

## SIMULACIÓN NUMÉRICA DIRECTA DE FLUJO Y TRANSPORTE REACTIVO EN HORMIGONES DRENANTES

### DIRECT NUMERICAL SIMULATIONS OF FLOW AND REACTIVE TRANSPORT IN PERVIOUS CONCRETE

Milagros Rossler<sup>a</sup>, Laura Battaglia<sup>a,b</sup> y Pablo A. Kler<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup>Grupo de Investigación en Métodos Numéricos en Ingeniería, Universidad Nacional Tecnológica, Lavalle 610, 3000 Santa Fe, Argentina, mrossler@frsf.utn.edu.ar; <https://www.frsf.utn.edu.ar/gimni/>

<sup>b</sup>Centro de Investigación de Métodos Computacionales (CIMEC, CONICET-UNL), Predio CONICET Santa Fe "Dr. Alberto Cassano", Colectora Ruta Nac Nro 168, Km 0, Paraje El Pozo, 3000 Santa Fe, Argentina, <https://www.cimec.conicet.gov.ar/>

**Palabras clave:** Hormigón drenante, Simulación Numérica Directa, Transporte reactivo, Fotocatálisis.

**Resumen.** En este trabajo se presenta un estudio numérico del transporte escalar reactivo de NOx en hormigones drenantes, con el objetivo de evaluar su potencial para la descontaminación del aire en aplicaciones urbanas o industriales. La geometría porosa utilizada en las simulaciones se obtuvo a partir del procesamiento de imágenes de tomografía computada de probetas reales de hormigón drenante, lo que permitió representar con alta fidelidad su estructura interna. A partir de estas geometrías, se realizaron simulaciones numéricas directas del flujo tridimensional en régimen laminar. Sobre el campo de flujo resultante, se resolvió el transporte de un escalar reactivo sujeto a condiciones de reacción superficial, modelando procesos de adsorción y catálisis en las paredes del medio poroso. La reacción modelo considerada fue la oxidación fotocatalítica de NO y NO<sub>2</sub> hacia nitratos (NO<sub>3</sub>) catalizada por dióxido de titanio fijado en la matriz del hormigón. El análisis permitió caracterizar la eficiencia del material como medio reactivo pasivo o soporte catalítico, evaluando la distribución de tiempos de residencia y la utilización de la superficie interna disponible.

**Keywords:** Pervious concrete, DNS simulation, Reactive transport, Photocatalysis.

**Abstract.** This work presents a numerical study of reactive scalar transport of NO<sub>x</sub> in pervious concrete, aimed at assessing its potential for air decontamination in urban and industrial applications. The porous geometry used in the simulations was reconstructed from X-ray computed tomography of real pervious-concrete specimens, enabling a high-fidelity representation of the internal microstructure. Based on these geometries, we performed direct numerical simulations of steady, laminar, three-dimensional flow. On the resulting flow fields, we solved the advection-diffusion-reaction of a reactive scalar with surface-reaction boundary conditions, modeling adsorption and heterogeneous photocatalysis at the pore walls. The model reaction considered was the TiO<sub>2</sub>-catalyzed photocatalytic oxidation of NO and NO<sub>2</sub> to nitrate (NO<sub>3</sub>) immobilized within the concrete matrix. The analysis quantifies the material's efficiency as a passive reactive medium or catalyst support by evaluating residence-time distributions and the utilization of the available internal surface area.

## 1. INTRODUCCIÓN

La contaminación por óxidos de nitrógeno (NOx) en entornos urbanos constituye un desafío sanitario y ambiental persistente. Ante este contexto, cobra relevancia el desarrollo de materiales de construcción multifuncionales capaces de mitigar emisiones, además de cumplir funciones estructurales e hidráulicas. Entre las alternativas, los cementicios fotocatalíticos con dióxido de titanio ( $TiO_2$ ) han mostrado capacidad para oxidar NO y  $NO_2$  bajo irradiación UV y aportar prestaciones de depuración del aire, autolimpieza y mayor durabilidad (Zhang et al., 2024). Sin embargo, gran parte de las evaluaciones se centra en recubrimientos o mezclas superficiales y no captura adecuadamente el rol de la mesoestructura porosa sobre el transporte y la cinética.

A escala urbana, estudios CFD en cañones de calle con superficies tratadas con  $TiO_2$  han reportado reducciones modestas de NOx y una marcada sensibilidad a irradiación y humedad, pero sobre geometrías idealizadas del sustrato (Xie et al., 2020). Esta brecha sugiere que comprender el desempeño intrínseco del material requiere resolver cómo la morfología del poro condiciona el acoplamiento entre transferencia de masa y reacción en la interfase gas–sólido.

La combinación de tomografía computada (CT) y Direct Numerical Simulation (DNS) ofrece una vía robusta para abordar este problema: permite trabajar con geometrías reales y resolver las ecuaciones de Navier–Stokes y de transporte reactivo sin homogenizaciones, conectando métricas microestructurales con desempeño funcional. En trabajos previos se validaron propiedades hidráulicas (porosidad, permeabilidad y régimen no-Darciano) con datos experimentales, estableciendo la base para extender el análisis hacia la reactividad (Rossler et al., 2025).

