

# Evolución temporal de la concentración de ozono en la troposfera

## Temporal evolution of the concentration of ozone in the troposphere

Lía Concepción<sup>1</sup>, Daniel Lovera<sup>2</sup>, Luis Carrasco Venegas<sup>3</sup>

RECIBIDO: 09/03/2016 - APROBADO: 30/06/2016

### RESUMEN

Esta investigación permite estudiar la evolución de la concentración de ozono en la troposfera mediante el uso del software de simulación Polymath, considerando los mecanismos de reacción que involucran la generación de ozono a partir del conocimiento de los valores de las constantes cinéticas. Este software codifica de forma simple las ecuaciones diferenciales provenientes de los balances de materia involucrados con la formación de ozono. A partir de los modelos de dispersión propuestos, se han considerado el reactor de Batch y el reactor semi continuo en la dirección predominante del viento para el obtener las ecuaciones químicas en cada caso a las condiciones de inversión térmica y en un segundo caso sin estas condiciones. La predicción permite conocer con antelación las concentraciones del ozono a diversas horas del día, para obtener una alerta temprana de los niveles de concentración y tomar las precauciones personales necesarias; además permitirá ahorrar recursos respecto a las mediciones experimentales. Finalmente se podrá obtener la evolución de la concentración de ozono en cualquier hora del día, lo que servirá para conocer si este se encuentra dentro los valores permisibles como contaminante secundario de la atmósfera y de este modo realizar las acciones correspondientes para el control de la contaminación atmosférica y el impacto en la calidad ambiental.

**Palabras clave:** Ozono, tropósfera, constantes cinéticas, Inversión térmica, Contaminación atmosférica.

### ABSTRACT

This research allows us to study the evolution of the concentration of ozone in the troposphere using Polymath simulation software, whereas the reaction mechanisms that involve the generation of ozone based on the knowledge of the values of the kinetic constants. This software encodes in a simple way from differential equations of the material balances involved in ozone formation. From proposed dispersion models, have been considered the Batch reactor and semi-continuous reactor in the predominant wind direction to obtain chemical equations in each case to the conditions of thermal inversion, and in a second case without these conditions. The prediction allows known in advance of the ozone concentrations at different times of the day, to get an early warning of concentration levels and take personal precautions; Also it will save resources with respect to experimental measurements. Finally be obtained the evolution of ozone concentration on any time of the day, which will serve to see if this is within allowable levels as contaminant secondary of the atmosphere and in this way to perform actions for the control of air pollution and the impact on environmental quality.

**Keywords:** Ozone, troposphere, kinetic constants, thermal inversion, air pollution.

1 Docente de la Escuela de Ingeniería Geográfica de la Facultad de Ingeniería Geológica, Minera, Metalúrgica y Geográfica de la Universidad Nacional Mayor de San Marcos. E-mail: liacg@yahoo.com

2 Asesor, Docente de la Unidad de Posgrado de la Facultad de Ingeniería Geológica, Minera, Metalúrgica y Geográfica de la Universidad Nacional Mayor de San Marcos. E-mail: dloverad@unmsm.edu.pe

3 Doctor, Docente de la Universidad Nacional del Callao.

## I. INTRODUCCIÓN

El problema de la contaminación atmosférica en las ciudades se ha agravado en los últimos años como consecuencia del desarrollo industrial y de las actividades urbanas, lo que ha obligado a tomar medidas de carácter local, nacional e internacional con el fin de recuperar su calidad ambiental.

Entre los contaminantes secundarios se encuentra el ozono troposférico, el cual actualmente es el principal protagonista de la contaminación por “smog fotoquímico” y participa con un porcentaje considerable en el calentamiento global del planeta, como consecuencia de su contribución al efecto invernadero (Chicón, Lorenzo).

El ozono troposférico se produce a partir de los compuestos orgánicos volátiles en presencia de óxidos de nitrógeno, así como a partir de hidrocarburos provenientes de zonas industriales y urbanas, que posteriormente son transportados por acción del viento a otras regiones.

