

## Foro de Cambio Climático

# Modelo Matemático para la Predicción de Ozono Troposférico

H. Sánchez Mora<sup>a</sup>, R. Vázquez Rodríguez<sup>a</sup>, M. A. Polo Labarrios<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Universidad Autónoma Metropolitana- Iztapalapa, IPH.

### Resumen

Los modelos diseñados para los agentes contaminantes en el ambiente resultan bastante complejos debido a la consideración de demasiados factores, tales como la velocidad del viento, cinética de reacción, la generación de contaminantes provenientes de la actividad humana, y a su vez la cantidad de variables y parámetros que aumentan la dificultad para la obtención de la solución. Por otro lado, la existencia de modelos de caja permite la solución un tanto cualitativa/cuantitativa de tan robusto fenómeno, tomando en cuenta las concentraciones de NO, NO<sub>2</sub>, y O<sub>3</sub>, así como peroxy-acetyl-nitrato (PAN) en el ambiente, reduciendo considerablemente la cantidad de parámetro y variables. Bajo un esquema donde la cantidad de radicales libres en el ambiente son participantes, los cual es algo común en la contaminación atmosférica, el ciclo de Leighton se ve perturbado, ya que solo es capaz de predecir la cinética de las tres especies mencionadas en condiciones estables. En este trabajo se muestran los avances del modelado de la cinética del ozono influenciado por la existencia de NO, NO<sub>2</sub>, y peroxy-acetyl-nitrato (PAN) bajo un esquema puntual de primer orden en condiciones experimentales. Los resultados obtenidos de la SEDEMA (Secretaría del Medio Ambiente) de la Ciudad de México del día del 21 de Agosto de 2023 de la alcaldía de Iztacalco son caracterizados con el modelo de donde se obtiene una tendencia similar a los datos reportados.

### Modelo Matemático

#### Mecanismos básicos de contaminación de aire

##### Fotólisis del NO<sub>2</sub>



##### Reacción de O<sub>2</sub> con oxígeno en estado fundamental (O({}^3P))



##### Reacción entre NO y O<sub>3</sub>



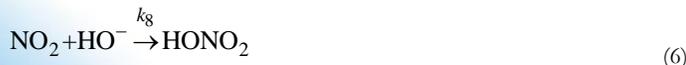
##### Reacción entre NO<sub>2</sub> y O<sub>3</sub>



##### Reacción entre RO<sub>2</sub> y NO



##### Reacción entre HO· y NO<sub>2</sub>



A partir de las Ecs. (1-6) se puede inferir,

$$\frac{d\text{O}_3}{dt} = J_t \text{NO}_2 - k_3 \text{NO} \cdot \text{O}_3 - k_{10} \text{NO}_2 \cdot \text{O}_3 \quad (7)$$

$$\frac{d\text{NO}_2}{dt} = -J_t \text{NO}_2 + k_3 \text{NO} \cdot \text{O}_3 + k_{12} \text{NO} \quad (8)$$

$$-k_{10} \text{NO}_2 \cdot \text{O}_3 - \overbrace{\beta(1+\alpha_t)}^{k_3} \text{NO}_2 - k_{21} \text{NO}_2 + k_T \text{PAN} \left( 1 - \frac{1}{1+\eta \text{NO}/\text{NO}_2} \right)$$

$$\frac{d\text{NO}}{dt} = J_t \text{NO}_2 - k_3 \text{NO} \cdot \text{O}_3 - k_{12} \text{NO} + \text{NO}_i \quad (9)$$

$$\frac{d\text{PAN}}{dt} = k_{21} \text{NO}_2 - k_T \text{PAN} \left( 1 - \frac{1}{1+\eta \text{NO}/\text{NO}_2} \right) \quad (10)$$

Para la consideración de los efectos fotolíticos, el término  $J_t$  depende de la radiación del día de la siguiente forma,

$$J_t = \begin{cases} J_{\max} \left[ 1 + \cos \left( \frac{2\pi}{d_n} (t_{\max} - t) \right) \right] & t_{\text{amanecer}} \leq t \leq t_{\text{anochecer}} \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases} \quad (11)$$

donde  $t_{\max}$  es la hora donde alcanza la máxima radiación solar,  $t_{\text{amanecer}}$ , es la hora del día en que amanece y  $t_{\text{anochecer}}$  es la hora en que anochece, y  $d_n$  son las horas del día con sol. Por otro lado  $\alpha_t$  tiene una dependencia similar a  $J_t$ .

### Caso de Estudio

El sistema de monitoreo de la SEDEMA reporta los resultados de concentración de O<sub>3</sub>, NO, y NO<sub>2</sub>. El modelo matemático es caracterizado para el día 21 de Agosto de 2023 obteniendo los datos de la alcaldía Iztacalco, además de comparar la irradiancia para ese día con la distribución de la Ec. (11). La **Figura 1** muestra dicha comparación. En la **Figura 2** se muestra la comparación de resultados reportados por la SEDEMA y el modelo descrito, donde es evidente la similitud con los datos adquiridos, ajustando los coeficientes de las Ecs. (7-10) para este caso.

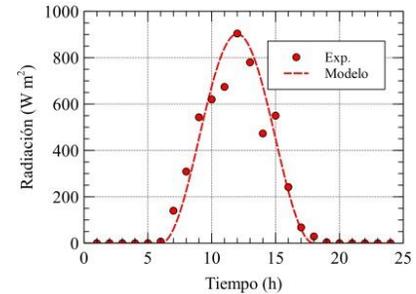


Figura 1. Irradiancia Solar en Iztacalco, CDMX, (21/Agosto/2023).

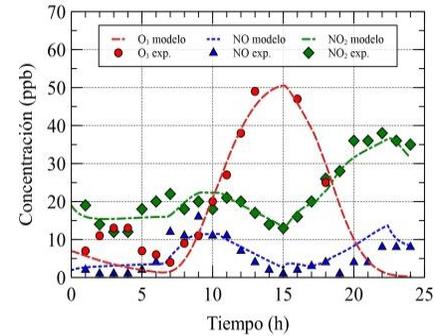


Figura 2. Comparación de concentraciones de contaminantes con el modelo presentado y los datos reportados por la SEDEMA en Iztacalco (21/Agosto/2023).

### Conclusiones

El modelo presentado se ajusta considerablemente a los datos obtenidos por el sistema de adquisición localizado en la alcaldía de Iztacalco para el 21 de Agosto de 2023, siendo esto como un ejercicio para ajustar los coeficientes de reacción de este día y localidad en específico. Para un análisis más robusto, existe la necesidad de concentrar una mayor cantidad de información y de este modo, obtener coeficientes de reacción que representen una mayor cantidad de días, y así predecir el comportamiento de ozono en el ambiente.