Este estudio integra CT + DNS con un modelo de reacciones heterogéneas en superficie sobre  $TiO_2$ , a fin de describir el acoplamiento flujo–difusión–cinética y evaluar el potencial del hormigón drenante como infraestructura urbana activa para la mitigación de NOx. En este marco, se analiza cómo la variación de sección y la conectividad del poro gobiernan la accesibilidad a la superficie activa y, en consecuencia, la localización y la eficiencia de la conversión.

## 2. METODOLOGÍA

### 2.1. Materiales

La probeta de hormigón drenante analizada fue elaborada siguiendo la metodología desarrollada en Rossler et al. (2025). Se empleó cemento Portland CPC-40, agua y agregados graníticos con granulometría controlada. La mezcla obtenida presentó una densidad aparente de  $2056 \text{ kg/m}^3$  y un volumen de vacíos teórico cercano al 20 %, valores que confirman la elevada porosidad del material y su consecuente capacidad de drenaje.

### 2.2. Caracterización mesostructural mediante tomografía computarizada

La mesoestructura del hormigón drenante fue caracterizada mediante CT, siguiendo la metodología previamente desarrollada en Rossler et al. (2025). Esta técnica no destructiva permite distinguir con alta precisión la matriz sólida y los poros internos, aprovechando las diferencias en la absorción de rayos X entre los distintos componentes del material. La resolución alcanzada, del orden de  $125 \mu\text{m}/\text{pixel}$ , posibilitó la reconstrucción tridimensional de la probeta y el análisis detallado de parámetros críticos como tamaño, forma y conectividad de los poros, aspectos fundamentales para comprender tanto el comportamiento hidráulico como el desempeño reactivo del material. En la Figura 1 se muestran imágenes de la CT y el modelo STL correspondiente a la matriz sólida, que constituye el punto de partida.

A partir de las imágenes de CT se generó un archivo STL que representa la matriz sólida

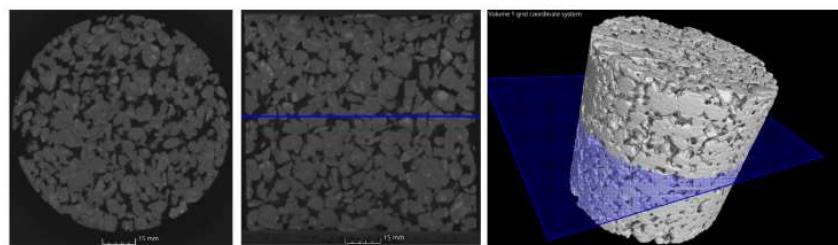


Figura 1: Tomografía computarizada de la probeta de hormigón drenante.

del hormigón drenante. Con el fin de acotar el costo computacional sin perder representatividad mesoestructural, se seleccionó una subsección de  $20\text{ mm} \times 20\text{ mm}$  y  $30\text{ mm}$  de altura, validada en [Rossler et al. \(2025\)](#) como apropiada para reproducir el comportamiento hidráulico. A partir del sólido corregido, y mediante la sustracción respecto de un prisma auxiliar, se aisló la estructura porosa que constituye el dominio fluido sobre el cual se resuelven las ecuaciones de transporte.

Con el objetivo de imponer condiciones de contorno de forma física y numéricamente robusta, se incorporaron cabezales a la entrada y salida del dominio poroso. Estos tramos de transición cumplen un doble propósito: (i) desacoplar la complejidad geométrica de la mesoestructura porosa de la frontera de imposición, minimizando gradientes artificiales y recirculaciones; y (ii) permitir que los campos de velocidad y de especies reaccionantes alcancen un estado estabilizado antes de interactuar con las superficies catalíticas internas. La Figura 2 muestra el dominio de cálculo obtenido a partir del STL de la matriz sólida.

### 2.3. Mallado del dominio poroso

El dominio computacional se discretizó en *STAR-CCM+* mediante una estrategia combinada que integró el *polyhedral mesher* y el *prism layer mesher*. El primero permitió representar con eficiencia la compleja geometría porosa, generando celdas con múltiples caras que reducen el número total de elementos sin comprometer la resolución geométrica ni la fidelidad del dominio. Por su parte, el *prism layer mesher* se aplicó en las regiones próximas a las paredes de los poros, donde es crítico capturar con exactitud los gradientes de velocidad y describir la interacción fluido–sólido en un proceso de transporte reactivo sobre superficies activadas con  $\text{TiO}_2$ . Esta combinación asegura una adecuada resolución de los fenómenos de difusión y reacción en la interfase catalítica irradiada. Al ser aire el gas portador y con la difusividad empleada  $D = 4,0 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  el número de Schmidt resulta  $\text{Sc} \approx 0,39$ . Dado que  $\text{Sc} < 1$ , la difusión de la especie es relativamente rápida respecto de la difusión de cantidad de movimiento. En términos prácticos, los gradientes de concentración no imponen una exigencia de resolución superior a la ya necesaria para el campo de flujo. En consecuencia, el mallado orientado al flujo utilizado es suficiente para describir el transporte de especies y la conversión superficial en el régimen laminar considerado, sin requerir incrementar el número de capas. La Figura 2 muestra el detalle del mallado y campos resultantes en el mismo corte geométrico cercano a las paredes.