En 1970, Crutzen encontró un artículo en el que se consideró el impacto potencial de los aviones supersónicos sobre la atmósfera y recabó la primera información cuantitativa sobre el impacto de  $\text{NO}_x$  estratosférico que podría resultar de esos vuelos. Al comparar las reacciones aportadas por Davis, Crutzen se dio cuenta que podría causarse un daño ambiental a escala global, idea que llegó a publicar pero a la cual la comunidad científica no le dio la suficiente importancia

Según los reportes de la Agencia Europea del Medioambiente (EEA, 2011) varios procesos patofisiológicos del pulmón resultan de la exposición al ozono, pues dado que es un potente oxidante, es extremadamente irritante para el sistema respiratorio. McKee D. (1993) señala que los efectos que se pueden producir son: deterioro de la función pulmonar, envejecimiento prematuro de los pulmones, mayor incidencia de ataques asmáticos y síntomas de disfunción respiratoria en asmáticos, malestar en las vías respiratorias y tos; irritación ocular, de nariz y garganta; cefaleas, náuseas, aumenta el nivel en las vías respiratorias de acetilcolina, metilcolina e histamina, alteraciones del sistema inmunológico, entre otras patologías, lo cual evidencia los impactos negativos a la salud.

## II. MATERIAL Y MÉTODOS

### 2.1. Metodología

Para cumplir con los objetivos de la presente investigación, se desarrollarán modelos de dispersión, el primero considerando las condiciones de inversión térmica y el segundo sin estas condiciones.

Esta metodología consistió en las etapas fundamentales:

- i.- Balance de Materia
- ii.- Adecuación de Constantes cinéticas
- iii.- Cuantificación de Parámetros del Modelo
- iv.- Simulación de Datos

## III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

### 3.1. Modelo Generis Reaction

Basado en el sistema denominado Generis Reaction Set GRS, aplicable a los procesos químicos y fotoquímicos de los contaminantes atmosféricos durante los periodos de inversión térmica. Las Figuras N.º 1, 2, 3 y 4 nos muestran la evolución temporal de la Concentración del Ozono y sus acompañantes.

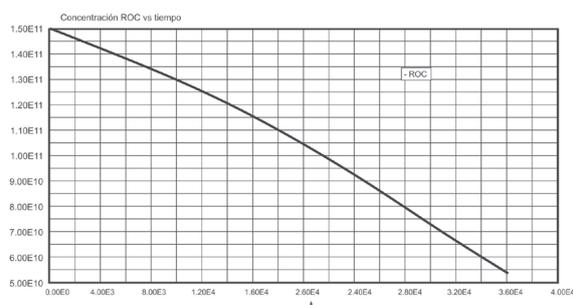


Figura N.º 1. Evolución temporal de la concentración de compuestos orgánicos que reaccionan en el sistema.

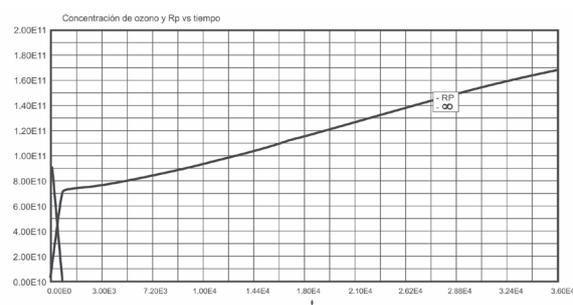


Figura N.º 2. Evolución temporal de la concentración de radicales libres (RP) y ozono, que reaccionan en el sistema.

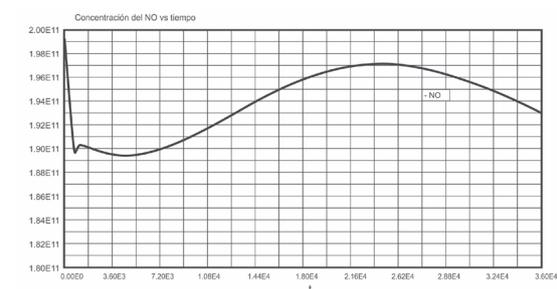


Figura N.º 3. Evolución temporal de la concentración de monóxido de nitrógeno.

