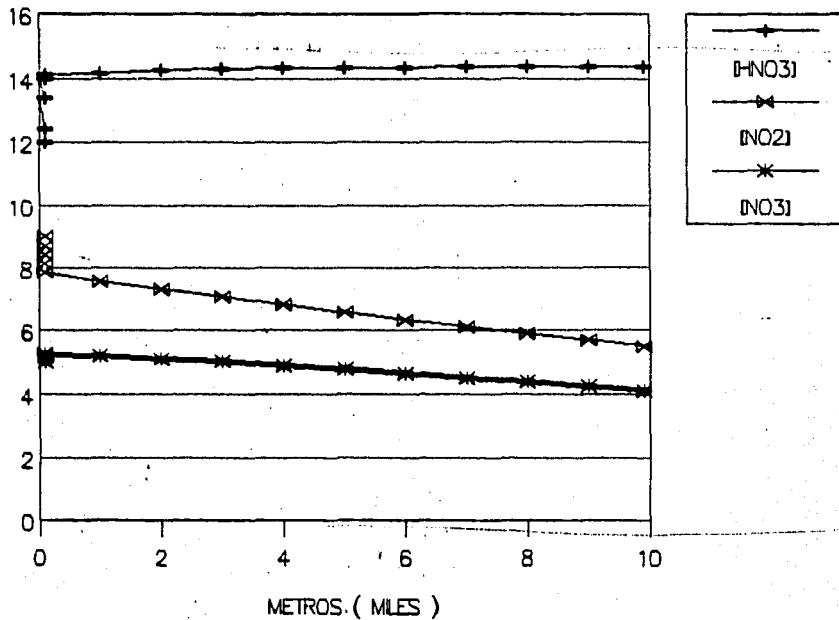


Tabla 5.5.-Representación gráfica de la concentración de los óxidos de nitrógeno calculadas para el día 15/12/89 para una temperatura de 0 C

```

=====
)
)
( SECCION DE DATOS dia 1-15-89 (
)
)
( EMISION DE CONTAMINANTES ( g/m ) 777500 (
) TEMPERATURA ( GRADOS CENTIGRADOS ) 5 278.15 K (
) DISTANCIA AL PUNTO DE ANALISIS ( METROS ) 1000 (
) ALTURA DE INVERSION ( METROS ) 1024 (
) VELOCIDAD DEL VIENTO ( m/min ) 114 (
) ALTURA DE INYECCION ( m ) 65 (
) REFLECTANCIA ( g/s ) 2.25 (
) ESCORPANCIA ( g/s ) 9.12 (
) ALTURA A LA QUE SE EFECTUA EL ANALISIS ( m ) 2 (
) CONCENTRACION INICIAL DE NO ( ppm ) 9 (
) CONCENTRACION INICIAL DE OZONO ( ppa ) 0.17 (
) CONCENTRACION DE SOLIDOS SUSPENDIDOS (ppa) 0.00122 (
)
) UNIDADES = ppa/min (
) k1= 3.6E-07 K14= 2894.122 K27= 1.2E-11 (
) k2= 0.001244 K15= 2660.435 K28= 1.18E-13 (
) k3= 143.4478 K16= 3738.99 K29= 1.2E-07 (
) k4= 73.55269 K17= 136.59 aS2= 0.1488 (
) k5= 12870.75 K18= 20.35967 aS1= 0.09777 (
) k6= 2.167052 K19= 12870.75 bS2= 0.89085 (
) k7= 5070000 K20= 14596.44 bS1= 102 (
) k8= 16286.18 K21= 0.027896 Sz = 70.00885 (
) k9= 470.9689 K22= 20.4184 SY = 199.77 (
) k10= 0.524399 K23= 57882.44 (
) k11= 2317.02 K24= 0.001369 (
) k12= 13230.27 K25= 6E-12 (
) k13= 0.59 K26= 1.72E-05 (
)
)
=====

```

TABLA 5.6 VALORES CALCULADOS DE LAS CONCENTRACIONES DE LOS OXIDOS DE NITROGENO Y LOS PRINCIPALES RADICALES LIBRES PARA EL DIA 15/12/89

FECHA	DISTANCIA	[O]	[PAN]	[O <sup>••</sup> ]	[HO2]	[O3]	[HNO3]	[NO2]	[NO]	[NO3]
DD/MM/AA	m	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm
1/12/89	1000	2.80E-04	4.30E-01	2.57E-03	5.00	0.17	12	9	5	5
1/12/89	2000	1.29E-10	2.57E+00	1.39E-02	5.00	1.34E-01	13.37	8.40E+00	0.254015	5.24
1/12/89	3000	9.63E-11	2.49E+00	1.27E-02	5.01	7.40E-02	13.95	8.14E+00	0.698243	5.27
1/12/89	4000	5.23E-11	7.21E-01	3.86E-03	5.01	9.00E-02	14.08	7.85E+00	1.038131	5.25
1/12/89	5000	4.11E-11	3.89E-01	2.07E-03	5.01	5.60E-02	14.13	7.57E+00	0.400666	5.19
1/12/89	6000	3.59E-11	7.96E-01	3.95E-03	5.01	7.40E-02	14.21	7.31E+00	0.385418	5.11
1/12/89	7000	3.22E-11	6.99E-01	3.39E-03	5.01	8.00E-02	14.27	7.06E+00	0.864309	5.01
1/12/89	8000	2.58E-11	2.75E-01	1.39E-03	5.01	8.60E-02	14.29	6.91E+00	1.132762	4.90
1/12/89	9000	2.38E-11	1.87E-01	9.22E-04	5.01	1.10E-01	14.30	6.56E+00	0.88595	4.77
1/12/89	10000	2.13E-11	2.12E-01	1.01E-03	5.01	9.13E-02	14.31	6.33E+00	1.089227	4.64
1/12/89	11000	1.96E-11	1.57E-01	7.30E-04	5.01	1.20E-01	14.32	6.11E+00	1.648465	4.51
1/12/89	12000	1.69E-11	9.52E-02	4.34E-04	5.01	1.25E-01	14.32	5.89E+00	2.141429	4.37
1/12/89	13000	1.54E-11	6.75E-02	3.00E-04	5.01	1.70E-01	14.32	5.68E+00	2.722433	4.23
1/12/89	14000	1.44E-11	4.91E-02	2.12E-04	5.01	1.60E-01	14.32	5.47E+00	3.711877	4.10
1/12/89	15000	1.32E-11	3.35E-02	1.41E-04	5.01	1.22E-01	14.33	5.28E+00	2.585218	3.96

PARTES POR MILLON

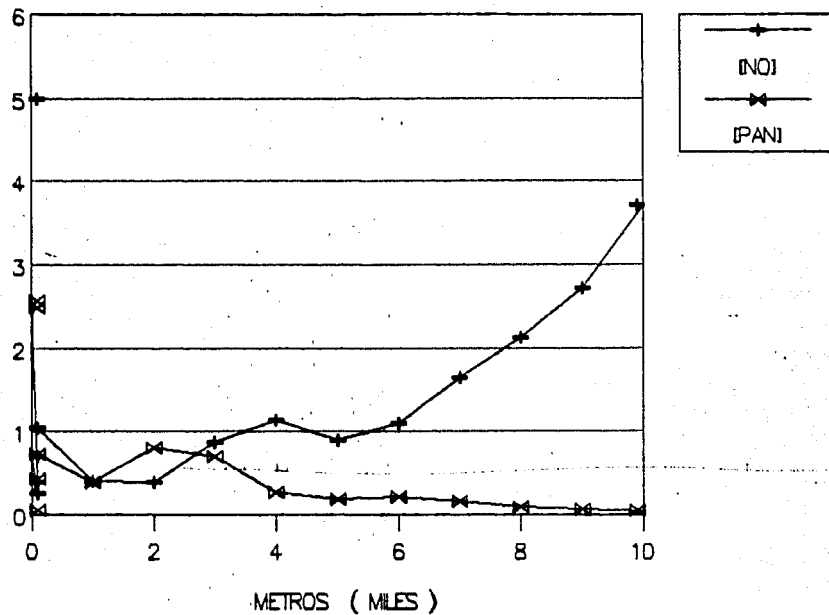


Tabla 5.6.-Representación gráfica de la concentración de los óxidos de nitrógeno calculadas para el día 15/12/89 para una temperatura de 5 C



PARTES POR MILLÓN

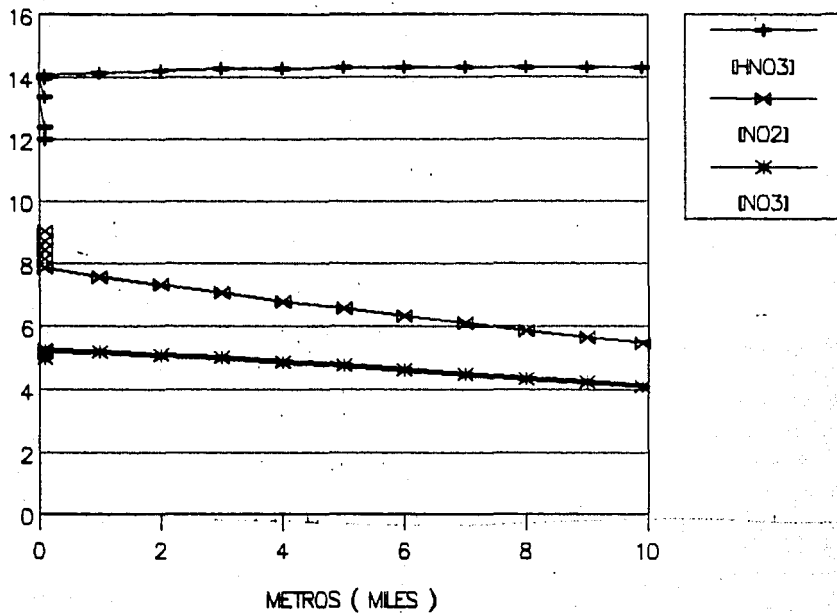


Tabla 5.6.- Representación gráfica de la concentración de los óxidos de nitrógeno calculadas para el día 15/12/89 para una temperatura de 5 C

```

(=====)
)
)
) SECCION DE DATOS dia 15-12-89 (
)
)
) EMISION DE CONTAMINANTES ( g/a ) 777600 (
) TEMPERATURA ( GRADOS CENTIGRADOS ) 15 283.15 K (
) DISTANCIA AL PUNTO DE ANALISIS ( METROS ) 1000 (
) ALTURA DE INVERSION ( METROS ) 1024 (
) VELOCIDAD DEL VIENTO ( m/min ) 114 (
) ALTURA DE INYECCION ( m ) 65 (
) REFLECTANCIA ( g/s ) 2.25 (
) ABSORBANCIA ( g/s ) 9.12 (
) ALTURA A LA QUE SE EFECTUA EL ANALISIS ( m ) 2 (
) CONCENTRACION INICIAL DE NO ( ppa ) 9 (
) CONCENTRACION INICIAL DE OZONO ( ppa ) 0.17 (
) CONCENTRACION DE SOLIDOS SUSPENDIDOS (ppa) 0.00122 (
)
) UNIDADES = ppa/min (
)
) k1= 3.6E-07 K14= 2793.684 K27= 1.2E-11 (
) k2= 0.001201 K15= 2568.107 K28= 1.29E-13 (
) k3= 138.4675 K16= 3609.231 K29= 1.2E-07 (
) k4= 76.36662 K17= 190.1145 aS2= 0.1488 (
) k5= 12424.68 K18= 23.55054 aS3= 0.09777 (
) k6= 2.248835 K19= 12424.08 bS2= 0.89085 (
) k7= 5070000 K20= 14089.88 bS3= 102 (
) k8= 15720.99 K21= 0.036556 S2 = 70.00885 (
) k9= 454.6243 K22= 23.61847 SY = 199.77 (
)
) K10= 1.81473 K23= 55873.68 (
) K11= 1972.782 K24= 0.006526 (
) K12= 12771.13 K25= 6E-12 (
) K13= 0.59 K26= 9.09E-05 (
)
)
)
(=====)

```

TABLA 5.7 VALORES CALCULADOS DE LAS CONCENTRACIONES DE LOS OXIDOS DE NITROGENO Y LOS PRINCIPALES RADICALES LIBRES PARA EL DIA 15/12/89