La configuración final de la malla se obtuvo a través de un proceso iterativo de refinamiento, en el cual se equilibraron la resolución espacial y el costo computacional. La independencia de malla fue verificada siguiendo el procedimiento detallado en [Rossler et al. \(2025\)](#), garantizando así la consistencia y confiabilidad de los resultados numéricos.

### 2.4. Reacción de referencia

El comportamiento de los contaminantes en contacto con superficies fotocatalíticas se modeló considerando exclusivamente las reacciones heterogéneas en la superficie de  $\text{TiO}_2$ . Esta

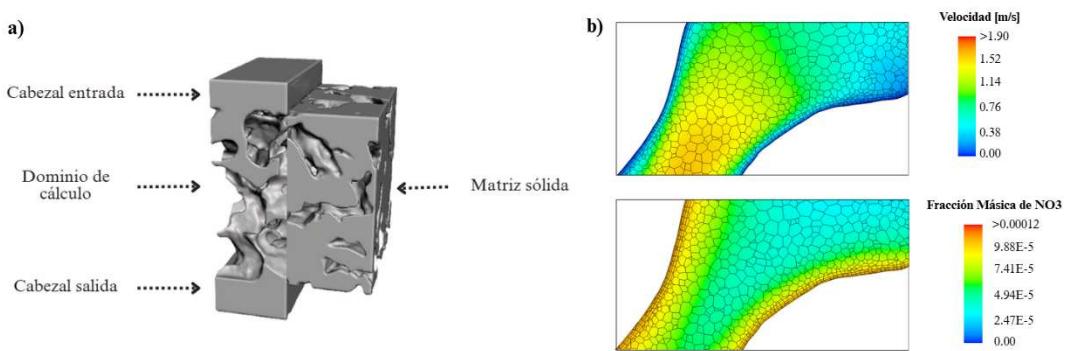
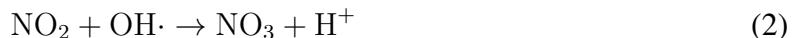


Figura 2: (a) Obtención del dominio de cálculo con cabezales en base al STL de la matriz sólida. (b) Detalle del mallado y campos resultantes en el mismo corte geométrico cercano a las paredes

simplificación se fundamenta en que, de acuerdo con la bibliografía especializada ([Xie et al., 2020](#)), las transformaciones fotoquímicas en fase gaseosa presentan una contribución secundaria frente al proceso dominante de oxidación superficial. El enfoque adoptado se centra, por lo tanto, en el acoplamiento entre el transporte de especies y las reacciones en la interfase gas-sólido, donde ocurre la conversión efectiva de NO y NO<sub>2</sub> por acción catalítica del TiO<sub>2</sub> bajo irradiación UV.

En la superficie photocatalítica se generan portadores fotoinducidos (electrones y huecos) y radicales OH, que conducen a la oxidación heterogénea de los contaminantes adsorbidos. A nivel cinético, se implementó en *STAR-CCM+* un mecanismo lumped en el módulo *Surface Chemistry*, que incluye las especies adsorbidas NO(S), NO<sub>2</sub>(S) y OH(S), y las reacciones netas simplificadas que representan la oxidación progresiva de NO y NO<sub>2</sub>:



Las velocidades de reacción se describen combinando la dependencia térmica de Arrhenius con la estructura de Langmuir–Hinshelwood (LH), que introduce la competencia por sitios activos. Cada constante de velocidad termodependiente se expresa según la ecuación de Arrhenius:

$$k_i = A_i \exp\left(-\frac{E_{a,i}}{RT}\right), \quad (3)$$

donde  $A_i$  es el factor pre-exponencial y  $E_{a,i}$  la energía de activación. Estos parámetros, junto con las constantes de adsorción  $K_j$ , se adoptaron de la bibliografía de referencia [Xie et al. \(2020\)](#), que reporta valores ajustados para el sistema TiO<sub>2</sub>–NO<sub>x</sub> en condiciones ambientales.