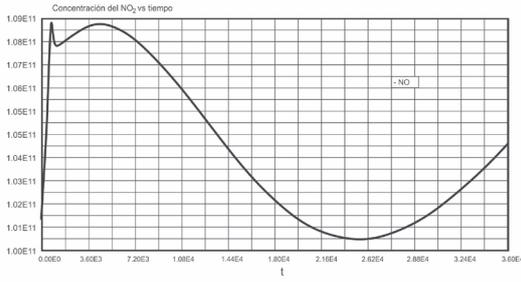


Figura N.º 4. Evolución temporal de la concentración de dióxido de nitrógeno.

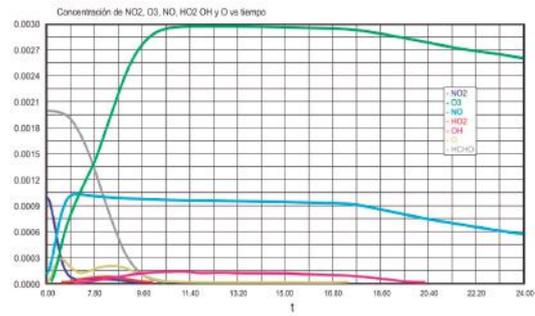


Figura N.º 7. Evolución temporal de los contaminantes atmosféricos: dióxido de nitrógeno, ozono, monóxido de nitrógeno, radical hidropéroxido, radical oxidrilo, radical oxígeno y acetaldehído.

**3.2 Modelo cinético Generis Reaction Set (GRS)**

Basado en el modelo cinético Generis Reaction Set (GRS), aplicado a un volumen de control donde se produce transferencia de masa por advección, cuando no se presenta el fenómeno de inversión térmica. Las Figuras N.º 5 y 6 nos muestran la evolución temporal de la concentración de los contaminantes atmosféricos (ROC), radicales libres, ozono entre otros.

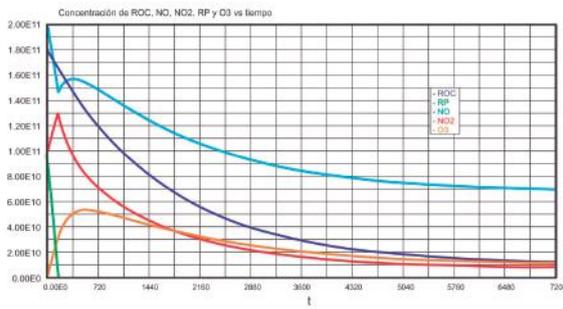


Figura N.º 5. Evolución temporal de los contaminantes atmosféricos: Compuestos orgánicos reactivos (ROC), radicales libres (RP), monóxido de nitrógeno, dióxido de nitrógeno y ozono.

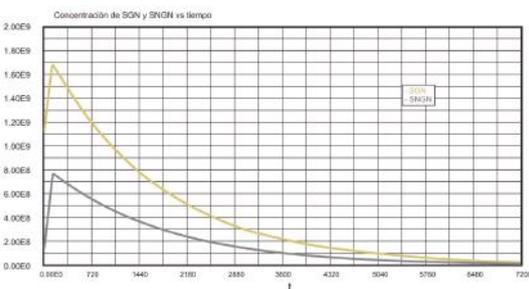


Figura N.º 6. Evolución temporal de los contaminantes atmosféricos: Compuestos gaseosos estables de nitrógeno (SGN) y compuestos no gaseosos estables de nitrógeno (SNGN).

**3.3. Modelo cinético Seinfeld**

Basado en el modelo cinético propuesto por Seinfeld, adaptado de los trabajos de Rowland, Crutzen y Molina. Aplicable a los periodos de inversión térmica.

Las Figuras N.º 7, 8, 9, 10, 11 y 12 nos muestran la evolución temporal de la concentración de los contaminantes atmosféricos (ROC), radicales libres, ozono entre otros.