DD/MM/AA	DISTANCIA m	[O]	[PAN]	[OH <sup>•</sup> ]	[HO2]	[O3]	[HNO3]	[NO2]	[NO]	[NO3]
		ppa	ppa	ppa	ppa	ppa	ppa	ppa	ppa	ppa
		0.0002	0.002	0.0003	5	0.17	12	9	5	5
1/12/89	1000	2.00E-04	8.24E-02	2.48E-03	5.00	0.14	12.35	8.68E+00	0.380539	5.16
1/12/89	2000	1.31E-10	5.28E-01	1.37E-02	5.00	1.34E-01	13.29	8.40E+00	0.245136	5.24
1/12/89	3000	8.85E-11	5.36E-01	1.27E-02	5.01	7.40E-02	13.85	8.13E+00	0.642979	5.27
1/12/89	4000	5.33E-11	1.54E-01	4.03E-03	5.01	9.00E-02	13.98	7.84E+00	0.958493	5.25
1/12/89	5000	4.18E-11	8.19E-02	2.15E-03	5.01	5.60E-02	14.03	7.57E+00	0.374731	5.19
1/12/89	6000	3.66E-11	1.71E-01	4.04E-03	5.01	7.48E-02	14.11	7.30E+00	0.349309	5.11
1/12/89	7000	3.31E-11	1.54E-01	3.58E-03	5.01	8.00E-02	14.17	7.05E+00	0.773931	5.01
1/12/89	8000	2.63E-11	6.14E-02	1.48E-03	5.02	8.60E-02	14.19	6.80E+00	1.025477	4.89
1/12/89	9000	2.39E-11	4.09E-02	9.79E-04	5.02	1.10E-01	14.20	6.56E+00	0.770578	4.77
1/12/89	10000	2.19E-11	4.84E-02	1.11E-03	5.02	9.13E-02	14.22	6.32E+00	0.91211	4.64
1/12/89	11000	1.91E-11	3.69E-02	3.75E-04	5.02	1.20E-01	14.22	6.10E+00	1.379732	4.50
1/12/89	12000	1.73E-11	2.22E-02	4.99E-04	5.02	1.25E-01	14.23	5.88E+00	1.76022	4.37
1/12/89	13000	1.57E-11	1.59E-02	3.50E-04	5.02	1.70E-01	14.23	5.67E+00	2.147555	4.23
1/12/89	14000	1.47E-11	1.29E-02	2.58E-04	5.02	1.60E-01	14.23	5.46E+00	2.849409	4.09
1/12/89	15000	1.35E-11	8.33E-03	1.76E-04	5.02	1.22E-01	14.23	5.27E+00	1.940936	3.96

PARTES POR MILLON

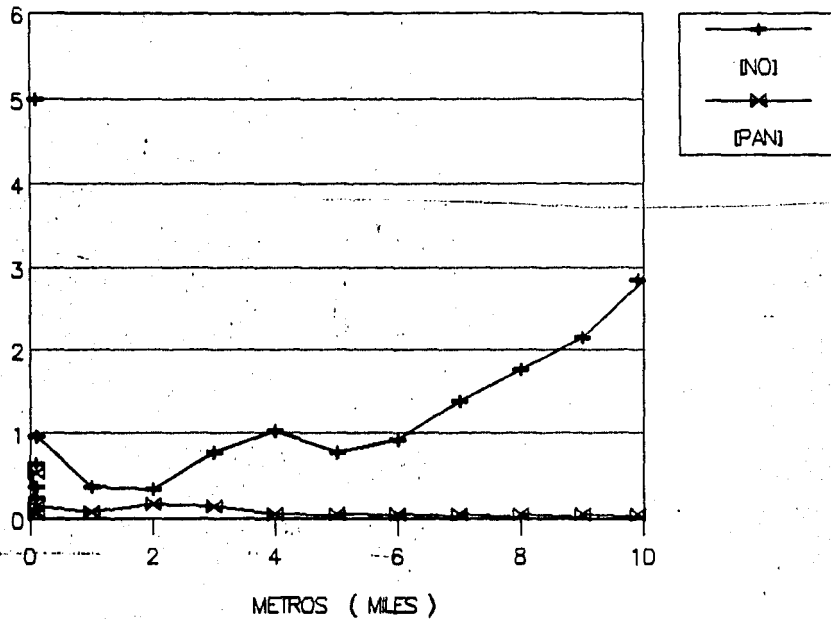


Tabla 5.7.- Representación gráfica de la concentración de los óxidos de nitrógeno calculadas para el día 15/12/89 para una temperatura de 15 C

PARTES POR MILLON

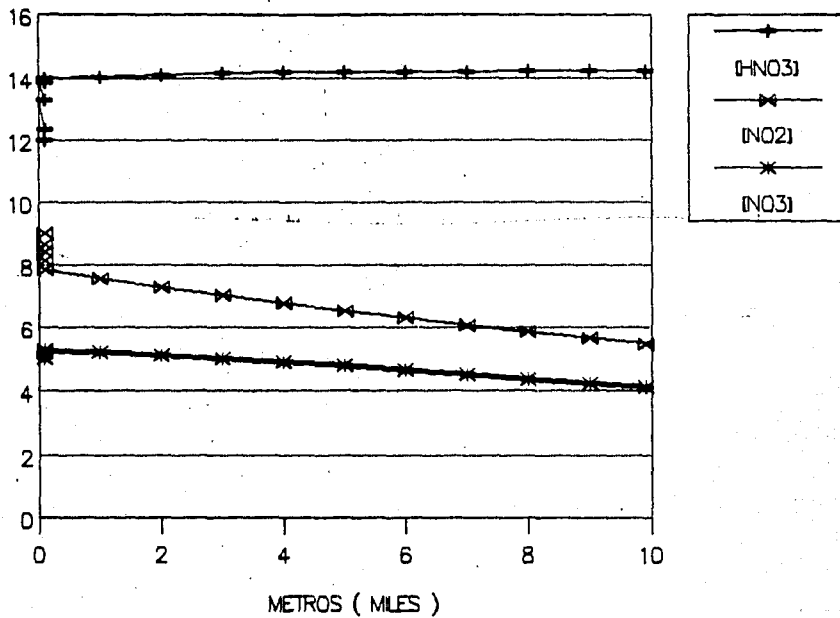


Tabla 5.7.- Representación gráfica de la concentración de los óxidos de nitrógeno calculadas para el día 15/12/89 para una temperatura de 15 C

```

=====
)
)
(          SECCION DE DATOS          dia 15-12-89
)
)
( ENISION DE CONTAMINANTES ( g/m )          777600
)
( TEMPERATURA ( GRADOS CENTIGRADOS )      20 293.15 K
)
( DISTANCIA AL PUNTO DE ANALISIS ( METROS ) 1000
)
( ALTURA DE INVERSION ( METROS )          1024
)
( VELOCIDAD DEL VIENTO ( m/min )           114
)
( ALTURA DE INYECCION ( m )                65
)
( REFLECTANCIA ( g/s )                      2.25
)
( ABSORFANCIA ( g/s )                       9.12
)
( ALTURA A LA QUE SE EFECTUA EL ANALISIS ( m ) 2
)
( CONCENTRACION INICIAL DE NO ( ppm )       9
)
( CONCENTRACION INICIAL DE OZONO ( ppm )    0.17
)
( CONCENTRACION DE SOLIDOS SUSPENDIDOS (ppm) 0.00122
)
=====
)
)
          UNIDADES = ppm/min
)
( k1= 3.6E-07 K14= 2746.034 K27= 1.2E-11
)
( k2= 0.00118 K15= 2524.305 K28= 1.33E-13
)
( k3= 136.1078 K16= 3547.672 K29= 1.2E-07
)
( k4= 77.70429 K17= 177.0425 aSz= 0.1488
)
( k5= 12212.18 K18= 25.22344 aSY= 0.09777
)
( k6= 2.287685 K19= 12212.18 bSz= 0.89085
)
( k7= 5070000 K20= 13849.57 bSY= 102
)
( k8= 15452.84 K21= 0.04154 Sz = 70.00885
)
( k9= 446.8702 K22= 25.2962 SY = 199.77
)
( k10= 3.270343 K23= 54920.69
)
( k11= 1827.035 K24= 0.013689
)
( k12= 12553.3 K25= 6E-12
)
( k13= 0.59 K26= 0.0002
)
)
)
=====

```

**TABLA 5.6 VALORES CALCULADOS DE LAS CONCENTRACIONES DE LOS OXIDOS DE NITROGENO Y LOS PRINCIPALES RADICALES LIBRES PARA EL DIA 15/12/89**

FECHA	DISTANCIA	[O]	[PAN]	[OH <sup>•</sup> ]	[HO2]	[O3]	[HNO3]	[NO2]	[NO]	[NO3]
DD/MM/AA	m	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm
		0.0002	0.002	0.0003	5	0.17	12	9	5	5
1/12/89	1000	2.00E-04	3.75E-01	2.44E-03	5.00	0.14	12.34	8.68E+00	0.378122	5.16
1/12/89	2000	1.32E-10	2.43E+00	1.35E-02	5.00	1.34E-01	13.25	8.49E+00	3.241056	5.24
1/12/89	3000	9.95E-11	2.51E+00	1.27E-02	5.01	7.40E-02	13.80	8.12E+00	3.618234	5.27
1/12/89	4000	5.37E-11	7.31E-01	4.11E-03	5.01	9.00E-02	13.93	7.84E+00	3.922422	5.24
1/12/89	5000	4.21E-11	3.28E-01	2.70E-03	5.01	5.50E-02	13.98	7.56E+00	3.76012	5.19
1/12/89	6000	3.70E-11	8.15E-01	4.14E-03	5.02	7.40E-02	14.07	7.30E+00	3.333362	5.11
1/12/89	7000	3.35E-11	7.42E-01	3.87E-03	5.02	8.00E-02	14.13	7.04E+00	3.741725	5.00
1/12/89	8000	2.65E-11	2.92E-01	1.52E-03	5.02	8.60E-02	14.15	6.79E+00	3.731748	4.89
1/12/89	9000	2.32E-11	1.94E-01	1.00E-03	5.02	1.10E-01	14.16	6.55E+00	3.722799	4.76
1/12/89	10000	2.21E-11	2.35E-01	1.14E-03	5.02	9.13E-02	14.17	6.32E+00	3.345292	4.63
1/12/89	11000	1.93E-11	1.81E-01	8.82E-04	5.02	1.20E-01	14.18	6.09E+00	1.277349	4.50
1/12/89	12000	1.75E-11	1.09E-01	5.27E-04	5.02	1.25E-01	14.18	5.87E+00	1.611147	4.36
1/12/89	13000	1.59E-11	7.91E-02	3.75E-04	5.02	1.70E-01	14.19	5.66E+00	1.93173	4.22
1/12/89	14000	1.49E-11	6.07E-02	2.82E-04	5.02	1.60E-01	14.19	5.48E+00	2.529203	4.09
1/12/89	15000	1.36E-11	4.29E-02	1.95E-04	5.02	1.22E-01	14.19	5.28E+00	1.701691	3.95

PARTES POR MILLON

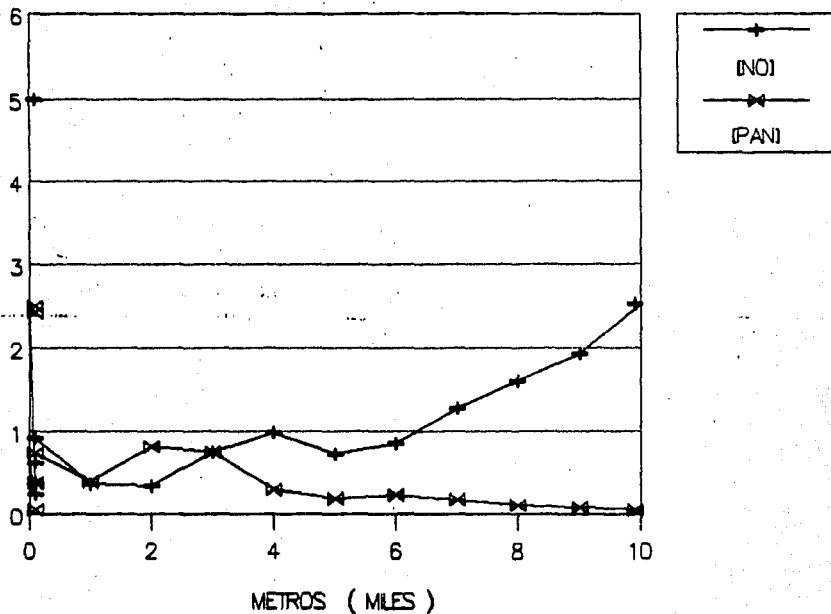


Tabla 5.8 .- Representación gráfica de la concentración de los óxidos de nitrógeno calculadas para el día 15/12/89 para una temperatura de 20 C