La formulación Langmuir–Hinshelwood se incorporó para representar la cobertura superficial efectiva de los sitios activos. En este marco, la velocidad de reacción depende no solo de la concentración de cada especie, sino también de la fracción de superficie ocupada:

$$R_{\text{NO}} = -\frac{k'_{\text{NO}} C_{\text{NO}}}{1 + K_{\text{NO}} C_{\text{NO}} + K_{\text{NO}_2} C_{\text{NO}_2} + K_w C_w} f(E) \quad (4)$$

$$R_{\text{NO}_2} = -\frac{k'_{\text{NO}_2} C_{\text{NO}_2} - k'_{\text{NO}} C_{\text{NO}}}{1 + K_{\text{NO}} C_{\text{NO}} + K_{\text{NO}_2} C_{\text{NO}_2} + K_w C_w} f(E), \quad (5)$$

donde  $C_i$  son las concentraciones molares en la vecindad de la superficie,  $K_j$  las constantes de adsorción,  $C_w$  el contenido de vapor de agua asociado a la humedad relativa y  $f(E)$  un factor

de corrección que incorpora la irradiancia. Esta estructura refleja el efecto inhibitorio de la humedad: a medida que crece la fracción de sitios ocupados por H<sub>2</sub>O, la eficiencia fotocatalítica disminuye, comportamiento reportado en estudios experimentales ([Xie et al., 2020](#)).

El modelo se calibró mediante la comparación con resultados de [Xie et al. \(2020\)](#), empleando las mismas condiciones de irradiancia y humedad relativa en un volumen de control. Este procedimiento permitió ajustar los coeficientes cinéticos y verificar la coherencia del esquema implementado. Los resultados reproducen las tendencias de conversión reportadas en la literatura y extienden la descripción a la formación de NO<sub>3</sub>, confirmando la consistencia del modelo.

## 2.5. Condiciones de referencia y gases portadores

Las simulaciones se realizaron bajo condiciones ambientales de referencia, con irradiancia  $E = 40 \text{ W m}^{-2}$  y humedad relativa RH = 50 % ([Xie et al., 2020](#)). El vapor de agua en la interfase se calculó como  $p_{\text{H}_2\text{O}} = \text{RH } p_{\text{sat}}(T)$ ; a  $T = 300 \text{ K}$  se tiene  $p_{\text{sat}} \approx 3,17 \text{ kPa}$ . Mediante la ley de los gases ideales se obtuvo la concentración molar correspondiente,  $C_{\text{H}_2\text{O}} = p_{\text{H}_2\text{O}} / (RT)$ , consistente con la humedad relativa especificada. Las fracciones másicas de entrada incluyeron tanto especies reactivas como gases portadores inertes (N<sub>2</sub> y O<sub>2</sub>). Esto permite reproducir la dilución de los contaminantes en aire y establecer condiciones de flujo realistas. La Tabla 1 resume los valores adoptados.

Tabla 1: Fracciones míasicas de las especies empleadas en la condición de entrada.

Espeie	Fracción mísica	Observación
NO	$5,0 \times 10^{-5}$	Contaminante primario
NO <sub>2</sub>	$5,0 \times 10^{-6}$	Producto intermedio
OH	$1,0 \times 10^{-4}$	Proxy oxidante fotoinducido
H <sub>2</sub> O	0,020	Corresponde a RH 50 % a $T = 300 \text{ K}$
O <sub>2</sub>	0,1995	Gas portador inerte
N <sub>2</sub>	0,7800	Gas portador inerte

Estas condiciones se aplicaron como fracciones míasicas de entrada y también como condiciones iniciales en todo el dominio, evitando gradientes artificiales al inicio de la simulación y asegurando la coherencia en el acoplamiento transporte–química superficial.

## 2.6. Condiciones de borde

El dominio computacional, representado en conjunto con las condiciones de borde en la Figura 3, se resolvió mediante un flujo segregado, lo que motivó la imposición de una condición de velocidad en el ingreso para favorecer la estabilidad numérica, ya que proporciona un campo convectivo bien definido para el cálculo de los momentos y reduce oscilaciones en el acoplamiento presión–velocidad a muy bajos números de Reynolds. Se estableció así una velocidad uniforme de  $5,00 \times 10^{-2} \text{ m/s}$ , junto con las fracciones míasicas de especies determinadas en la sección 2.5. Como condición inicial, todo el dominio se definió con la misma composición, evitando gradientes en el arranque de la simulación y asegurando una convergencia más robusta.

En la salida se aplicó una condición de descarga libre con la opción *Backflow Specification Direction* configurada en *boundary normal*, que permite manejar eventuales retroflujos sin introducir inestabilidades. Las caras de corte laterales del subdominio se definieron como planos de simetría, lo que constituye una aproximación periódica que reduce el costo computacional y mantiene la representatividad mesoestructural ([Rossler et al., 2025](#)).

Un aspecto central de este estudio es la definición de las condiciones en las paredes. En los tramos de transición correspondientes a los cabezales de entrada y salida se establecieron paredes inertes, sin reacciones químicas, con el fin de garantizar que la transformación de especies ocurra únicamente dentro de la muestra porosa. Este planteo resulta coherente con la estrategia reportada previamente (Rossler et al., 2025) lo que asegura una correcta representación del acoplamiento entre transporte y reacción en la mesoestructura real del hormigón drenante.

