

AR-11

Estudios de reactividad de la fotooxidación de hidrocarburos

Ruiz-Suárez, L.G. (*), Castro, T. (*), Ruiz-Santoyo, M.E. (+) y Cruz, X. (+)

(*) Centro de Ciencias de la Atmósfera, UNAM. 04510 México D.F.

(+) Instituto Mexicano del Petróleo

Se hicieron estudios de la reactividad de algunos hidrocarburos seleccionados, modelando por computadora su foto-oxidación, solos o combinados. Se probó la sensibilidad del potencial de formación de ozono a cambios de irradiación, presión, humedad y concentraciones, usando un mecanismo completamente detallado. Algunas condiciones fueron similares a las que prevalecen en la Ciudad de México. El procedimiento probó ser adecuado para obtener un mejor conocimiento sobre la forma en que la formación de ozono y otros contaminantes responden a cambios en esos parámetros. Se usó un algoritmo novedoso para incorporar el mecanismo dentro del programa de simulación con notable reducción en tiempo de cómputo.

AR-11i

Reactivity studies of hydrocarbon photo-oxidation

Reactivity studies of some hydrocarbons were performed by computer modeling of their photo-oxidation, along or combined. Sensitivity of ozone formation potential to changes in irradiation, total pressure, humidity, and concentrations was tested using a fully detailed mechanism. Some conditions were similar to those prevailing in Mexico City. The procedure proved to be suitable for obtaining deeper insight into the way of formation of ozone and other pollutants respond to changes on these parameters. A novel algorithm to automatically hard link the mechanism into the computer code was used with noticeable increase in computer performance.