PARTES POR MILLON

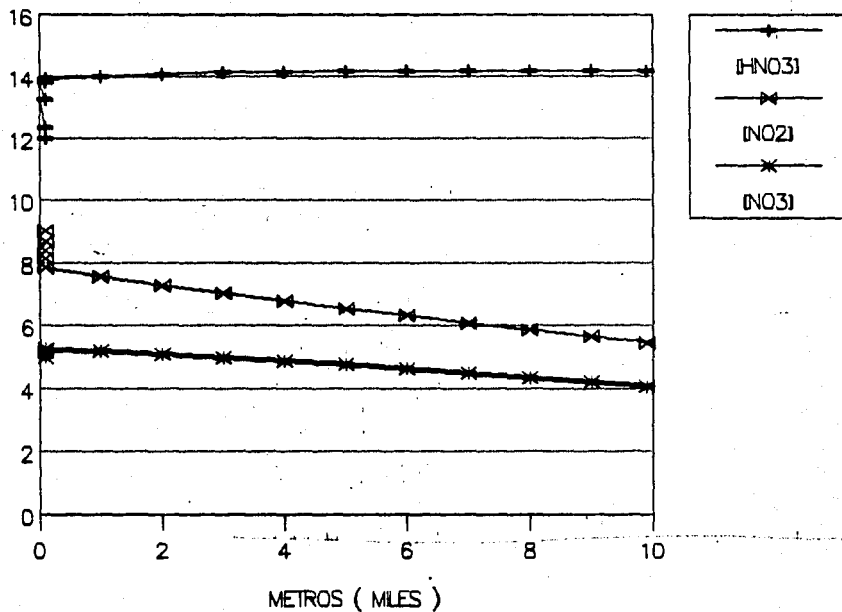


Tabla 5.8 .- Representación gráfica de la concentración de los óxidos de nitrógeno calculadas para el día 15/12/89 para una temperatura de 20 C

```

=====
)
)
) SECCION DE DATOS dia 31-12-89
)
)
) EMISION DE CONTAMINANTES ( g/a ) 777600
) TEMPERATURA ( GRADOS CENTIGRADOS ) 0 273.15 K
) DISTANCIA AL PUNTO DE ANALISIS ( METROS ) 1000
) ALTURA DE INVERSION ( METROS ) 1024
) VELOCIDAD DEL VIENTO ( m/min ) 114
) ALTURA DE INYECCION ( m ) 65
) REFLECTANCIA ( g/s ) 2.25
) ABSORBANCIA ( g/s ) 9.12
) ALTURA A LA QUE SE EFECTUA EL ANALISIS ( m ) 2
) CONCENTRACION INICIAL DE NO ( ppa ) 0.0009
) CONCENTRACION INICIAL DE OZONO ( ppa ) 0.11
) CONCENTRACION DE SOLIDOS SUSPENDIDOS (ppa) 0.0024
)
) UNIDADES = ppa/min
)
) K1= 3.6E-07 K14= 2947.099 K27= 1.2E-11
) K2= 0.001267 K15= 2709.134 K28= 1.13E-13
) K3= 146.0736 K16= 3307.432 K29= 1.2E-07
) K4= 72.0751 K17= 190.0055 aS2= 0.1499
) K5= 13106.35 K18= 13.94545 aSY= 0.09777
) K6= 2.124077 K19= 13106.35 bS2= 0.89085
) K7= 5070000 K20= 14863.63 bSY= 102
) K8= 16584.29 K21= 0.024176 Sz = 70.00885
) K9= 479.59 K22= 18.89981 SY = 199.77
) K10= 0.272448 K23= 58941.97
) K11= 2520.924 K24= 0.000601
) K12= 13472.45 K25= 6E-12
) K13= 0.59 K26= 7.16E-06
)
)
=====

```

TABLA 5.9 VALORES CALCULADOS DE LAS CONCENTRACIONES DE LOS OXIDOS DE NITROGENO Y LOS PRINCIPALES RADICALES LIBRES PARA EL DIA 31/12/89

DD/MM/AA	DISTANCIA	[O]	[PAN]	[OH <sup>•</sup> ]	[HO2]	[O3]	[HNO3]	[NO2]	[NO]	[NO3]
	m	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm
		0.0002	0.002	0.0003	5	0.1124	12	9	5	5
1/12/89	1000	2.00E-04	3.39E-01	2.62E-03	5.00	0.14	12.39	8.68E+00	0.388452	5.16
1/12/89	2000	1.28E-10	1.80E+00	1.40E-02	5.00	1.20E-01	13.41	8.41E+00	0.258855	5.24
1/12/89	3000	9.18E-11	1.63E+00	1.27E-02	5.01	1.21E-01	14.00	8.14E+00	0.729141	5.27
1/12/89	4000	5.48E-11	4.88E-01	3.78E-03	5.01	9.00E-02	14.13	7.86E+00	1.082318	5.25
1/12/89	5000	4.08E-11	2.62E-01	2.02E-03	5.01	1.11E-01	14.18	7.59E+00	0.415331	5.19
1/12/89	6000	3.97E-11	5.05E-01	3.90E-03	5.01	8.97E-02	14.26	7.32E+00	0.406283	5.11
1/12/89	7000	3.27E-11	4.28E-01	3.30E-03	5.01	8.72E-02	14.32	7.06E+00	0.922473	5.01
1/12/89	8000	2.57E-11	1.72E-01	1.33E-03	5.01	1.09E-01	14.34	6.81E+00	1.211697	4.90
1/12/89	9000	2.29E-11	1.14E-01	8.30E-04	5.01	9.09E-02	14.35	6.57E+00	0.94924	4.78
1/12/89	10000	2.06E-11	1.25E-01	9.46E-04	5.01	9.17E-02	14.36	6.74E+00	1.285473	4.64
1/12/89	11000	1.84E-11	8.74E-02	6.75E-04	5.01	1.20E-01	14.37	6.11E+00	1.824569	4.51
1/12/89	12000	1.67E-11	5.18E-02	4.01E-04	5.01	9.28E-02	14.37	5.39E+00	2.377927	4.37
1/12/89	13000	1.50E-11	3.54E-02	2.73E-04	5.01	8.40E-02	14.37	5.69E+00	3.100033	4.24
1/12/89	14000	1.38E-11	2.46E-02	1.90E-04	5.01	7.60E-02	14.37	5.48E+00	2.333194	4.10
1/12/89	15000	1.30E-11	2.93E-02	2.26E-04	5.01	5.90E-02	14.38	5.29E+00	2.705362	3.96



PARTES POR MILLON

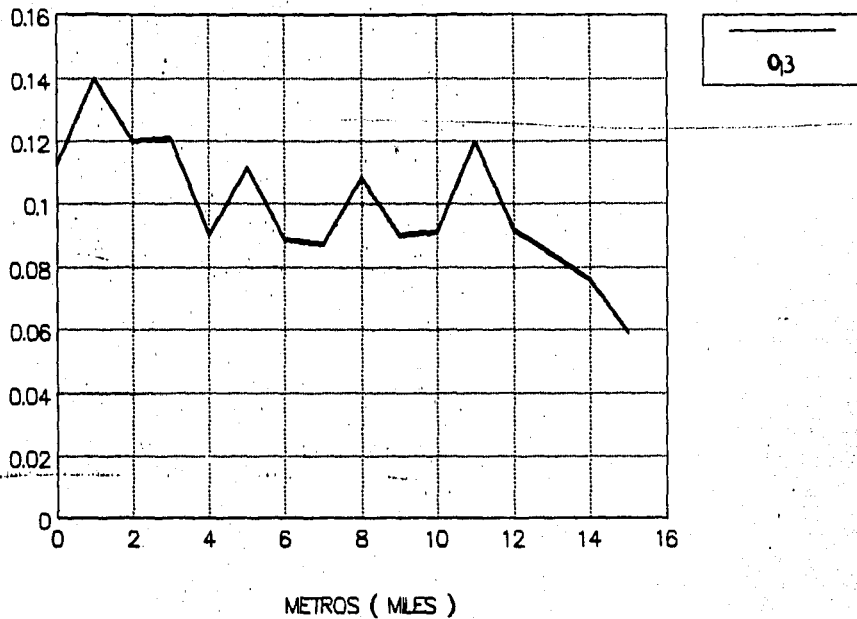


Tabla 5.9.- Representación gráfica de la concentración de ozono reportadas por SEDUE para el día 31/12/89

PARTES POR MILLON

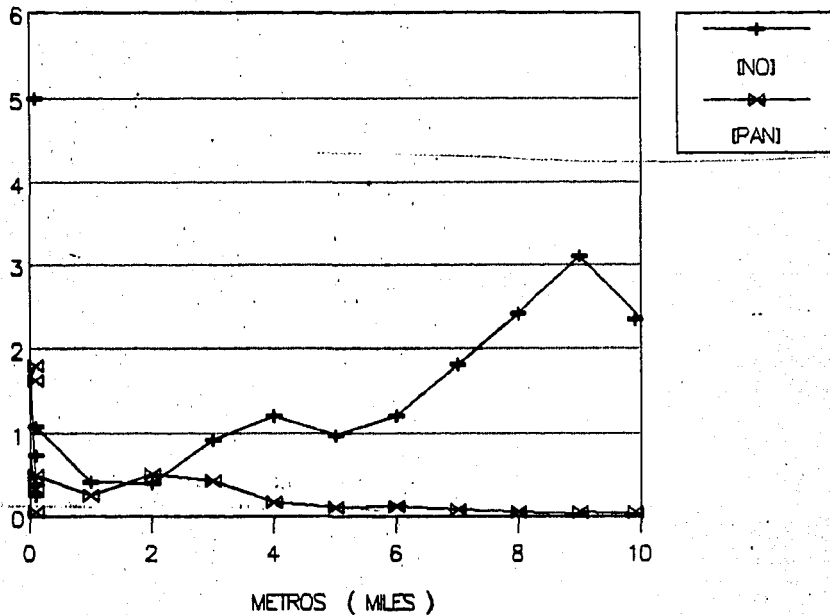


Tabla 5.9 .- Representación gráfica de la concentración de los óxidos de nitrógeno calculadas para el día 31/12/89 para una temperatura de 0 C

PARTES POR MILLON

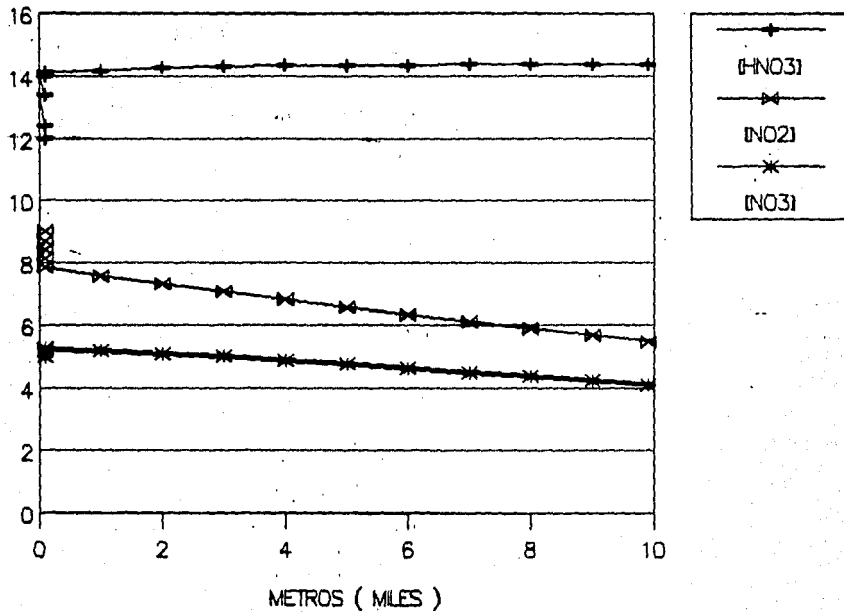


Tabla 5.9 .- Representación gráfica de la concentración de los óxidos de nitrógeno calculadas para el día 31/12/89 para una temperatura de 0 C

```

=====
)
)
) SECCION DE DATOS dia 31-12-89 (
)
)
) EMISION DE CONTAMINANTES ( g/s ) 777600 (
) TEMPERATURA ( GRADOS CENTIGRADOS ) 5 278.15 K (
) DISTANCIA AL PUNTO DE ANALISIS ( METROS ) 1000 (
) ALTURA DE INVERSION ( METROS ) 1024 )
) VELOCIDAD DEL VIENTO ( m/sin ) 114 (
) ALTURA DE INYECCION ( m ) 55 (
) REFLECTANCIA ( g/s ) 2.25 (
) ABSORBANCIA ( g/s ) 9.12 )
) ALTURA A LA QUE SE EFECTUA EL ANALISIS ( m ) 2 (
) CONCENTRACION INICIAL DE NO ( ppa ) 0.0009 )
) CONCENTRACION INICIAL DE OZONO ( ppa ) 0.11 (
) CONCENTRACION DE SOLIDOS SUSPENDIDOS (ppa) 0.0024 )
)
) UNIDADES = ppa/sin )
)
) k1= 3.6E-07 K14= 2894.122 K27= 1.2E-11 (
) k2= 0.001244 K15= 2660.435 K28= 1.12E-13 )
) k3= 143.4478 K16= 3738.99 K29= 1.2E-07 (
) k4= 73.55269 K17= 186.59 a5z= 0.1488 (
) k5= 12970.75 K18= 20.35767 a5Y= 0.09777 (
) k6= 2.167052 K19= 12670.75 b5z= 0.89085 (
) k7= 5070000 K20= 14596.44 b5Y= 102 (
) k8= 16285.13 K21= 0.027896 Sz = 70.00385 )
) k9= 470.9689 K22= 20.4194 SY = 199.77 (
) k10= 0.524399 K23= 57882.44 )
) k11= 2317.02 K24= 0.001369 (
) k12= 13230.27 K25= 6E-12 (
) k13= 0.59 K26= 1.72E-05 (
)
)
=====

```

TABLA 5.10 VALORES CALCULADOS DE LAS CONCENTRACIONES DE LOS OXIDOS DE NITROGENO Y LOS PRINCIPALES RADICALES LIBRES PARA EL DIA 31/12/89