Por el contrario, las superficies que delimitan los poros de la matriz sólida se definieron como superficies reactivas, habilitando el modelo de química superficial de  $\text{TiO}_2$ . Ante la ausencia de datos confiables sobre la densidad de sitios activos y su fracción efectivamente expuesta, se adoptó una cobertura inicial nominal 0,5 para sitios vacantes asociados a  $\text{TiO}_2$ , con el remanente distribuido en  $\text{OH}(\text{S})/\text{H}(\text{S})$ ; esta hipótesis modela de manera conservadora la competencia por sitios del esquema de Langmuir–Hinshelwood y regula la accesibilidad a la superficie activa. En este estudio no se modela la atenuación de la irradiancia ni la oclusión óptica dentro del medio poroso, en consecuencia, la superficie fluido–sólido se considera uniformemente activa en el subdominio analizado. Esta hipótesis simplificadora permite aislar el acoplamiento hidrodinámico–reactivo y cuantificar límites superiores de conversión bajo iluminación suficiente. El análisis detallado de la profundidad fotoactiva (p. ej., capa activa superficial o ley de atenuación) queda como trabajo futuro, donde se incorporará una descripción óptica explícita o una función de activación dependiente de la distancia a la superficie expuesta. La Figura 3 esquematiza la configuración de contornos aplicada en el dominio, incluyendo condiciones de entrada, salida, simetría y diferenciación entre paredes inertes y reactivas.

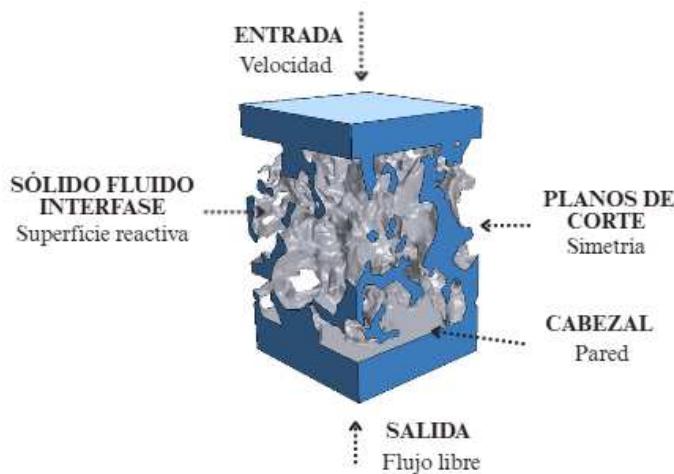


Figura 3: Condiciones de borde. La superficie superior del dominio es la entrada, y el cabezal superior la atmósfera.

### 3. MODELO NUMÉRICO

El flujo y el transporte reactivo en el dominio poroso se resolvieron empleando el software *STAR-CCM+*, a través del método de volúmenes finitos (FVM) con un enfoque segregado para mezclas de gases ideales multicomponente. La composición inicial de la mezcla se definió en función de condiciones de contaminación atmosférica típicas en entornos urbanos, con fracciones másicas representativas de los principales constituyentes y especies reactivas involucradas en la oxidación photocatalítica de  $\text{NO}_x$  (ver Sección 2.4).

El campo de flujo se obtuvo resolviendo las ecuaciones de Navier–Stokes para un fluido

incompresible y newtoniano:

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u}, \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (6)$$

donde  $\mathbf{u}$  es el vector velocidad,  $p$  la presión,  $\rho$  la densidad del gas y  $\mu$  la viscosidad dinámica. Las simulaciones se realizaron en régimen laminar, adecuado para las escalas características de la geometría porosa considerada. El transporte de cada especie se describió mediante la ecuación de advección-difusión-reacción:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla C_i = \nabla \cdot (D_i \nabla C_i) + R_i \quad (7)$$

donde  $C_i$  es la concentración molar de la especie  $i$  (convertida a fracción molar),  $D_i$  su coeficiente de difusión y  $R_i$  el término de reacción asociado. Este último incluye tanto las reacciones heterogéneas en superficie sobre  $\text{TiO}_2$  como las posibles transformaciones en fase gaseosa, implementadas en el módulo *Surface Chemistry* de STAR-CCM+. Para representar la complejidad multicomponente y la competencia por sitios activos, se adoptó una cinética del tipo Langmuir-Hinshelwood, que permite reproducir la dependencia de la velocidad de reacción con la irradiancia y la humedad relativa.