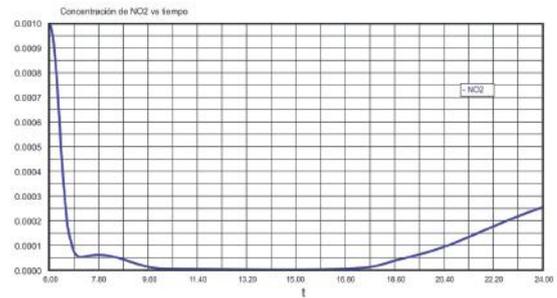


Figura N.º 8. Evolución temporal de la concentración de dióxido de nitrógeno.

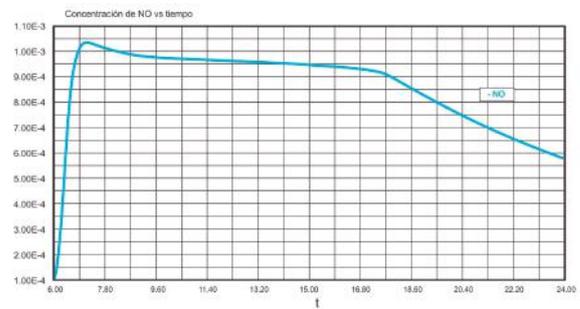


Figura N.º 9. Evolución temporal de la concentración de monóxido de nitrógeno.

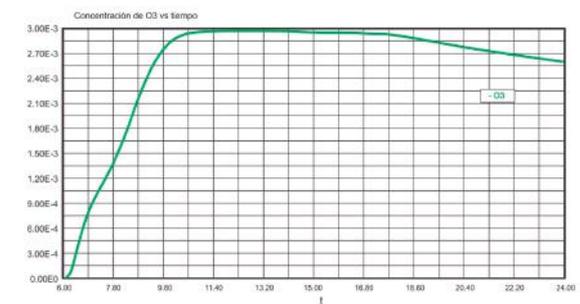


Figura N.º 10. Evolución temporal de la concentración de ozono.

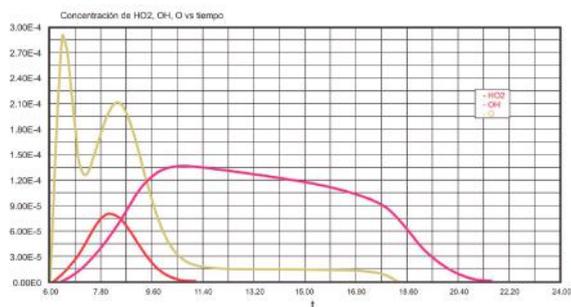


Figura N.º 11. Evolución temporal de la concentración de radicales libres: hidroperóxido, oxidrilo y oxígeno.

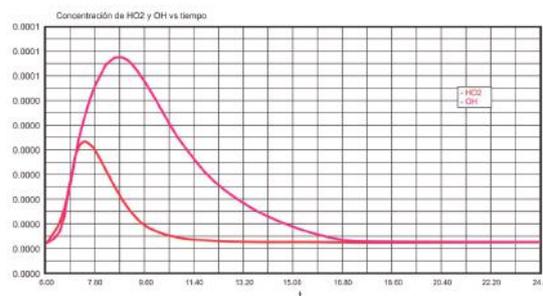


Figura N.º 14. Evolución temporal de la concentración de los radicales libres hidroperóxido y oxidrilo.

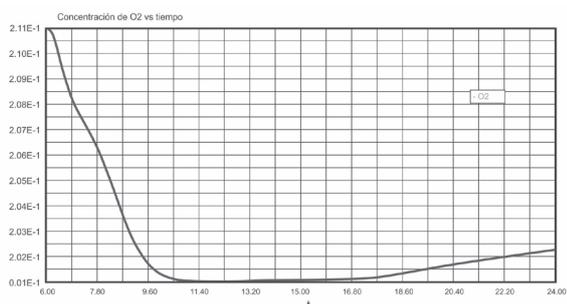


Figura N.º 12. Evolución temporal de la concentración de oxígeno.