FECHA DD/MM/AA	DISTANCIA m	[O]		[PAN]		[OH*]	[HO2]	[O3]	[HNO3]	[NO2]	[NO]	[NO3]
		ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm
		0.0002	0.002	0.0003		5	0.1124	12	9	5	5	
1/12/89	1000	2.00E-04	1.43E-04	2.57E-03	5.00	0.14	12.38	8.68E+00	0.395695	5.16		
1/12/89	2000	1.29E-10	8.37E-11	1.39E-02	5.00	1.20E-01	13.37	8.40E+00	0.254015	5.24		
1/12/89	3000	9.28E-11	7.93E-01	1.27E-02	5.01	1.21E-01	13.95	8.14E+00	0.698223	5.27		
1/12/89	4000	5.55E-11	2.24E-01	3.86E-03	5.01	9.00E-02	14.08	7.85E+00	1.038215	5.25		
1/12/89	5000	4.11E-11	1.18E-01	2.07E-03	5.01	1.11E-01	14.13	7.57E+00	0.400685	5.19		
1/12/89	6000	4.03E-11	2.37E-01	3.95E-03	5.01	8.87E-02	14.21	7.31E+00	0.385445	5.11		
1/12/89	7000	3.32E-11	2.04E-01	3.39E-03	5.01	5.72E-02	14.27	7.06E+00	0.866293	5.01		
1/12/89	8000	2.60E-11	7.32E-02	1.39E-03	5.01	1.02E-01	14.29	6.81E+00	1.143466	4.90		
1/12/89	9000	2.30E-11	5.20E-02	9.14E-04	5.01	9.00E-02	14.30	6.56E+00	0.59455	4.77		
1/12/89	10000	2.08E-11	5.74E-02	1.00E-03	5.01	9.13E-02	14.31	6.33E+00	1.094602	4.64		
1/12/89	11000	1.96E-11	4.14E-02	7.27E-04	5.01	1.20E-01	14.32	6.11E+00	1.654667	4.51		
1/12/89	12000	1.69E-11	2.43E-02	4.32E-04	5.01	9.20E-02	14.32	5.89E+00	2.15093	4.37		
1/12/89	13000	1.52E-11	1.67E-02	2.98E-04	5.01	8.40E-02	14.32	5.68E+00	2.726863	4.23		
1/12/89	14000	1.39E-11	1.19E-02	2.12E-04	5.01	7.60E-02	14.32	5.47E+00	2.024367	4.10		
1/12/89	15000	1.31E-11	1.43E-02	2.55E-04	5.01	5.90E-02	14.33	5.28E+00	2.318719	3.96		

PARTES POR MILLON

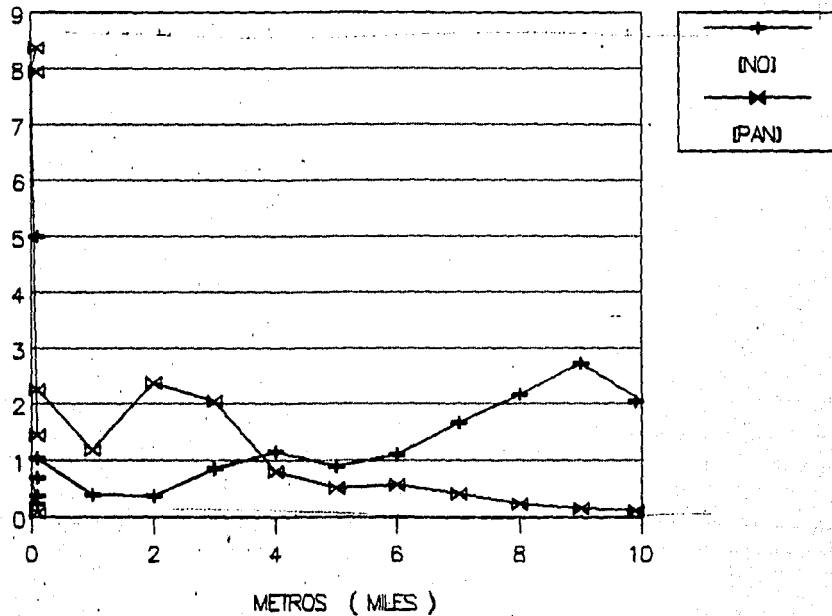


Tabla 5.10.- Representación gráfica de la concentración de los óxidos de nitrógeno calculadas para el día 31/12/89 para una temperatura de 5 C

PARTES POR MILLÓN

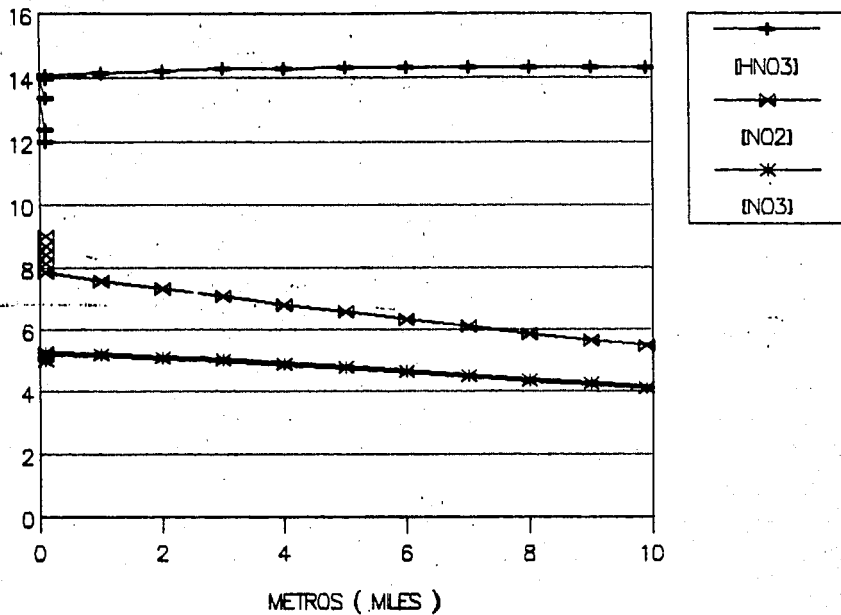


Tabla 5.10.- Representación gráfica de la concentración de los óxidos de nitrógeno calculadas para el día 31/12/89 para una temperatura de 5 C

```

=====
)
)
{          SECCION DE DATOS          dia 31-12-89
)
)
{  EMISION DE CONTAMINANTES ( g/m )      777600
)  TEMPERATURA ( GRADOS CENTIGRADOS )    15  288.15 K
)  DISTANCIA AL PUNTO DE ANALISIS ( METROS )    1000
)  ALTURA DE INVERSION ( METROS )             1024
)  VELOCIDAD DEL VIENTO ( m/min )             114
)  ALTURA DE INYECCION ( m )                 65
)  REFLECTANCIA ( g/s )                       2.25
)  ABSORBANCIA ( g/s )                        9.12
)  ALTURA A LA QUE SE EFECTUA EL ANALISIS ( m )    2
)  CONCENTRACION INICIAL DE NO ( ppa )         0.8099
)  CONCENTRACION INICIAL DE OZONO ( ppa )       0.11
)  CONCENTRACION DE SOLIDOS SUSPENDIDOS (ppa)  0.0024
)
)
)  UNIDADES = ppa/min
)
)  k1= 3.6E-07  K14= 2793.684  K27= 1.2E-11
)  k2= 0.001201  K15= 2568.107  K28= 1.28E-13
)  k3= 139.4695  K16= 3609.231  K29= 1.2E-07
)  k4= 76.36662  K17= 180.1145  aSz= 0.1488
)  k5= 12424.08  K18= 23.55054  aSY= 0.09777
)  k6= 2.248835  K19= 12424.08  bSz= 0.89085
)  k7= 5079000  K20= 14069.88  bSY= 102
)  k8= 15720.98  K21= 0.036556  Sz = 70.00885
)  k9= 454.6243  K22= 23.61847  SY = 199.77
)  k10= 1.81473  K23= 55873.68
)  k11= 1972.782  K24= 0.006526
)  k12= 12771.13  K25= 6E-12
)  k13= 0.59  K26= 9.09E-05
)
)
=====

```

**TABLA 5.11 VALORES CALCULADOS DE LAS CONCENTRACIONES DE LOS OXIDOS DE NITROGENO Y LOS PRINCIPALES RADICALES LIBRES PARA EL DIA 31/12/89**

FECHA	DISTANCIA	[O]	[PAN]	[OH*]	[HO2]	[O3]	[HNO3]	[NO2]	[NO]	[NO3]
DD/MM/AA	m	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm
1/12/89	1000	2.00E-04	2.75E-01	2.48E-03	5.00	0.1124	12	9	5	5
1/12/89	2000	1.31E-10	1.72E+00	1.37E-02	5.00	1.20E-01	13.29	8.40E+00	0.245136	5.24
1/12/89	3000	9.48E-11	1.71E+00	1.27E-02	5.01	1.21E-01	13.85	8.13E+00	0.642949	5.27
1/12/89	4000	5.67E-11	4.79E-01	4.03E-03	5.01	9.00E-02	13.98	7.84E+00	0.958425	5.25
1/12/89	5000	4.18E-11	2.49E-01	2.15E-03	5.01	1.11E-01	14.03	7.56E+00	0.368311	5.19
1/12/89	6000	4.15E-11	5.14E-01	4.12E-03	5.01	8.97E-02	14.11	7.30E+00	0.348925	5.11
1/12/89	7000	3.42E-11	4.51E-01	3.58E-03	5.01	8.72E-02	14.17	7.05E+00	0.793304	5.01
1/12/89	8000	2.65E-11	1.69E-01	1.45E-03	5.02	1.08E-01	14.19	6.50E+00	1.04082	4.87
1/12/89	9000	2.34E-11	1.10E-01	7.65E-04	5.02	9.00E-02	14.20	6.55E+00	0.779334	4.77
1/12/89	10000	2.13E-11	1.28E-01	1.10E-03	5.02	9.13E-02	14.22	6.32E+00	0.929211	4.64
1/12/89	11000	1.91E-11	7.41E-02	8.20E-04	5.02	1.20E-01	14.22	5.07E+00	1.398769	4.50
1/12/89	12000	1.73E-11	5.53E-02	4.91E-04	5.02	9.20E-02	14.23	5.87E+00	1.77262	4.36
1/12/89	13000	1.55E-11	3.69E-02	3.48E-04	5.02	8.40E-02	14.23	5.66E+00	2.168303	4.23
1/12/89	14000	1.42E-11	2.35E-02	2.56E-04	5.02	7.60E-02	14.23	5.46E+00	1.564855	4.09
1/12/89	15000	1.34E-11	3.55E-02	3.17E-04	5.02	5.90E-02	14.23	5.26E+00	1.744969	3.95

PARTES POR MILLON

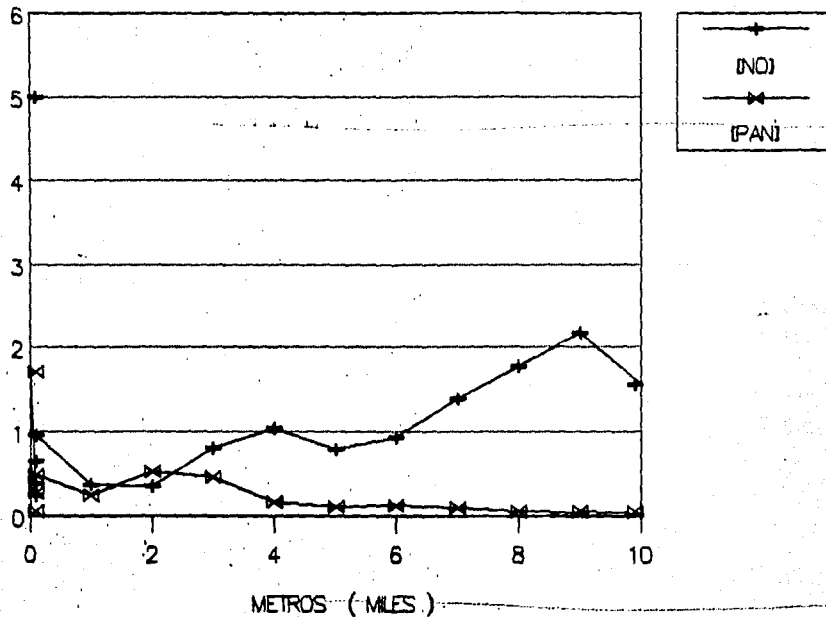


Tabla 5.11.- Representación gráfica de la concentración de los óxidos de nitrógeno calculadas para el día 31/12/89 para una temperatura de 15 C