La interacción fluido-sólido se resolvió explícitamente en las paredes de la matriz porosa recubiertas con  $\text{TiO}_2$ , mientras que la dinámica de transporte y reacción de las especies se gestionó a través del acoplamiento entre *surface chemistry* y *complex chemistry*. Esta estrategia asegura la consistencia con la física de gases ideales y la representación detallada de los procesos de adsorción y catálisis heterogénea en la interfase. Las simulaciones se llevaron a cabo en régimen estacionario, iterando hasta alcanzar convergencia en las variables de flujo y concentración. La estabilidad se aseguró mediante sub-relajación y preacondicionamiento lineal como sigue: (i) flujo: factor de relajación 0,6 para velocidad y presión; (ii) especies: factor de relajación 0,9; (iii) energía: 0,3 en el fluido y 0,4 en el sólido. Los sistemas lineales asociados a cada ecuación se resolvieron con solver iterativo GMRes provisto por STAR-CCM+ utilizando preacondicionamiento ILU (incomplete LU). Estos parámetros se fijaron tras pruebas preliminares de estabilidad y garantizan convergencia monótona de los residuales y conservación de flujos integrados. Este planteo permitió obtener una descripción de alta fidelidad de la distribución espacial de  $\text{NO}$ ,  $\text{NO}_2$  y  $\text{NO}_3$  en el interior del medio poroso, así como de la utilización efectiva de la superficie catalítica y de los tiempos de residencia característicos.

## 4. RESULTADOS

### 4.1. Perfil de Evolución de la reacción y cierre estequiométrico

Se detalla la evolución axial de las especies y se verifica el cierre estequiométrico del nitrógeno a partir de la Figura 4, que muestra el perfil de fracciones másicas mediante líneas verticales que atraviesan el dominio. Se observa un frente de reacción abrupto, una vez iniciada la región reactiva: las fracciones másicas de  $\text{NO}$  y  $\text{NO}_2$ , que ingresan con valores de  $5,00 \times 10^{-5}$  y  $5,00 \times 10^{-6}$ , respectivamente, se reducen varios órdenes de magnitud en los primeros 2 a 3 mm. Luego de esta corta penetración, ambas especies descienden hasta niveles de traza cercanos a  $10^{-9}$ - $10^{-10}$ , lo que confirma que el consumo es prácticamente instantáneo. La velocidad de agotamiento indica que la cinética superficial no es limitante bajo estas condiciones, y que el proceso está gobernado por el transporte de especies hacia la superficie activa.

En paralelo, la fracción másica de  $\text{NO}_3$  crece en la misma región y se estabiliza en  $(1,08-1,10) \times 10^{-4}$ , consistente con el máximo estequiométrico esperado. El cierre se realizó a partir de las

fracciones másicas de N en cada especie ( $w_{N|NO} = 14/30$ ,  $w_{N|NO_2} = 14/46$ ,  $w_{N|NO_3} = 14/62$ ) y del nitrógeno total a la entrada  $Y_N^{in} = Y_{NO} w_{N|NO} + Y_{NO_2} w_{N|NO_2} \approx 2,49 \times 10^{-5}$ . De ello se obtiene  $Y_{NO_3}^{\max} = Y_N^{in}/w_{N|NO_3} \approx 1,09 \times 10^{-4}$ , en excelente acuerdo con el valor estacionario simulado, lo que confirma la coherencia estequiométrica del modelo, representada en la Tabla 2.

Tabla 2: Fracciones másicas de NO, NO<sub>2</sub> y NO<sub>3</sub> en el dominio poroso.

Parte	NO	NO <sub>2</sub>	NO <sub>3</sub>
Entrada	$5,000 \times 10^{-5}$	$5,000 \times 10^{-6}$	0
Sección de control	$2,710 \times 10^{-7}$	$2,710 \times 10^{-8}$	$1,091 \times 10^{-4}$
Salida	$9,098 \times 10^{-8}$	$9,099 \times 10^{-9}$	$6,139 \times 10^{-5}$

En conjunto, el análisis confirma tres aspectos principales: (i) la existencia de un frente de reacción muy delgado, con penetración de apenas unos milímetros; (ii) un valor estacionario de NO<sub>3</sub> que coincide con el máximo estequiométrico predicho; y (iii) una caída final asociada a efectos de dilución. Estos resultados evidencian que, en la escala del poro, la eficiencia intrínseca de la reacción fotocatalítica es prácticamente completa.

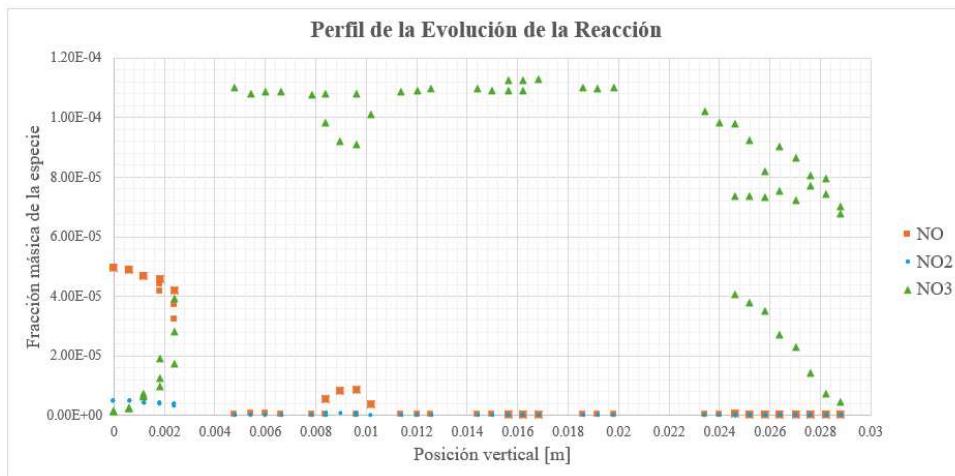


Figura 4: Perfil de variación de fracciones másicas de las especies, obtenidas mediante diferentes líneas verticales a lo largo del dominio de cálculo.