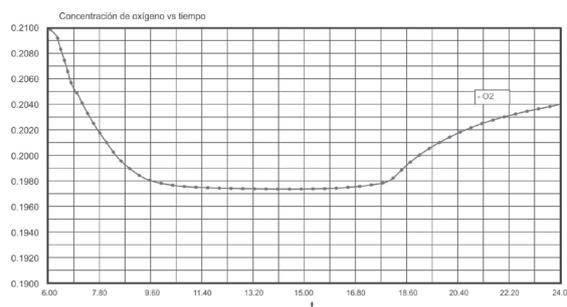


Figura N.º 15. Evolución temporal de la concentración del oxígeno molecular.

### 3.4. Modelo cinético Seinfeld con dispersión

Está basado en el modelo cinético del Modelo 3.3, considerando que se produce el fenómeno de dispersión, desde el volumen de control hacia los exteriores, con una dirección predominante del viento. Las Figuras N.º 13, 14 y 15 nos muestran la evolución temporal de la concentración de los contaminantes atmosféricos (ROC), radicales libres, ozono entre otros.

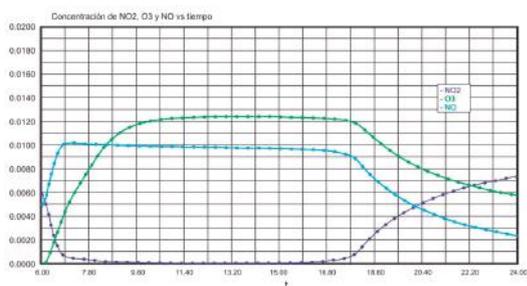


Figura N.º 13. Evolución temporal de la concentración de contaminantes dióxido de nitrógeno, monóxido de nitrógeno y ozono.

### IV. CONCLUSIONES

1. El presente estudio ha demostrado que la mayor concentración de ozono se encuentra entre las 10 a.m. y 18 p.m., periodo en el cual dichas concentraciones están en un valor máximo.
2. La concentración de ozono en la troposfera alcanza un valor máximo cuando se encuentra en el periodo de inversión térmica. Esto es razonable pues cuando se aplica el método semicontinuo, debido al flujo hay una dispersión de los contaminantes, motivo por el cual, en realidad, la concentración de todos los contaminantes tiene un valor más bajo.
3. Los programas desarrollados nos permiten modelar diversos casos tales como estudiar la variación de la concentración inicial, la presión media, el flujo de aire, el volumen de control, la temperatura del aire, la velocidad media del aire, etc.
4. Los cuatro modelos desarrollados muestran que los radicales libres formados, se convierten rápidamente en los primeros 60 minutos de iniciado el proceso, es decir a las 7 am. aproximadamente.

## V. AGRADECIMIENTOS

Al Instituto de Investigación de la Facultad de Ingeniería Geológica, Minera, Metalúrgica y Geográfica de la UNMSM y a mis padres por su incondicional apoyo y su ejemplar amor.

## VI. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Agencia Europea de Medioambiente, EEA (2011): Ozono Troposférico. Recuperado de <http://reports.es.eea.europa.eu/92-828-3351-8/es/page005.html>
2. Carrasco, L. (2011). *Fenómenos de transporte*. Lima Perú: Macro.
3. Carrasco, L. (2001). *Métodos numéricos*. Lima Perú: Macro.
4. McKee D. (1993) *Tropospheric Ozone: Human health and agricultural impacts*, Edit. David J. McKee.
5. Rowland, F. S., Stratospheric Ozone Depletion by chlorofluorocarbons (Nobel Lecture), *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 1996, 35, pp: 1786-1798.
6. Seinfeld, J.H. y Pandis, S.N., *Atmospheric Chemistry and Physics: from air pollution to climate change*, John Wiley & Sons, New York, 1998.
7. Crutzen, P. J., My life with O<sub>3</sub>, NO<sub>x</sub>, and other YZO<sub>x</sub> compounds (Nobel Lecture), *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 1996. 35, pp: 1758-1777.