PARTES POR MILLON

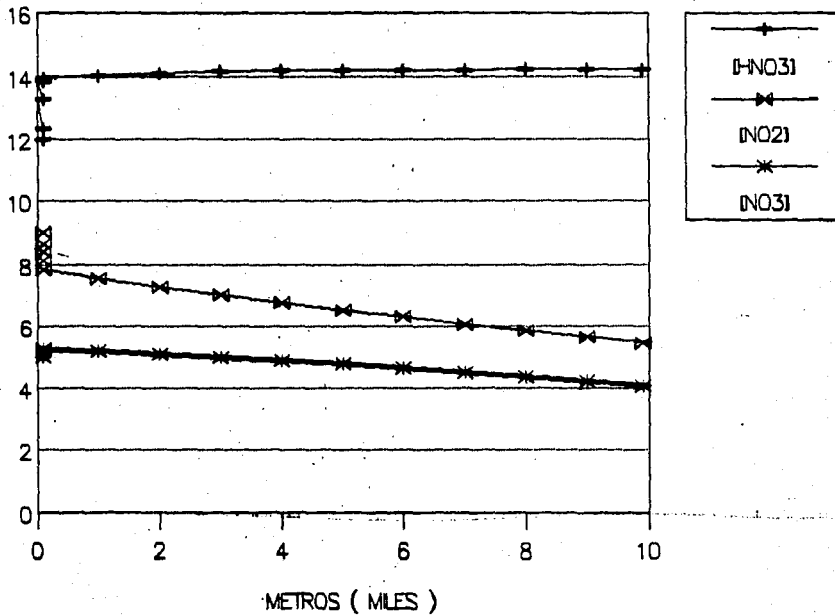


Tabla 5.11.- Representación gráfica de la concentración de los óxidos de nitrógeno calculadas para el día 31/12/89 para una temperatura de 15 C

```

=====
)
)
) SECCION DE DATOS dia 31-12-89 (
)
)
) EMISION DE CONTAMINANTES ( g/a ) 777500 (
) TEMPERATURA ( GRADOS CENTIGRADOS ) 20 293.15 K (
) DISTANCIA AL PUNTO DE ANALISIS ( METROS ) 1000 (
) ALTURA DE INVERSION ( METROS ) 1024 (
) VELOCIDAD DEL VIENTO ( m/min ) 114 (
) ALTURA DE INYECCION ( m ) 45 (
) REFLECTANCIA ( g/s ) 2.25 (
) ABSORBANCIA ( g/s ) 9.12 (
) ALTURA A LA QUE SE EFECTUA EL ANALISIS ( m ) 2 (
) CONCENTRACION INICIAL DE NO ( ppb ) 0.0007 (
) CONCENTRACION INICIAL DE OZONO ( ppb ) 0.11 (
) CONCENTRACION DE SOLIDOS SUSPENDIDOS (ppb) 0.0024 (
)
)
) UNIDADES = ppb*min (
)
) k1= 3.6E-07 K14= 2746.034 K27= 1.2E-11 (
) k2= 0.00118 K15= 2524.305 K28= 1.33E-13 (
) k3= 136.1078 K16= 3547.672 K29= 1.2E-07 (
) k4= 77.70429 K17= 177.0425 aS2= 0.1488 (
) k5= 12212.18 K18= 25.22344 aSY= 0.09777 (
) k6= 2.287685 K19= 12212.18 bS2= 0.89085 (
) k7= 5070000 K20= 13849.57 bSY= 102 (
) k8= 15452.84 K21= 0.04154 Sz = 70.00885 (
) k9= 446.8702 K22= 25.2962 SY = 199.77 (
) k10= 3.270343 K23= 54920.69 (
) k11= 1827.035 K24= 0.013689 (
) k12= 12553.3 K25= 6E-12 (
) k13= 0.59 K26= 0.0002 (
)
)
)
=====

```

TABLA 5.12 VALORES CALCULADOS DE LAS CONCENTRACIONES DE LOS OXIDOS DE NITROGENO Y LOS PRINCIPALES RADICALES LIBRES PARA EL DIA 31/12/89

FECHA DD/MM/AA	DISTANCIA m	[O]		[PAN]		[OH*]		[HO2]	[O3]	[HNO3]	[NO2]	[NO]	[NO3]
		ppb	ppb	ppb	ppb	ppb	ppb	ppb	ppb	ppb	ppb	ppb	ppb
		0.0002	0.002	0.0003				5	0.1124	12	9	5	5
1/12/89	1000	2.00E-04	1.25E-01	2.44E-03				5.00	0.14	12.34	8.68E+00	0.378119	5.16
1/12/89	2000	1.32E-10	7.92E-01	1.35E-02				5.00	1.20E-01	13.25	8.40E+00	0.241056	5.24
1/12/89	3000	9.58E-11	7.98E-01	1.27E-02				5.01	1.21E-01	13.80	8.12E+00	0.613222	5.27
1/12/89	4000	5.74E-11	2.27E-01	4.11E-03				5.01	9.00E-02	13.93	7.84E+00	0.922563	5.24
1/12/89	5000	4.21E-11	1.18E-01	2.20E-03				5.01	1.11E-01	13.99	7.56E+00	0.363235	5.19
1/12/89	6000	4.18E-11	2.40E-01	4.11E-03				5.02	8.87E-02	14.97	7.20E+00	0.333663	5.11
1/12/89	7000	3.47E-11	2.18E-01	3.47E-03				5.02	9.72E-02	14.13	7.04E+00	0.732811	5.00
1/12/89	8000	2.68E-11	9.32E-02	1.54E-03				5.02	1.08E-01	14.15	6.75E+00	0.974157	4.99
1/12/89	9000	2.37E-11	5.37E-02	1.91E-03				5.02	7.06E-02	14.16	6.55E+00	0.716177	4.77
1/12/89	10000	2.16E-11	6.34E-02	1.17E-03				5.02	9.13E-02	14.17	6.32E+00	0.837278	4.63
1/12/89	11900	1.94E-11	4.78E-02	9.90E-04				5.02	1.20E-01	14.18	6.09E+00	1.271089	4.50
1/12/89	12000	1.75E-11	2.77E-02	5.30E-04				5.02	9.20E-02	14.18	5.87E+00	1.606295	4.36
1/12/89	13000	1.56E-11	1.95E-02	3.76E-04				5.02	8.40E-02	14.19	5.64E+00	1.920039	4.23
1/12/89	14000	1.43E-11	1.46E-02	2.83E-04				5.02	7.60E-02	14.19	5.46E+00	1.372892	4.09
1/12/89	15000	1.35E-11	1.84E-02	3.54E-04				5.02	5.90E-02	14.19	5.25E+00	1.522782	3.95

PARTES POR MILLON

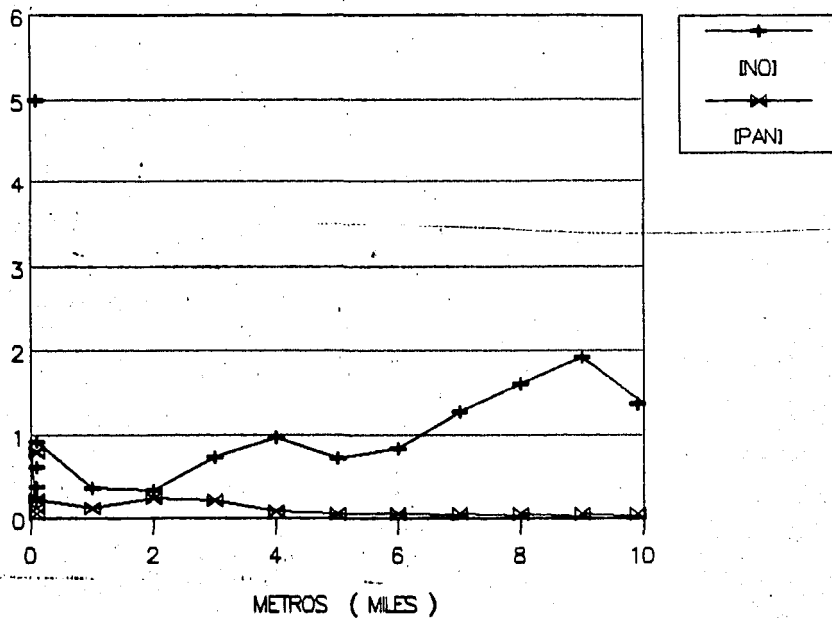


Tabla 5.12.- Representación gráfica de la concentración de los óxidos de nitrógeno calculadas para el día 31/12/89 para una temperatura de 20 C

PARTES POR MILLON

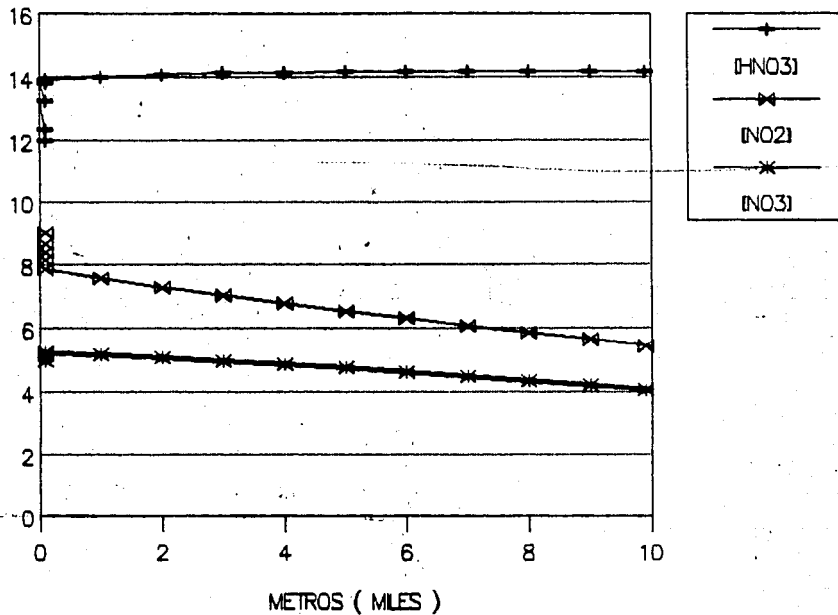


Tabla 5.11.- Representación gráfica de la concentración de los óxidos de nitrógeno calculadas para el día 31/12/89 para una temperatura de 20 C

## DISCUSION DE RESULTADOS

- 1 ) Los valores teóricos calculados através del modelo se utilizan como proyecciones de referencia considerando el caso hipotético de que la emisión de contaminantes equivalente a la emisión de un día de operación de una planta de refinación de petróleo se realiza en un minuto ya que los datos reportados por SEDUE son lecturas de concentración promedio durante 24 horas por lo que la distribución espacial de contaminantes no es representativa .
  
- 2 ) Los resultados obtenidos através de la simulación fueron utilizados para realizar un análisis de sensibilidad en el cuál el parámetro variado fué la temperatura, através de este análisis se encontró que los cambios más significativos en la variación de temperaturas se verifica a bajas temperaturas. Utilizando incrementos discretos (  $5^{\circ}\text{C}$  ) se obtienen variaciones de concentraciones de hasta el 100 % en el intervalo de temperaturas comprendido entre  $0^{\circ}\text{C}$  y  $15^{\circ}\text{C}$  . A temperaturas superiores el sistema de contaminantes se dispersa favoreciendo la formación de contaminantes más estables los cuales pueden depositarse con mayor rapidez o en su defecto agruparse y viajar mayores distancias. Los cambios que se producen sobre la concentración de los contaminantes son drásticos y el componente que presenta mayor variación en la concentración calculada durante el análisis es el peróxiacetilnitrato ( PAN ) que muestra una dependencia notable

con la concentración de ozono y a su vez de la relación de concentración de NO y NO<sub>2</sub>, así como del tiempo de viaje y de la temperatura, es decir es un contaminante típico y que puede servir para medir el cambio de concentración de la contaminación fotoquímica y a la vez ser un indicador indirecto de la concentración de ozono es el PAN .

3.) El resultado mas importante de este analisis es que la mayor concentracion de los contaminantes inyectados a la atmósfera, se presenta en zonas bastante alejadas de la fuente emisora, lo que puede explicar en cierta medida la no homogeneidad de las lecturas de concentración de contaminantes realizada por SEDUE.

Sin embargo, este comportamiento no es el esperado para los NO<sub>x</sub> según los mismos reportes Las corridas de simulación efectuadas con el modelo propuesto, muestran que un aumento en la concentración de contaminantes nitrogenados se relaciona con la disminución de la concentración de ozono. Así como un aumento de temperatura favorece la formación de estratos con grandes contenidos de nitratos y la disminución de ozono y NO<sub>x</sub>. Debido a que los compuestos con nitrógeno absorben la luz solar formando ozono o lo consumen para formar contaminantes secundarios, hasta alcanzar una concentración de equilibrio que es determinada por la temperatura , la humedad , la presión y una serie de factores fisicoquímicos como el pH .

4 ) la linealidad observada en la concentración de los contaminantes a temperaturas superiores de 20 C durante distancias relativamente grandes , así como concentraciones muy bajas de los componentes mas reactivos y concentraciones altas y constantes de los componentes más estables indican que el comportamiento químico de cada contaminante es determinante para la velocidad de dispersión así como la estabilidad del sistema .