#### 4.2. Tasas de conversión de NO y NO<sub>2</sub>

La conversión de contaminantes se calculó a partir de un balance de especies en el dominio poroso. Para cada compuesto se empleó la expresión general  $X_i = (F_{i,in} - F_{i,out}) / F_{i,in} \times 100$  donde  $F_{i,in}$  y  $F_{i,out}$  representan los flujos másicos de la especie  $i$  a la entrada y a la salida, respectivamente. Este enfoque permite cuantificar la fracción de NO y NO<sub>2</sub> transformada en productos dentro de la matriz porosa, considerando el transporte y la reacción simultáneamente.

Los resultados de la simulación muestran conversiones de  $X_{NO} = 99,82\%$  y  $X_{NO_2} = 99,81\%$ , lo que revela un elevado grado de eficiencia en la eliminación de los precursores de NO<sub>x</sub>. Esta eficiencia debe interpretarse en el marco de la escala de análisis. En nuestro caso, el modelo reproduce el comportamiento confinado del gas en el interior de la red porosa, donde la superficie catalítica es extensa en relación con el volumen de fluido y el tiempo de residencia resulta elevado. En estas condiciones, la probabilidad de colisión entre moléculas reactivas y sitios activos se maximiza, produciendo conversiones prácticamente completas. Sumado a esto,

hay que recordar la hipótesis de irradiancia uniforme, que en futuros trabajos debería reconsiderarse teniendo en cuenta una penetración real de la luz en la estructura porosa.

A escala urbana, [Xie et al. \(2020\)](#) reportan reducciones mucho menores ( $\approx 1,35 - 5,11\%$  para NO y  $2,43 - 5,60\%$  para  $\text{NO}_2$ ) debido al contacto predominantemente tangencial con las superficies tratadas, al bajo cociente superficie/volumen del flujo atmosférico y a tiempos de residencia reducidos por la rápida dispersión. En contraste, los ensayos confinados en cámaras normalizadas (ISO 22197-1) controlan irradiancia, humedad y caudal, forzando el gas a atravesar la superficie activa con mayor accesibilidad y tiempos de residencia más altos; bajo estas condiciones, [Kim y Hong \(2023\)](#) reportan reducciones de  $\text{NO}_x$  de hasta 77,5% para contenidos del 7,5% de  $\text{TiO}_2$ , en buena concordancia con el desempeño esperado en lo mesoestructural.

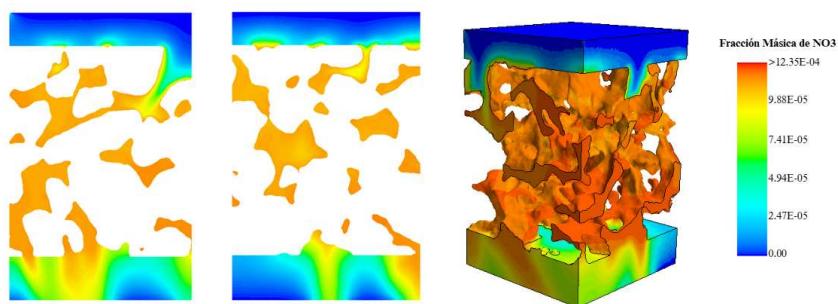


Figura 5: Evolución axial y distribución 3D de  $\text{NO}_3$ .

#### 4.3. Mesoestructura, transferencia de masa y localización de la reacción

La distribución de  $\text{NO}_3$  está gobernada por la geometría del poro: los estrechamientos canalizan el flujo y adelgazan la zona de mezcla junto a la pared, maximizando la transferencia de masa hacia la pared; las cavidades amplias inducen recirculación y dilución, con menor frecuencia de colisión gas-sólido y, por tanto, menor conversión local.

Cerca de la entrada, los máximos de producto se localizan junto a las paredes y en cuellos de sección, donde el contacto gas-sólido es inmediato y la conversión de NO y  $\text{NO}_2$  resulta prácticamente instantánea; las cavidades contiguas exhiben gradientes más suaves por dilución. A media altura, la conectividad entre poros distribuye el producto a través de canales preferenciales: los estrechamientos sostienen una producción intensa junto a la interfaz, mientras que las expansiones generan zonas de baja velocidad que actúan como reservorios temporales, homogeneizando parcialmente la mezcla pero reduciendo el flujo difusivo hacia la pared. Hacia la salida, el patrón se vuelve más uniforme sin perder su anclaje en las superficies activas. En síntesis, la eficiencia intrínseca emerge del acoplamiento geometría-transporte-reacción: variación de sección, conectividad y tiempos de residencia determinan la accesibilidad de la superficie catalítica. Esta interpretación se sustenta cualitativamente en los cortes transversales de la Figura 6.

## 5. CONCLUSIONES

Este trabajo abordó el desempeño fotocatalítico del hormigón drenante a partir de mesoestructuras reales reconstruidas a partir de CT y DNS del acoplamiento flujo-difusión-reacción en  $\text{TiO}_2$ . Con este marco, y sin recurrir a homogeneizaciones, se resolvió cómo la variación de sección y la conectividad del poro gobiernan la accesibilidad a la superficie activa y la localización de la conversión. Los resultados muestran un frente de reacción delgado (del orden de milímetros), con agotamiento casi instantáneo de NO y  $\text{NO}_2$  y conversiones de 99,81% bajo

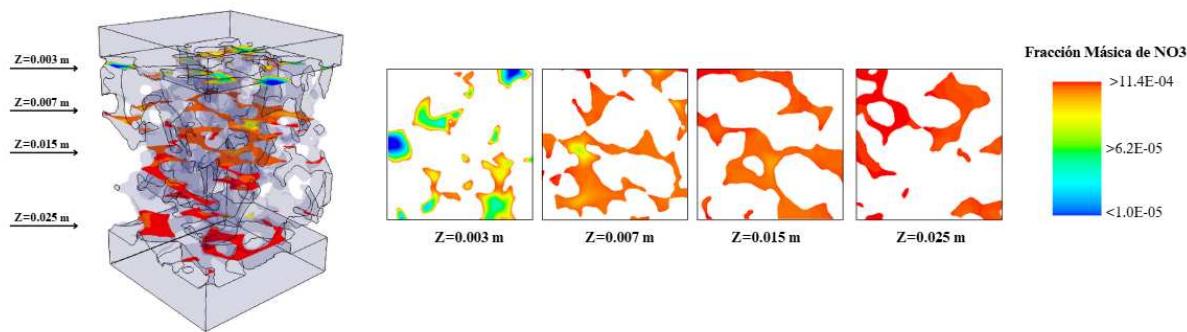


Figura 6: Distribución de  $\text{NO}_3$  en cortes transversales a distintas profundidades.

condiciones confinadas. La reactividad se ancla a las paredes y se intensifica en cuellos, mientras que en las expansiones se crean regiones de baja renovación que favorecen la homogeneización. Estas evidencias clarifican la brecha entre escalas: a diferencia de las condiciones heterogéneas y las simplificaciones exigidas a escala urbana, la evaluación en la mesoestructura fija un límite superior de eficiencia de las reacciones en esas condiciones.

Desde el punto de vista de diseño, los patrones obtenidos en la mesoestructura sugieren criterios transferibles: gestionar tiempos de residencia, maximizar la accesibilidad de superficie (relación área–volumen, conectividad efectiva) y minimizar volúmenes muertos que penalizan el flujo difusivo hacia la pared. No menos importante es garantizar niveles de radiación que permitan la actividad catalítica en todo el interior del material. El enfoque propuesto abre la posibilidad de incorporar condiciones transitorias de irradiancia y humedad, estudiar acumulación y adsorción de productos, y realizar análisis de sensibilidad de parámetros cinéticos. Así, este trabajo consolida al hormigón drenante photocatalítico como una solución de alto potencial para mitigación de  $\text{NO}_x$ , y ofrece una base metodológica para su optimización y futura implementación en estrategias de mitigación de contaminantes atmosféricos.

## AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el financiamiento provisto por el PID-UTN-10015.

## REFERENCIAS

- Kim H. y Hong K. Evaluation of Nitrogen Oxide Reduction Performance in Permeable Concrete Surfaces Treated with a  $\text{TiO}_2$  Photocatalyst. *Materials*, 16:5512, 2023. <http://doi.org/10.3390/ma16165512>.
- Rossler M., Battaglia L., y Kler P. X-ray computed tomography-based direct numerical simulations for hydraulic characterization of pervious concrete. *Construction and Building Materials*, 498:143913, 2025. <http://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2025.143913>.
- Xie X., Hao C., Huang Y., y Huang Z. Influence of  $\text{TiO}_2$ -based photocatalytic coating road on traffic-related  $\text{NO}_x$  pollutants in urban street canyon by CFD modeling. *Science of The Total Environment*, 724:138059, 2020. <http://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.138059>.
- Zhang Y., Zhou Y., Dong X., Xi X., y Dong P. Recent advances in  $\text{TiO}_2$ -based photocatalytic concrete: Synthesis strategies, structure characteristics, multifunctional applications, and CFD simulation. *Chemical Engineering Journal*, 496:154186, 2024. <http://doi.org/10.1016/j.cej.2024.154186>.