5 ) Las tablas 5.1,5.2 ,5.5 , 5.6 ,5.9 y 5.11 muestran de manera gráfica que los períodos de mayor riesgo para los habitantes de las áreas urbanas, son aquellos en los que la temperatura promedio, es de 5 grados centígrados y que los efectos de la columna de contaminantes emitida tienen un máximo para condiciones de concentración de ozono variable cerca de los 2,000 metros de distancia de la fuente emisora . Las condiciones de turbulencia aseguran una agitación perfecta del fluido , por lo que la transferencia de masa , calor y de movimiento es máxima, esto indica que el paso controlante del proceso es la velocidad de reacción

6) La caracterización de cada uno de los días fué realizada através de las estadísticas reportadas por SEDUE y es importante hacer notar que la estabilidad de el ión  $\text{NO}_x$  disminuye, conforme aumenta la temperatura y que su concentración disminuye aproximadamente a los tresmil metros de viaje por lo que es de esperarse una mayor

cantidad de esta especie en el período nocturno. Por lo que la fijación de nitrógeno sobre la corteza terrestre deberá ser mayor en periodos nocturnos aumentando el pH del suelo, depositándose en forma de nitrato de amonio .

7 ) El ácido nítrico aumenta rápidamente y después de una distancia de seis mil metros promedio se estabiliza y permanece en niveles casi constantes durante el período de análisis. Lo que permite concluir que el mecanismo de depositación más importante para estos contaminantes es el de depositación húmeda. Por lo que solo en el caso de que se presenten precipitaciones pluviales los niveles de concentración serán afectados de manera apreciable .

8 ) El comportamiento del perfil de concentraciones de los contaminantes muestra que no hay homogeneidad de temperaturas en el espacio de estudio. Por lo que la distribución de los contaminantes . no es continua sobre todo el espacio modelado .

9 ) El óxido nítrico muestra en las tablas generadas, un aumento en su concentración a distancias lejanas de la fuente emisora ya que después del viaje los gases se enfrían y tienden a retomar un equilibrio térmico restando reactividad al óxido nítrico .



## CONCLUSIONES

- 1 ) El sistema natural es el medio que rodea a un conjunto de organismos , hechos ó procesos que se realizan en un espacio y tiempo definidos .
- 2 ) La contaminación mas que un concepto científico , es un término legal que se usa para describir la presencia en el ambiente de uno o más elementos que alteran el equilibrio ecológico del medio a tal grado que se considera no apropiado para el uso para el cuál fué diseñado .
- 3 ) Los compuestos designados bajo las siglas  $\text{NO}_x$  son compuestos que tienen un comportamiento fotoquímico muy importante y que determinan de manera significativo la variación de la concentración de ozono en la atmósfera urbana por lo que su reducción de manera controlada y racional es determinante para la reducción de los niveles de concentración de ozono . La distribución y transporte de estos compuestos debe ser incluido en el modelo de simulación para lograr la predicción mas precisa de los perfiles de concentración de contaminantes esperados en una región determinada .
- 4 ) Este trabajo propone el uso de un modelo ideal para el cálculo de la concentración de contaminantes através de la aplicación

de balances de masa y energía , comportamiento cinético simplificado de las especies que hace explícito el problema y a la vez permite que se consideren una serie de combinaciones de problemas que actúan recíprocamente y además lo hacen con una orientación prospectiva, mas que retrospectiva complementandose y aumentando el conocimiento sobre el sistema.

5 ) El uso de proyecciones de referencia, es decir, el uso de un conjunto de extrapolaciones de las tendencias más probables, bajo la suposición de que ninguna causa externa cambiará el curso del fenómeno, permite encontrar relaciones causales entre los diferentes componentes del sistema físico y el sistema contaminante. Lo que lleva a un mayor entendimiento de su comportamiento en conjunto.

6 ) Es imprescindible el que se realice un mapeo geológico, meteorológico y geográfico tanto físico, como urbano de la Ciudad de México, ya que los efectos que una fuente contaminante tiene sobre el ecosistema, no son inmediatos ni son fáciles de localizar geográficamente, debido a que las mayores repercusiones de algunos contaminantes, no son notorias cerca de la fuente emisora .

7 ) Para que la simulación proporcione información eficiente requiere de información precisa del sistema físico que se

estudia; así como la trayectoria que sigue la masa contaminante por lo que ésta se debe fijar de manera convencional antes de iniciar la simulación y se puede reconocer como un grado de libertad de diseño .

8 ) La investigación realizada sobre el problema de la contaminación ambiental debe ser dirigida y crítica para poder redefinir la base de la cual se parte; ya que es un problema que depende del valor inicial que tome cada una de las variables y de la uniformidad de los valores que tome durante el todo el período de análisis .

9 ) El peróxiacetilnitrato ( PAN ) es un contaminante que tiene un origen 100 % antropogénico, y sería mas convenienté medir la contaminación fotoquímica, através de los niveles de concentración de este contaminante, en lugar de utilizar las medidas de puntos o concentración de ozono que se obtienen actualmente , ya que el  $O_3$  es un componente de origen natural que se encuentra frecuentemente en la atmósfera y sería mas importante tratarlo, como contaminante relevante por sí mismo ya que es un elemento determinante en el cambio de las características ambientales de un microsistema .

10 ) Debido a la existencia de islas térmicas no se presenta una homogeneidad de la longitud de mezclado en el sistema de

vientos del Distrito Federal así como por su delimitación geográfica .

Esto lleva a proponer las siguientes modificaciones:

a ) Establecer una temperatura potencial entre estratos que se pueda calcular apartir de parámetros tales como el número de Richardson.

b ) Establecer la independencia de los parámetro temperatura - espacio lo que provoca que la dimensión del problema se duplique con el consecuente aumento en el tiempo de cálculo de las constantes de reacción y las concentraciones En este último punto, se duplica la matriz velocidad de reacción y la matriz que define la posición en el espacio de la masa de contaminantes ,con el consecuente aumento en el número de grados de libertad que definen al sistema .

Por lo que se puede aprovechar para determinar el comportamiento de el ozono através de una matriz c dimensional, donde c representa el número de componentes que reaccionan con el ozono, multiplicado por su vector posición ( $\vec{r}$ ) esta combinación requiere de c-1 grados de libertad multiplicada por el número de repeticiones en los sistemas de cálculo para contaminantes como los  $\text{NO}_2$  ,  $\text{NO}$  ,  $\text{NO}_3^-$  ,  $\text{HNO}_3$  ,  $\text{SO}_4^{2-}$  ,  $\text{SO}_3^-$  ,  $\text{CO}$  ,  $\text{CO}_2$  y restando R que es el número de componentes cuya reactividad es muy alta y para los cuáles podemos aplicar el

principio del estado estacionario  $\frac{dR}{dt}=0$  teniendo por lo tanto un número de grados de libertad de  $7c+2n-9$ , los cuales representan el número de variables que debemos conocer o valores que se deben fijar para que el sistema esté perfectamente definido .

11 ) El sistema de mediciones implementado por SEDUE es muy sencillo y fácil de entender; pero los niveles de exposición máxima que maneja no se ajusta a los niveles determinados por la EPA o la OSHA . Es realmente cuestionable el uso de concentraciones ponderadas en tiempo y en espacio de un conjunto de contaminantes reportados de manera confusa . El reportar una concentración promedio de ésta forma limita y a la vez deforma el verdadero sentido de realizar estas mediciones ya que sólo informan la tendencia central de una lectura cuyo valor es muy discutible y además no dan las lecturas máximas ni mínimas en un área mas pequeña y realmente representativa para efectos del estudio .

12 ) Es necesario que la Secretaria de Desarrollo Urbano y Ecología muestre un mayor interés en comunicar a los ciudadanos de los niveles de contaminantes de una manera mas eficiente y rápida ya que así la población podría evitar

realizar acciones que impliquen un riesgo mayor a la salud .

- 13) Existe la tendencia ,al trabajar con problemas tan complejos como el de la contaminación ,a contraer el sistema de análisis, para lograr una mayor sencillez en la manipulación del mismo. Sin embargo con la contracción del sistema existe un aumento en el número de la variables consideradas como incontrolables, en el caso contrario, por lo general disminuyen estas variables al aumentar el tamaño del sistema ya que la falta de control sobre estas no se basa en la naturaleza intrínseca de la variable si no en la falta de conocimiento y comprensión que se tenga de su naturaleza .

A partir del análisis y problemática asociada al fenómeno de contaminación el gobierno de la Ciudad de México adoptó una serie de medidas con el fin de abatir la contaminación atmosférica en el valle de México algunas de ellas fueron propuestas dentro de este trabajo después de efectuar el análisis .

Estas medidas son :

- 1 ) Reforzar las tareas de inspección en la industria incrementando el número de inspecciones a 1236 industrias es decir 234 más que el año pasado
- 2 ) Incorporar al movimiento obrero a la lucha contra la contaminación

- 3 ) SEDUE creará la dirección de inspección ambiental de la industria, para supervisar, controlar y sancionar a los establecimientos que violen las normas .
- 4 ) Se canalizará a través de Nafinsa un fondo de 300 mil millones de pesos para apoyar a los industriales en la adquisición e instalación de equipo anticontaminante y mejora de los procesos.
- 5 ) SEDUE dará a conocer cada hora el índice metropolitano de calidad del aire ( IMECA ) . En el diseño de este servicio participarán científicos y organizaciones no gubernamentales .
- 6 ) Se integrará el consejo técnico de la calidad del aire, para verificar los métodos de medición del aire y la exactitud de la información que se divulga .
- 7 ) Se realizará la ampliación y reforzará la red de monitoreo atmosférico mediante una inversión de 7 mil 500 millones de pesos y 3 mil millones mas para la instalación de un servicio de pronóstico atmosférico, instalando tableros electrónicos en cada zona en que se reporta el IMECA .
- 8 ) La secretaría de comunicaciones y transporte y la de desarrollo Urbano y ecología reforzarán el programa de verificación del transporte público federal de carga y pasajeros .

- 9) Se reforzarán las normas técnicas ecológicas de verificación vehicular y la disposición de residuos peligrosos regulándose el uso del convertidor catalítico. Se aplicará el nuevo reglamento para la prevención de la contaminación del agua .
- 10) Se revisará en forma conjunta el programa de contingencias para tener un mejor conjunto de alternativas en caso de emergencias ecológicas.
- 11) No se permitirá la instalación de empresas contaminantes en el territorio nacional.



## APENDICE I

```

:   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :
: MODELO DE DISPERSION DE CONTAMINANTES :
: NOMBRE DEL ARCHIVO : MODELO.WKO :
: CREADO POR : JOSE ANTONIO MONTOYA ZURITA 15/05/90 :
: ULTIMA MODIFICACION : 16/07/90 :
:   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :   :

```

LA PRESENTE HOJA DE TRABAJO EFECTUA EL CALCULO DE LA CONCENTRACION DE LAS SIGUIENTES ESPECIES CONTAMINANTES DE LA ATMOSFERA :

OXIDO NITRICO	( NO )
DIOXIDO DE NITROGENO	( NO2 )
ACIDO NITRICO	( HNO3 )
RADICAL HIDROPEROXIDO	( HO2' )
NITRATO DE PEROXIACETIL	( PAN )
OXIGENO ATOMICO	( O )
RADICAL HIDROXILO	( OH' )
NITRATOS	( NO3 )

LA PRIMERA PARTE DE LA HOJA CONSISTE DE LA SECCION DE DATOS, EN LA QUE SE ESTABLECEN LAS CONDICIONES INICIALES CON LAS QUE SE INICIA EL CALCULO ASI COMO EL VALOR DE LAS CONSTANTES DE VELOCIDAD DE REACCION DETERMINADAS EN FUNCION DE LA TEMPERATURA :

LA SEGUNDA PARTE DE LA HOJA ESTA CONSTITUIDA POR EL SISTEMA DE CALCULO DEL TIEMPO DE VIAJE COMO UNA FUNCION DE LA VELOCIDAD DEL VIENTO Y DE LA DISTANCIA A LA CUAL SE REALIZA EL ANALISIS, SE CALCULAN LOS COEFICIENTES DE DISPERSION TRANSVERSAL Y AXIAL (  $S_x$  ,  $S_y$  ) QUE SON FUNCIONES DE LA DISTANCIA DEL PUNTO DE EMISION Y EL PUNTO DE ANALISIS Y DE LA VELOCIDAD DEL VIENTO ( EL CUAL DETERMINA EL TIPO DE ESTABILIDAD ATMOSFERICA )

LA TERCERA PARTE ES LA SECCION DE EVALUACION DE LA RAPIDEZ DE REACCION PARA CADA UNO DE LOS COMPONENTES ASI COMO LA EVALUACION DE LA CONCENTRACION DEL CONTAMINANTE ATRAVES DE UN MODELO BASADO EN EL PRINCIPIO DE DIFUSION

```

=====
)
)
)          SECCION DE DATOS          dia  1-12-89
)          ~~~~~
)  EMISION DE CONTAMINANTES ( g/m ) ,          777600
)  TEMPERATURA ( GRADOS CENTIGRADOS )          20  293.15 K
)  DISTANCIA AL PUNTO DE ANALISIS ( METROS )    1000
)  ALTURA DE INVERSION ( METROS )             1024
)  VELOCIDAD DEL VIENTO ( m/min )              114
)  ALTURA DE INYECCION ( m )                  65
)  REFLECTANCIA ( g/s )                       2.25
)  ABSORBANCIA ( g/s )                        9.12
)  ALTURA A LA QUE SE EFECTUA EL ANALISIS ( m ) 2
)  CONCENTRACION INICIAL DE NO ( ppm )         0.0009
)  CONCENTRACION INICIAL DE OZONO ( ppm )      0.11
)  CONCENTRACION DE SOLIDOS SUSPENDIDOS (ppm)  0.0024
)
)          UNIDADES = ppm/min
)
)  k1=  3.6E-07  K14= 2746.034  K27=  1.2E-11
)  k2=  0.00110  K15= 2524.305  K28=  1.33E-13
)  k3=  136.1078  K16= 3547.672  K29=  1.2E-07
)  k4=  77.70429  K17= 177.0425  aSz=  0.1488
)  k5=  12212.18  K18= 25.22344  aSY=  0.09777
)  k6=  2.287685  K19= 12212.18  bSz=  0.69085
)  k7=  5070000   K20= 13849.57  bSY=  102
)  k8=  15452.84  K21=  0.04154  Sz =  70.00885
)  k9=  446.8702  K22=  25.2962  SY =  199.77
)  k10= 3.270343  K23= 54920.69
)  k11= 1827.035  K24=  0.013689
)  k12= 12553.3  K25=  6E-12
)  k13=  0.59    K26=  0.0002
)
=====

```

TABLA 5.4 VALORES CALCULADOS DE LAS CONCENTRACIONES DE LOS OXIDOS DE NITROGENO Y LOS PRINCIPALES RADICALES LIBRES PARA EL DIA 1/12/89

FECHA	DISTANCIA	[O]	[PAN]	[OH*]	[HO2]	[O3]	[HNO3]	[NO2]	[NO]	[NO3]
DD/MM/AA	a	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm
1/12/89	1000	0.00E+00	ERR	ERR	ERR	0.14	ERR	ERR	ERR	ERR
1/12/89	2000	ERR	ERR	ERR	ERR	1.20E-01	ERR	ERR	ERR	ERR
1/12/89	3000	ERR	ERR	ERR	ERR	1.19E-01	ERR	ERR	ERR	ERR
1/12/89	4000	ERR	ERR	ERR	ERR	9.00E-02	ERR	ERR	ERR	ERR
1/12/89	5000	ERR	ERR	ERR	ERR	1.11E-01	ERR	ERR	ERR	ERR
1/12/89	6000	ERR	ERR	ERR	ERR	1.02E-01	ERR	ERR	ERR	ERR
1/12/89	7000	ERR	ERR	ERR	ERR	1.05E-01	ERR	ERR	ERR	ERR
1/12/89	8000	ERR	ERR	ERR	ERR	1.08E-01	ERR	ERR	ERR	ERR
1/12/89	9000	ERR	ERR	ERR	ERR	1.10E-01	ERR	ERR	ERR	ERR
1/12/89	10000	ERR	ERR	ERR	ERR	9.13E-02	ERR	ERR	ERR	ERR
1/12/89	11000	ERR	ERR	ERR	ERR	1.20E-01	ERR	ERR	ERR	ERR
1/12/89	12000	ERR	ERR	ERR	ERR	1.35E-01	ERR	ERR	ERR	ERR
1/12/89	13000	ERR	ERR	ERR	ERR	1.70E-01	ERR	ERR	ERR	ERR
1/12/89	14000	ERR	ERR	ERR	ERR	1.60E-01	ERR	ERR	ERR	ERR
1/12/89	15000	ERR	ERR	ERR	ERR	1.93E-01	ERR	ERR	ERR	ERR

## APENDICE II

### CALCULO DE LA ALTURA DE INVERSION

La estación meteorológica del aeropuerto internacional de la ciudad de México ( RAMSA ) Proporcionó los datos de radiosondeos para el año de 1985 consistentes en valores de temperatura y presión tomadas a cuatro diferentes alturas dos veces al día .

El primer paso en la determinación de la altura de inversión consiste en determinar cuatro alturas a partir de los cuatro pares de valores de presión y temperatura para lo cual se utiliza la ecuación de equilibrio hidrostático «a»

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + g = 0$$

Sustituyendo en ella la expresión de los gases ideales :

$$p = \rho RT$$

se obtiene :

$$z = - \frac{R}{g} \int \frac{T dp}{P}$$

El primer valor de la altura es cero ya que la referencia es el nivel del suelo .

Como el espacio consecutivo entre los valores medidos de presión y temperatura no es uniforme se puede aproximar la integral mediante la siguiente serie algebraica :

$$z(i+1) = z(i) + 29.82 \left[ \frac{p(i) - p(i+1)}{2} \right] \left[ \frac{T(i)}{p(i)} + \frac{T(i+1)}{p(i+1)} \right]$$

Esta función permite el calculo de la altura de inversión por

aproximación sucesiva .

TABLA DE TEMPERATURAS EN FUNCIÓN DE LA ALTURA DEL RADIOSONDEO  
PROMEDIADAS DURANTE EL PERIODO ESTACIONAL DICIEMBRE - FEBRERO 1990

h m	$\bar{t}$ °C
0	7.3
250	6.0
500	5.3
1,000	3.2

como los datos obtenidos son discretos se propone un polinomio de interpolación de temperatura de la forma :

$$T = AZ^3 + BZ^2 + CZ + D$$

R	A	B	C
-1.3	15.625	6.25	2.5
-2.0	125.0	25.0	5.0
-4.1	1,000.0	100.0	10.0

Resolviendo este sistema de ecuaciones para determinar el valor de las constantes A , B , C , D

$$A = 0.0079$$

$$B = 0.0122$$

$$C = -0.6005$$

se obtiene D = 7.3 de la condición a la frontera z=0 para t promedio de 7.3 ° C

Sustituyendo en el polinomio de interpolación se obtiene :

$$T = 0.0079 Z^3 + 0.0122 Z^2 - 0.6005 Z + 7.3$$

Z esta en unidades por cada 100 metros es decir altura en metros/100 sustituyendo en nuestro polinomio de integración se obtiene una altura de inversión de 1,040 metros lo cual indica una disminución en la altura de la capa formada por los contaminantes que en periodos de alta estabilidad refleja los rayos solares por lo que aumenta la concentración de los contaminantes en niveles inferiores .

Considerando que la absorción del contaminante en la tierra tiene un valor constante durante largos períodos de estabilidad iterando valores hasta obtener las raíces del polinomio fundamental :

$$\beta = \lambda \tan ( 1040 \lambda )$$

$$\text{para el CO}_2 \quad \beta = 3.72 \cdot 10^{-2}$$

$\lambda = 2.251$  con un error en la aproximación de la función de .37 %  
para el SO<sub>2</sub>  $\beta = 6.79 \cdot 10^{-4}$

$\lambda = 2.25$  con un error en la aproximación de la función de .34 %

El NO<sub>2</sub> tiene un coeficiente de absorción de 2.25 sólo que disminuye también por efecto de la fijación en el medio ambiente por lo que su constante de absorción total será la suma de la absorción física mas la contribución de la fijación natural que depende de la tasa de insolación es decir de la cantidad de radiaciones que llegan a la superficie terrestre .

Datos de concentraciones de contaminantes  
 DICIEMBRE 1989

DIA	ZONA					CONTAMINANTE
	NOROESTE	NORESTE	CENTRO	SUROESTE	SURESTE	OZONO (O3) INECAS
1	128	83	101	129	42	
2	133	63	75	64	85	
3	16	20	13	11	45	
4	175	116	89	73	91	
6	163	93	84	119	152	
7	80	42	62	45	46	
8	18	22	24	25	49	
11	115	144	13	56	70	
12	216	78	49	98	107	
13	173	121	56	64	70	
14	177	146	87	160	150	
15	154	126	54	92	110	
16	157	117	87	126	135	
17	89	80	25	72	56	
18	152	95	59	111	72	
19	123	101	105	107	143	
20	158	98	63	134	129	
21	165	92	109	134	131	
22	187	124	87	149	116	
23	41	49	50	67	98	
24	107	74	114	214	156	
25	81	104	78	105	117	
26	95	98	82	172	132	
27	136	86	102	97	115	
28	157	94	96	145	115	
29	113	83	84	116	116	
30	107	80	71	84	128	
31	109	102	81	85	58	

DICIEMBRE 1989  
DIA

	ZONA					CONTAMINANTE
	NOROESTE	NORESTE	CENTRO	SUROESTE	SURESTE	OZONO (O3)
1	0.145533	0.093783	0.114483	0.146683	0.046633	ppm
2	0.151283	0.070783	0.084583	0.071933	0.096083	
3	0.016733	0.021333	0.013283	0.010983	0.050083	
4	0.199583	0.131733	0.100583	0.082283	0.102983	
5	0.185783	0.105283	0.094933	0.135183	0.173133	
7	0.090333	0.075533	0.069633	0.050083	0.051233	
8	0.019033	0.021333	0.025933	0.027083	0.054683	
11	0.130583	0.123933	0.013283	0.062733	0.078833	
12	0.246733	0.088033	0.054683	0.111033	0.121383	
13	0.197283	0.137483	0.062733	0.071933	0.078933	
14	0.201883	0.166233	0.098383	0.182333	0.170833	
15	0.175433	0.143233	0.060433	0.104133	0.124933	
16	0.178883	0.132883	0.098383	0.143233	0.153583	
17	0.100683	0.090333	0.027083	0.081133	0.062733	
18	0.173133	0.107583	0.066133	0.125983	0.081133	
19	0.159783	0.114483	0.119083	0.121383	0.162783	
20	0.180033	0.111033	0.070783	0.152433	0.146683	
21	0.188083	0.104133	0.123683	0.152433	0.148983	
22	0.213383	0.140933	0.098383	0.169683	0.131733	
23	0.045483	0.054683	0.055833	0.075383	0.111033	
24	0.121383	0.083433	0.129433	0.244433	0.177733	
25	0.091483	0.117933	0.088033	0.119083	0.132883	
26	0.107583	0.111033	0.092633	0.196133	0.150133	
27	0.154733	0.097233	0.115633	0.109883	0.130583	
28	0.178883	0.106433	0.108733	0.165083	0.130583	
29	0.128283	0.093783	0.094933	0.131733	0.131733	
30	0.121383	0.090333	0.079983	0.094933	0.145533	
31	0.123683	0.115633	0.091483	0.096083	0.065033	



DIA	ZONA					CONTAMINANTE	
	NOROESTE	NORESTE	CENTRO	SUROESTE	SURESTE	dioxido de azufre	(MECAS)
1	40	57	41	47	62		
2	50	47	39	44	42		
3	37	38	41	43	39		
4	35	40	31	44	38		
6	48	31	29	50	113		
7	47	46	33	42	47		
8	35	40	37	52	50		
11	36	34	27	40	35		
12	37	41	22	38	36		
13	41	48	18	41	37		
14	54	58	31	50	53		
15	45	56	30	45	31		
16	46	52	30	44	41		
17	33	37	23	39	33		
18	35	82	20	40	36		
19	44	53	27	47	55		
20	47	58	29	51	45		
21	47	54	28	47	36		
22	48	53	27	54	41		
23	44	52	47	59	55		
24	45	39	31	56	43		
25	49	42	39	54	46		
26	48	48	30	59	35		
27	44	47	30	56	50		
28	46	47	30	47	42		
29	39	38	21	43	41		
30	29	34	12	39	25		
31	27	28	15	37	26		

DIA	ZONA					CONTAMINANTE
	NOROESTE	NORESTE	CENTRO	SUROESTE	SURESTE	dioxido de azufr
1	0.06	0.0855	0.0615	0.0705	0.093	ppm
2	0.075	0.0735	0.0585	0.066	0.063	
3	0.0555	0.057	0.0615	0.0645	0.0585	
4	0.0525	0.06	0.0465	0.066	0.057	
5	0.072	0.0765	0.0435	0.075	0.1695	
7	0.0705	0.069	0.0495	0.063	0.0705	
8	0.0525	0.06	0.0555	0.078	0.075	
11	0.054	0.051	0.0405	0.06	0.0525	
12	0.0555	0.0615	0.033	0.057	0.054	
13	0.0615	0.072	0.027	0.0615	0.0555	
14	0.081	0.087	0.0465	0.075	0.0795	
15	0.0675	0.084	0.045	0.0675	0.0465	
16	0.069	0.078	0.045	0.066	0.0615	
17	0.0495	0.0555	0.0345	0.0585	0.0495	
18	0.0525	0.123	0.03	0.06	0.054	
19	0.066	0.0795	0.0405	0.0705	0.0825	
20	0.0705	0.087	0.0435	0.0765	0.0675	
21	0.0705	0.081	0.042	0.0705	0.054	
22	0.072	0.0795	0.0405	0.081	0.0615	
23	0.066	0.078	0.0705	0.0885	0.0825	
24	0.0675	0.0585	0.0465	0.084	0.0645	
25	0.0735	0.063	0.0585	0.081	0.069	
26	0.072	0.072	0.045	0.0885	0.0525	
27	0.066	0.0705	0.045	0.084	0.075	
28	0.069	0.0705	0.045	0.0705	0.063	
29	0.0585	0.057	0.0315	0.0645	0.0615	
30	0.0435	0.051	0.018	0.0585	0.0375	
31	0.0405	0.042	0.0225	0.0555	0.039	

DIA	ZONA					CONTAMINANTE
	NOROESTE	NORESTE	CENTRO	SUROESTE	SURESTE	dioxido de Nitrogeno INECAS
1	14	17	34	45	22	
2	31	22	34	55	37	
3	20	14	35	22	23	
4	31	26	39	46	27	
6	40	26	50	79	41	
7	25	21	37	39	21	
8	19	17	13	31	24	
11	29	35	13	14	21	
12	31	23	25	11	24	
13	37	28	24	20	28	
14	102	44	46	18	63	
15	71	43	24	18	49	
16	82	38	20	12	43	
17	35	27	24	9	26	
18	28	26	32	13	37	
19	80	25	33	17	44	
20	60	28	27	19	34	
21	72	38	28	13	33	
22	40	30	32	21	34	
23	21	27	16	13	36	
24	35	17	26	10	42	
25	16	21	23	5	50	
26	31	25	33	10	56	
27	33	55	38	14	65	
28	33	41	46	11	82	
29	28	41	44	40	71	
30	26	32	108	6	35	
31	11	21	16	3	28	

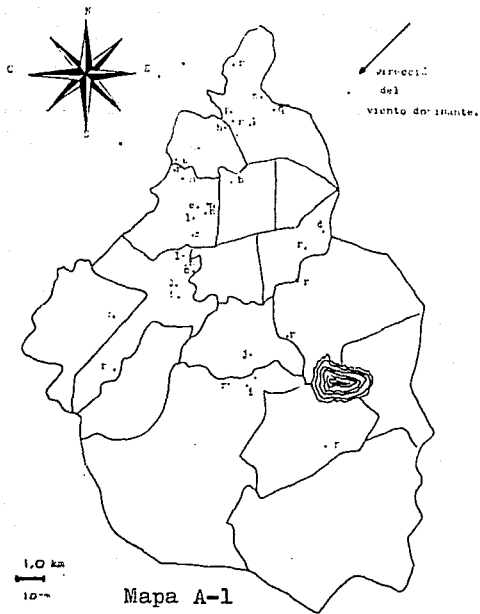
DIA

	NORDESTE	NORESTE	ZONA CENTRO	SUROESTE	SURESTE	CONTAMINANTE dioxido de Nitro
1	0.006662	0.056657	0.073322	0.109983	0.033326	ppm
2	0.063323	0.033326	0.073322	0.143315	0.083321	
3	0.026666	0.006662	0.043325	0.033326	0.036659	
4	0.129983	0.046658	0.089987	0.113318	0.049991	
5	0.09332	0.046658	0.12665	0.223307	0.096653	
7	0.043325	0.029993	0.083321	0.089987	0.029993	
8	0.023327	0.016661	0.003329	0.063323	0.039992	
11	0.056657	0.076655	0.009995	0.006662	0.029993	
12	0.063323	0.036659	0.043325	-0.00334	0.039992	
13	0.083321	0.053324	0.039992	0.026666	0.053324	
14	0.299966	0.106652	0.113318	0.019994	0.169979	
15	0.196643	0.103319	0.039992	0.019994	0.123317	
16	0.233306	0.086654	0.026666	-4E-06	0.103319	
17	0.076655	0.049991	0.039992	-0.01	0.046658	
18	0.053324	0.053324	0.066656	0.003329	0.083321	
19	0.22664	0.043325	0.069989	0.016661	0.106652	
20	0.15998	0.053324	0.049991	0.023327	0.073322	
21	0.199976	0.086654	0.053324	0.003329	0.069989	
22	0.09332	0.05999	0.066656	0.029993	0.073322	
23	0.029993	0.049991	0.013328	0.003329	0.079988	
24	0.076655	0.016661	0.046658	-0.00667	0.099986	
25	0.013328	0.029993	0.036659	-0.02334	0.12665	
26	0.063323	0.043325	0.069989	-0.00667	0.146648	
27	0.069989	0.143315	0.086654	0.006662	0.176645	
28	0.069989	0.096653	0.113318	-0.00334	0.233306	
29	0.053324	0.096653	0.106652	0.09332	0.196643	
30	0.046658	0.066656	0.319764	-0.02	0.076655	
31	-0.00334	0.029993	0.013328	-0.03	0.053324	

FRECUENCIA DEL VIENTO  
ESTACIONAL : INVIERNO

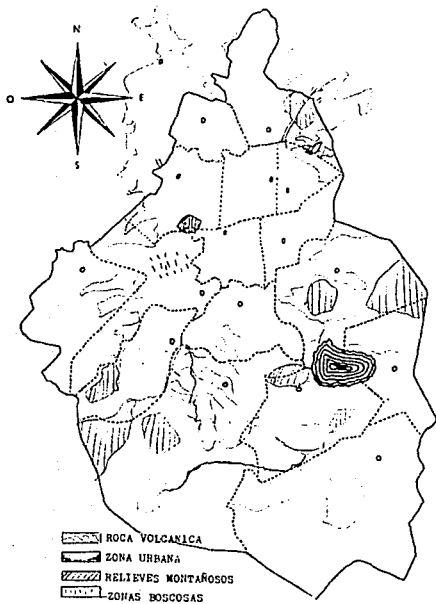
DIRECCION	Numero de horas	Frecuencia	Velocidad media m/s
N	34	1.55	0.8
NNE	27	3.5	0.6
NE	18	0.8	0.5
ENE	40	1.87	0.4
E	46	2.15	0.4
ESE	63	2.7	0.6
SE	23	1.07	0.7
SSE	47	2.14	1.2
S	17	1.21	1
SSW	51	2.2	1.1
SW	68	3	1.1
WSW	206	9.5	1.5
W	91	4.1	1.6
WNW	53	2.1	1.1
NW	60	3	1.1
NNW	113	5	0.9
C	1193	54.18	
TOTAL	2160	100	

Tmax. 24      Tmin. 0  
 Pmax. mbar 776.8      Pmin mbar 768  
 Humedad relativa maxima 86 %  
 Humedad relativa minima 16 %  
 latitud 19 grados 24 minutos  
 longitud 99 grados 11 minutos  
 oscilacion media trimestral 14 grados centigrados  
 oscilacion maxima trimestral 19.7 grados centigrados  
 oscilacion minima trimestral 12.5 grados centigrados  
 Termometro a 20 cm del suelo :  
 T min -0.5    T min promedio 5.6  
 Presion de vapor :  
 media : 7.3 maxima 12.9 min 2.1  
 Direccion dominante WSW  
 vel. media de los vientos 1.2 m/s  
 vel. maxima absoluta y directa 14.9 m/s wsw  
 NUBES  
 cantidad media 3/8 , clase dominante Ac  
 Direccion dominante SW ; 0 dias nublados 24  
 No. de dias medio nublados 29 No. de dias despejados 37  
 Insolacion trimestral 677 hs , 43 minutos  
 lluvias altura en mm 18.9  
 Dias de lluvia promedio 12.3  
 Teapestad trueno y relampago 4 dias  
 niebla 26      Granizada 2      Heladas 24  
 Corona lunar 1    Halo solar 9    Calina 90  
 Corona solar 0



DISTRIBUCION DE ALGUNAS PLANTAS CONTAMINANTES EN EL DISTRITO FEDERAL

- b.- Plantas termoeléctricas
- c.- Plantas de cemento
- d.- Fundidoras
- e.- Industrias de jabón y detergentes
- h.- Planta de ácido sulfúrico
- i.- Industria de papel y celulosa
- l.- Metalurgia no ferrosa
- m.- Industria del vidrio
- n.- Industria huleña
- o.- Productora de pesticidas
- p.- Rastro
- q.- Productoras de fibra de vidrio



- ROCA VOLCANICA
- ZONA URBANA
- RELIEVES MONTAÑOSOS
- ZONAS BOSCOSAS

## BIBLIOGRAFIA

- 1 ) John H. Purnell ( 1988 ) Environmental science & Technology  
1, 22 ,35
- 2 ) Russell L. ; Ackoff ( 1987 )  
El arte de resolver problemas  
Limusa México
- 3 ) Paul F., Deisler Jr. ( 1988 ) Environmental science &  
Technology . 1 ,22 ,73 .
- 4 ) Himmelblaw & Bishop ( 1963 )  
Análisis y simulación de procesos  
Mc. Graw Hill Madrid
- 5 ) SEDUE  
Gaceta ecológica ( 1989 ) ,1,1,
- 6 ) Hanwant B. Singh( 1987 ) Environmental science & .Technology  
4, 21,43
- 7 ) H.-W.Georgii and J. Pankrath ( 1982 )  
Deposition of atmospheric Pollutants D. Reidel publishing company
- 8 ) Steinfeld J. H. ( 1985 )  
Atmospheric chemistry and the physics of air pollution  
New york

- 9 ) W. Shauss , S.J. Rainwaring , ( 1984 )  
Air Pollution , Editorial Arnold Londres
- 10 ) Sherwood & Pigford ( 1982 )  
Mass Transfer , Editorial Mc. Graw Hill Kogakusha, LTD . 1982
- 11 ) LANFI  
Aspectos generales de Ingeniería Ambiental  
Laboratorios Nacionales de Fomento Industrial 1984
- 12 ) R.W. Raiswell, P.Brimblecomb, D.C.Deut & P.S. Liss  
Environmental chemistry, Editorial Arnold Londres 1980
- 13 ) Armistead G. Ruseell . ( 1988 ) Environmental science &  
Technology 3 , 22 , 75
- 14 ) Badger ( 1964 )  
Introducción a la Ingeniería Química, Mc Graw Hill México 1964
- 15 ) Derrick / Grossman ( 1981 )  
Ecuaciones diferenciales con aplicaciones, Fondo educativo  
interamericano México
- 16 ) A.L. Hines , R. N. Maddox ( 1987 )  
Transferencia de masa fundamentos y aplicaciones  
Editorial Prentice Hall Hispanoamericana México .
- 17 ) Erwing Kreyszig ( 1973 )  
Introducción a la estadística matemática, Editorial Limusa México .



- 18 ) Alan D. Eschenroeder and Jose R. Martinez ( 1970 )  
Concepts and applications of photochemical smog models  
General research corp. Sta Barbara California 1970
- 19 ) IBM de México ( 1985 )  
Boletín informativo, estudio del perfil térmico en la ciudad de  
México México .
- 20 ) Octave Levenspiel ( 1986 )  
Ingeniería de las reacciones químicas, Editorial Repla España
- 21 ) National Air Quality and emissions trends report , 1984  
EPA - 450/4-86-001 ; EPA
- 22 ) A.S. Foust , L.A. Wenzel ( 1985 )  
Principio de operaciones unitarias, CECSA México Decimoséptima  
publicación
- 23 ) Hillier / Lieberman ( 1989 )  
Introducción a la investigación de operaciones ,Mc. graw Hill  
México .
- 24 ) BIOMATEMATICAS  
REINHOLD -PUBLISHING 1989
- 25 ) Logan J. A J Geophys. Research 1983 ,88 10785-10807
- 26 ) Hendry D. G. Kenley Journal American Chemical Society 1977,99  
3198 ,3199

- 27 ) Cantrell ,Ludwig A review of the fate of NO<sub>x</sub> and its role in rural ozone formation . SRI - International
- 28 ) Cox , R.A. ;Rofrey Journal environ science and Technology 1977 , 11 , 900-906
- 29 ) Stelson ; Seinfeld Atmosferic and Environment 1979 , 13 , 369 - 371
- 30 ) Harris y colaboradores Journal environ science and Technology, 1982 , 16 , 414 -419
- 31 ) Sjodin A ; Ferm Atmosferic and Environment 1985 , 19 , 985 - 992
- 33 ) Cicerone , R. ,Zellner Geophysics Research 1983 , 88 , 10689-10696
- 34 ) Taylor W . D. y colaboradores Int. journal chemical kinetics . 1980 , 12 ,231
- 35 ) Fahey , D. W Geophysics Research 1986 , 91 , 97881 - 9793
- 36 ) Fox. D . Bull y colaboradores Journal environ science and Technology , 1982 , 16 , 454 -459
- 37 ) Russell A. G. Cass Atmosferic and environ 1986 , 20 , 2011 - 2025
- 38 ) Hill D. L. Chemical kinetics, Mc graw Hill London 1984

- 39 ) Richard K . Irey Ali Ansari Termodinámica modular parte I y II  
Limusa México 1981 II C III D III E
- 40 ) Wark K . .Termodinámica, Mc Graw Hill México 1983
- 41 ) Seinfeld J. H. Air Pollution Physical and chemical fundamentals  
Mc Graw Hill New York 1983
- 42 ) Mc Rae G. j. Seinfeld Atmos Environ 1983 , 17 , 501-522
- 43 ) Stelson ; Seinfeld Atmos Environ 1982 , 16 , 983-992
- 44 ) Mc. Rae ; Tilden ; Seinfeld Computational Chemistry  
Engineering 1982 , 6 , 15 - 25
- 45 ) Fox D . Bull American Metereology Society 1981 , 62 , 599 609
- 46 ) Goodin , Mc Rae , Seinfeld J. Appl. Metereology 1979, 18,  
761-771
- 47 ) Grosjean D Fung Air Pollution Control Assoc. 1984 , 34 ,  
537-543
- 48 ) Hildemann L.M. Russel Atmos Environ 1984 , 18 , 1737 - 1750